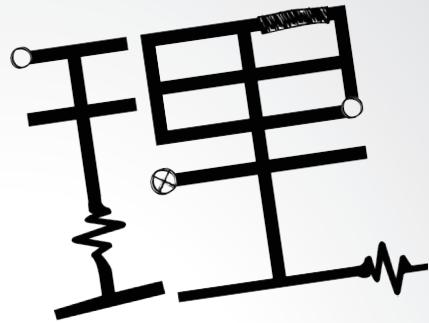
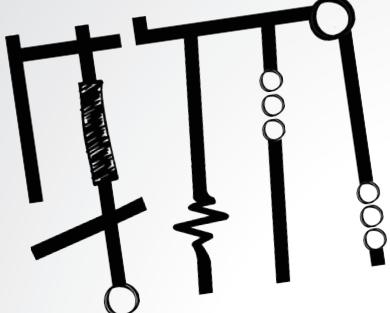


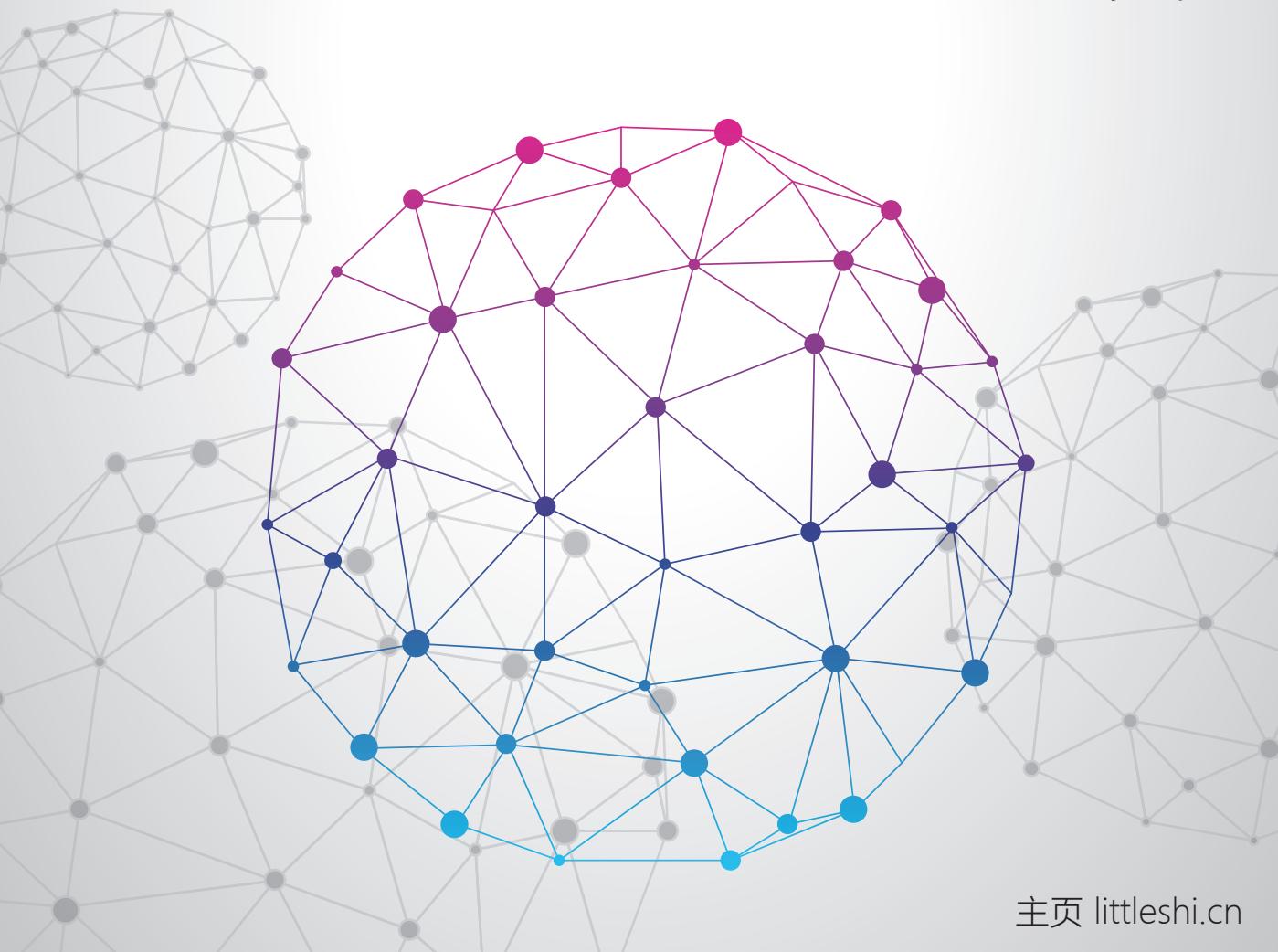
小时



百科

力学与相关数学

小时编



谨以此页向所有尊重版权的读者致敬！

版权声明

由于电子书的种种优势，我一直对电子书有一种独特的感情，希望有一天所有的中文教材都能实现电子化。然而遗憾的是国内的电子教材尚未普及，这里面可能的原因包括版权保护，正版销售平台和设备的普及率低等。

而另一方面，即使使用正规平台销售的电子教材，相对于 PDF 文件而言也还有相当的局限性，包括只能在特定的软件中阅读，注释的种类有限，不支持所有的设备和操作系统，不支持打印等。

考虑到以上的种种原因，我最后决定永久提供本书 PDF 的免费下载，并将捐赠及自觉付款和捐款作为主要的收入方式。这是一个非常艰巨的决定，因为本书的写作需要花费巨大的时间¹ 和金钱²，另一方面，本书的特色之一就是能利用 PDF 文件的普及性，注释功能，超链接功能和检索功能等优势。

在未来一段时间内，本书都会仍处于创作阶段（以下称为非正式版），内容上有许多不完整。对于非正式版，读者可以免费使用，且在不修改文件的条件下自由拷贝，但也鼓励对本书捐款。从本书首个正式版起，将要求每位读者在试读累计 3 小时后以自觉付款的形式购买本书，否则所持有的任何拷贝都视为盗版。

若发现本书内容有误，请先核对本书最新版核对，再与作者联系。若有任何建议也欢迎联系。最后，若以任何方式引用本书内容或插图，请注明出处并给出链接，在任何出版物上使用本书内容需经过作者同意。

本书的最新版本，作者的联系方式及捐款方式见作者的个人网站 littleshicn.com。

¹保守估计，目前花费的时间在 1000 小时以上

²包括 TeX 排版费，以及购买 Microsoft Office，MathType，Adobe Illustrator，Matlab，Mathematica 等软件的费用

关于本书

1. 内容

与真正的百科（例如维基百科）不同的是，《小时物理百科》系列更偏向于教材而不仅仅是一本供专业人士查阅的工具书。本书的主要面向的人群是：

1. 具有一定的高中数学物理基础，但没有上过任何大学数理课程，想自学大学物理的读者。
2. 正在上相关大学物理课程的读者（作为参考书或预习使用）。
3. 本科已经毕业，想重温或巩固本科内容的读者。
4. 已学过本书内容，但需要经常查阅相关公式定理的读者。

本书作为《小时物理百科》系列的第一本（力学分册），涵盖了物理专业本科生所学的力学课程（通常是第一门专业物理课程）及少许理论力学课程（以下统称为**经典力学**）的内容，以及书中所需的所有超出高考大纲的数学内容（高等数学，线性代数等）。

本书可以帮助读者迅速了解力学的理论框架，配有若干例题，但暂不设习题，不设物理学史等拓展内容，因此不能代替相关课程的教材。

全书分为两个部分，数学部分介绍了力学部分涉及的任何超出高中数学的内容，包括数学拾遗，一元微积分，线性代数，多元微积分与计算物理六章。与标准的本科高等数学教材（如同济大学的《高等数学》和《线性代数》）相比，数学部分忽略了许多细节，也忽略了一些物理部分不需要使用的内容。这样，读者可以尽早开始学习物理而无需花费太多时间在数学上。力学部分主要讲解了牛顿的经典力学，包括质点，质点系与刚体，振动与波动，天体运动与中心力场，理论力学五章。

2. 结构和特点

与其他教材不同，本书更接近于百科的形式，由许多词条构成。一个词条从半页到几页不等，可能包括“预备知识”，“结论”，“推导”，“例”，“应用实例”，“拓展阅读”等不同的组成部分。理论上来说，读者可以直接跳到最感兴趣的词条，如果“预备知识”里面列出的词条都已经掌握，就可以开始学

习该词条³, 否则就先掌握“预备知识”里面的词条, 以此类推. 这种学习方法的好处在于无需按照课程的顺序学习, 因此本书在结构上具有很大的优势. 读者甚至可以根据自己的目标词条, 画出一个知识结构图, 这样就可以对知识结构做到一览无余, 用最高的效率攀登目标词条.

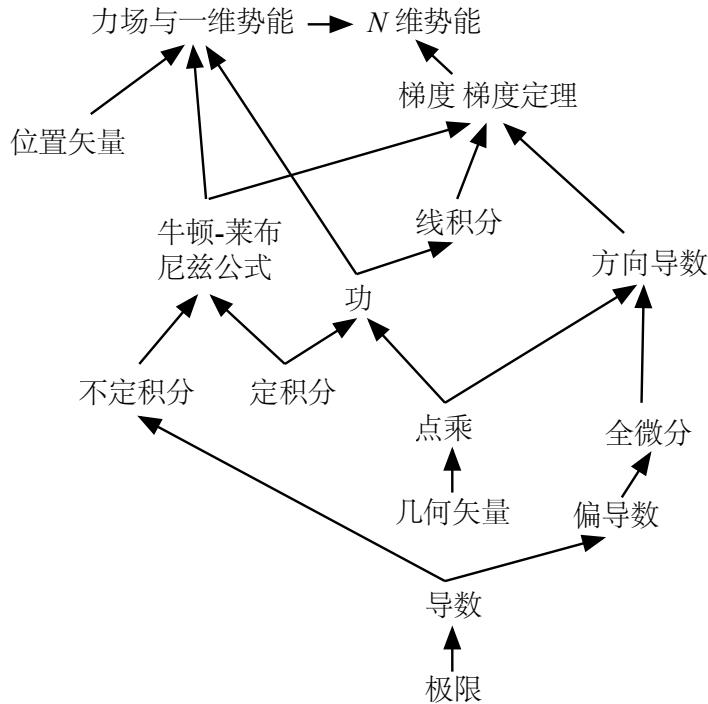


图 1: 示例: 由“预备知识”画出的知识结构图 (目标词条为“力场 势能^[161]”)

需要注意的是, 由于本书内容繁多, 不同词条的重要性相去甚远, 不建议初学者按照词条的排列顺序依次学习, 而是应该以每一章节给出的“导航”(第一个词条)为主线来学习, 再根据兴趣和需要阅读其余词条.

为了便于书内的跳查, 词条之间进行了大量的交叉引用, 例如“导数简介^[28]”右上角中括号中的数字代表被引用词条的页码. 由于每个词条的公式编号都从 1 开始, 引用其他词条中的公式有时会用类似“式 2^[29]”的格式, 右上角的方括号是公式所在的页码. 在本书的 PDF 电子版中, 点击该页码即可自动跳转到对应的页面. 在电脑上阅读, 推荐使用 Adobe Reader 阅读器, 在苹

³如果“预备知识”出现在词条开始, 则必须先掌握, 如果出现在某个小标题下方, 则只有阅读该部分时需要掌握

果[®] 的 iOS 设备上推荐使用 GoodReader 应用（两个软件都可以在不同的面板中打开同一本书的不同页码）。在 Adobe Reader 中，使用快捷键组合“Alt + 左箭头”即可返回跳查前的位置，在移动设备的阅读软件中通常也有相应的返回按钮。由于本书的电子版是原生 PDF（区别于扫描版），还具有占用设备存储空间小，便于分享，便于查找关键字等种种优势。

4. 更新

本书更新速度较快，为保证阅读质量，请及时下载最新版。下载链接见作者的个人网站 littleshicn.com。如果网页出现故障，请发邮件到 270174408@qq.com 报错。

经典力学及其他物理理论

物理学理论的可证伪性

著名的奥地利哲学家波普尔（Popper）对科学的划界是：一个命题是科学的，当且仅当它是可证伪的。如果有人提出一个物理理论，那么既可以尝试用它来计算已有的实验结果，也可以用它来预言一些没有做过的实验结果。如果在实验误差范围内，所有实验与理论计算得到的结果一致，那么就还没有证据表明这个理论是错误的，但也不能说它是绝对正确的。毕竟人们永远也不可能把一个理论的每一种实验，每一套参数都做一遍。然而一旦有一个实验与该理论的计算结果不相符，那么就可以证明这个理论是错误的⁴，这就是物理学理论的可证伪性。

然而可惜的是，在物理学中目前还没有一个理论可以在任意范围内解释实验或观测结果，所有的理论（如牛顿力学，相对论，量子力学，量子场论）都只在一定的范围内成立。我们能做的仅仅是不断创造与实验符合得更精确，且适用范围更广的理论。这样一来，给一个曾经普遍接受的理论打上“错误”的标签似乎有些不妥，于是我们一般称其为“在适用范围内成立”。

物理理论的适用范围 经典力学的价值

经典力学在“宏观低速”的范围内适用。粗略而言，“宏观”要求物体的质量远大于原子的质量，“低速”要求物体的速度远小于光速。事实上还有一个条件是“弱引力场”，例如由于水星离太阳较近，引力场较强，导致其轨道与经典力学的计算出现偏差（轨道进动）。所以严格来说，经典力学是一个错误的理论。

若上述中只有“低速”条件不满足，我们就需要使用狭义相对论，若“弱引力场”条件不满足，就需要广义相对论（狭义是广义相对论的一部分），若“宏观”条件不满足，就需要量子力学，若都不满足，那么现在还没有非常完善的理论可以计算（叫做量子场论，**Quantum Field Theory**）。

以相对论（狭义和广义的统称）为例，它所适用的范围既包含了经典力学适用的范围，又包含了“高速”和“强引力场”，所以原则上相对论可以完全

⁴当然首先要考虑是否存在计算错误，实验操作失误，或者存在未考虑到的因素

取代经典力学。由于经典力学在适用的范围内已经得到几百年来大量的实验验证，那么如果相对论是正确的，在经典力学适用的范围内，用相对论计算问题就应该得到同样的结果⁵。值得注意的是，相对论提出的一些物理概念与经典力学大相径庭。经典的万有引力定律提出任何两个物体之间都存在万有引力，而相对论却指出并不存在引力，而是有质量的物体扭曲了周围的时空，使周围物体的运动方式不同。既然相对论的适用范围更广，那么至少从目前看来相对论提出的原理才是正确的，而经典力学的原理就是错误的。

既然原理不对，应用范围又相对窄，为什么我们还要先学习经典力学呢？首先无论在概念上还是数学上，它比相对论简单得多。其次在日常生活或生产中我们接触的绝大部分运动都在经典力学的适用范围内。第三，相对论中同样会出现“参考系”，“速度”，“能量”，“动量”，等概念，这些概念只有先学习经典力学才会有一个初步的认识，才能继续学习相对论。最后，通过学习经典力学可以了解物理中常见的数学工具，包括一些基础的微积分，矢量分析，线性代数等，这些数学在物理的其他领域更是无处不在。

以上论述同样适用于量子力学与经典定律的关系。量子力学除了经典力学的范围，还包括了“微观”范围。总而言之经典力学在现代的物理学中只是一个简单的近似模型，提出的一些概念并不正确，公式也只是一种近似。一些“民间科学家”时常企图“推翻牛顿定律”，显然是还不了解这点。

另一方面，即使是相对论和量子力学也并非完美无瑕，通常所说的量子力学是指“非相对论量子力学”，即同样要求“低速”和“弱引力场”。目前，“相对论量子力学”的理论还并不完善，是许多理论物理学家努力的方向。

⁵准确来说，二者计算结果的误差需要在实验的测量误差范围内。

目录

第一部分 数学

第一章 数学拾遗

二项式定理 [3] 二项式定理（非整数幂） [4] 充分必要条件 [5] 极坐标系 [6] 柱坐标系 [7] 球坐标系 [8] 球坐标与直角坐标的转换 [10] 圆锥曲线的极坐标方程 [11] 椭圆 [13] 双曲线 [15] 复变函数 [16] 指数函数（复数） [17] 三角函数（复数） [18]

第二章 一元微积分

微积分导航 [21] 极限 [22] 小角正弦极限 [24] 自然对数底 [25] 切线与割线 [26] 导数 [28] 求导法则 [31] 反函数求导 [33] 基本初等函数 [35] 基本初等函数的导数 [36] 导数与函数极值 [40] 用极值点确定函数图像 [41] 一元函数的微分 [43] 一元复合函数求导（链式法则） [44] 泰勒展开 [47] 不定积分 [50] 积分表 [52] 定积分 [57] 牛顿–莱布尼兹公式 [60] 换元积分法 [62] 分部积分法 [64] 多维球体的体积 [66] 二阶常系数齐次微分方程 [69] 二阶常系数非齐次微分方程 [70] 正交函数系 [72] 傅里叶级数（三角） [74] 傅里叶级数（指数） [78] 偏导数 [81] 全微分 [83] 复合函数的偏导 链式法则 [85] 全导数 [87]

第三章 线性代数

线性代数导航 [89] 矢量点乘 [91] 矢量叉乘 [93] 矢量叉乘分配律的几何证明 [98] 连续叉乘的化简 [99] 三矢积 [100] 正交归一基 [102] 线性变换 [103] 矩阵 [104] 平面旋转变换 [107] 平面旋转矩阵 [108] 行列式 [109]

第四章 多元微积分

矢量的导数 求导法则 [113] 方向导数 [115] 矢量场 [118] 极坐标中单位矢量的偏导 [119] 极坐标中的矢量偏导 [120] 线积分 [121] 梯度 梯度定理 [122]

第五章 计算物理

计算物理导航 [128] Matlab 编程基础 [130] 弹簧振子受迫运动的简单数值计算 [145]

第二部分 力学

第一章 质点

位置矢量 位移 [150] 速度 加速度 (一维) [151] 速度 加速度 [153] 匀速圆周运动的速度 (几何法) [154] 匀速圆周运动的速度 (求导法) [155] 匀速圆周运动的加速度 (几何法) [156] 匀速圆周运动的加速度 (求导法) [157] 牛顿运动定律 惯性系 [157] 功 功率 [159] 动能 动能定理 (单个质点) [160] 力场 势能 [161] 机械能守恒 (单个质点) [166] 动量 动量定理 (单个质点) [166] 角动量定理 角动量守恒 (单个质点) [167] 简谐振子 [169] 受阻简谐振子 [170] 惯性力 [172] 离心力 [175] 科里奥利力 [176] 地球表面的科里奥利力 [178]

第二章 质点系与刚体

质心 质心系 [181] 二体系统 [183] 质点系的动量 [185] 动量定理 动量守恒 [186] 质点系的动能 柯尼西定理 [187] 力矩 [189] 刚体的静力平衡 [191] 角动量 [192] 角动量定理 角动量守恒 [194] 刚体的转动 转动惯量 [196] 常见几何体的转动惯量 [197] 刚体的运动方程 [200] 浮力 [202]

第三章 振动与波动

平面波的复数表示 [204]

第四章 天体运动与中心力场

万有引力 引力势能 [206] 开普勒问题 [208] 反开普勒问题 [210] 罗瑟福散射 [211] 开普勒第一定律的证明 [212] 开普勒第二定律的证明 [215] 开普勒第三定律的证明 [216] 比耐公式 [217]

第五章 理论力学

拉格朗日方程 [219] 哈密顿原理 [225]

第三部分 其他分册预览

第一章 数学

堆放排列组合 [229] 雅可比行列式 [230] Γ 函数 [231] 高斯分布（正态分布） [233] 散度 散度定理 [234] 柱坐标系中的拉普拉斯方程 [237] 球坐标系中的梯度散度旋度及拉普拉斯算符 [239] 勒让德多项式的生成函数 [240] 球谐函数 [241] 贝赛尔函数 [242] 球贝塞尔函数 [243] 傅里叶变换（指数） [245] 离散傅里叶变换 [247] 证明闭合曲面的法向量面积分为零 [249] 平均值的不确定度 [250]

第二章 理论力学

经典力学笔记 [253]

第三章 电动力学

电流 [257] 电荷守恒 电流连续性方程 [257] LC 振荡电路 [258] 比奥萨伐尔定律 [259] 洛伦兹力 [262] 磁场的能量 [264] 磁通量的定义 [266] 磁旋比 玻尔磁子 [267] 安培力 [268] 磁场中闭合电流的合力 [270] 闭合电流在磁场中的力矩 [271] 电磁场的动量守恒 动量流密度张量 [273] 电场的高斯定理 [277] 法拉第电磁感应定律 [282] 电磁场的能量守恒 坡印廷矢量 [283] 非齐次亥姆霍兹方程 推迟势 [286] 电场波动方程 [289] 介质中的波动方程 [290] 菲涅尔公式 [291] 盒中的电磁波 [293] 拉格朗日电磁势 [295]

第四章 量子力学

原予单位 [297] 电子轨道与元素周期表 [300] 玻尔原子模型 [303] 类氢原子的约化质量 [305] 康普顿散射 [306] 概率流密度 [307] 能量归一化 [309] 氢原子基态的波函数 [310] 算符对易与共同本征函数 [312] 算符的矩阵表示 [315] 无限深势阱 [318] 有限深球势阱 [320] 升降算符 [321] 简谐振

子（升降算符）[\[322\]](#) 简谐振子升降算符归一化[\[325\]](#) 简谐振子升降算符归一化[\[326\]](#) 简谐振子（级数）[\[327\]](#) 高斯波包[\[328\]](#) 轨道角动量[\[330\]](#) 轨道角动量升降算符归一化[\[333\]](#) 自旋角动量[\[334\]](#) 直积空间[\[335\]](#) 角动量加法[\[337\]](#) 球坐标和柱坐标中的径向方程[\[339\]](#) 数值解薛定谔方程[\[341\]](#) 氢原子的波函数[\[342\]](#) 含时微扰理论[\[344\]](#) 几种含时微扰[\[347\]](#) 含连续态的微扰理论[\[349\]](#) 量子散射 分波展开[\[351\]](#) 波恩近似（散射）[\[353\]](#)

第五章 热学与统计力学

统计力学公式大全[\[356\]](#) 分子平均碰壁数[\[360\]](#) 相空间[\[362\]](#) 理想气体的状态密度（相空间）[\[363\]](#) 理想气体单粒子能级密度[\[364\]](#) 理想气体（微正则系综法）[\[365\]](#) 理想气体（正则系综法）[\[366\]](#) 理想气体（巨正则系综法）[\[369\]](#) 巨正则系综法[\[372\]](#) 量子气体（单能级巨正则系综法）[\[374\]](#) 量子气体（巨正则系综）[\[376\]](#) 物理学常数定义[\[377\]](#)

第四部分 小时物理笔记

电磁场角动量分解[\[380\]](#) 晶体衍射[\[382\]](#) Hartree-Fork 方法[\[384\]](#) 本书格式规范[\[389\]](#)

第一部分

数学

第一章

数学拾遗

二项式定理

预备知识 排列组合

结论

二项式展开公式为

$$(a+b)^n = \sum_{i=0}^n C_n^i a^i b^{n-i} \quad (n \text{ 为整数}) \quad (1)$$

其中

$$C_n^i = \frac{n(n-1)\dots(n-i+1)}{i!} = \frac{n!}{i!(n-i)!} \quad (2)$$

推导

若展开多项式的时候先不合并同类项（每项前面的系数都是 1）则

- $(a+b)^0 = 1$ 有 1 项
- $(a+b)^1 = a+b$ 有 2 项
- $(a+b)^2 = aa + ab + ba + bb$ 有 4 项
- $(a+b)^3 = aaa + aab + aba + abb + baa + bab + bba + bbb$ 有 8 项
- \vdots
- $(a+b)^n$ 有 2^n 项 (若不合并相同项).

这就相当于用 a 和 b 填满 n 个有序的位置，每个位置都可以取 a 或 b ，共有 2^n 种排列，每种排列就是一项，所以共有 2^n 项。

下面把 2^n 项中的相同项进行合并，把其中出现了 i 个 a 及 $n-i$ 个 b 的项都记为 $a^i b^{n-i}$ ，那么共有 C_n^i 个这样的项。把他们相加得 $C_n^i a^i b^{n-i}$ 。所以

$$(a+b)^n = \sum_{i=0}^n C_n^i a^i b^{n-i} \quad (3)$$

证毕

二项式定理（非整数幂）

预备知识 二项式定理^[3]

当 a, b 为实数, u 为非零实数时, 有

$$(a+b)^u = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{u(u-1)\dots(u-i+1)}{i!} a^i b^{u-i} \quad (1)$$

容易看出, 当 u 为整数时, $i > u$ 的所有项为 0, 得到整数指数的二项式定理^[3].

数值验证

在学习微积分之前, 这里只给出一个数值验证的方法 (而不是证明). 在微积分中, 这个定理可以用泰勒展开^[47] 推导出来。

首先化简上式, 不妨令 $|a| < |b|$, 把 b^u 提出括号, 再令 $x \equiv a/b$, 有 $|x| < 1$.

$$(a+b)^u = b^u (1+x)^u = b^u \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{u(u-1)\dots(u-i+1)}{i!} x^i \quad (2)$$

所以只要用数值验证

$$(1+x)^u = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{u(u-1)\dots(u-i+1)}{i!} x^i \quad (3)$$

即可. 接下来, 可以用计算器或程序对式 3 的前 N 项进行求和. 如果增加 N 使结果趋近精确值, 则验证成功 (见下表). 这里给出计算下表的 Matlab 程序^[??].

表 1: 数值验证二项式定理 (非整数幂)

$(1+x)^u$	$N = 5$	$N = 20$	$N = 100$	精确值前 8 位
$x = 0.5, u = -0.3$	0.88445640	0.88546751	0.88546749	0.88546749
$x = 0.6, u = 3.1$	4.2930453	4.2931093	4.2931093	4.2931093

充分必要条件

若由命题 A 能推导出命题 B , 则 A 是 B 的充分条件, B 是 A 的必要条件. 如何理解这个定义呢? 下面举两个例子.

例 1

命题 A : 行星 X 是地球. 命题 B : 行星 X 有一颗天然卫星.

首先我们考虑 A 对 B 的关系. 显然, 由 A 可以推出 B , 说明 A 中有充分的信息能得到 B , 所以叫做 B 的充分条件. A 中包括得到 B 所必要的信息, 还可能包括一些其他信息, 例如由命题 A 可以得出 X 星球上面有氧气, 有液态水, 有生物, 等等. 这些多出来的信息并不一定是得到 B 所必须的, 因为还有许多其他行星有一颗天然卫星, 但并没有液态水或者氧气等.

那如何判断 A 中有没有多余的信息呢? 我们可以反过来试图用 B 推导命题 A , 若原则上得不出 A (而不是因为我们逻辑水平不够), 则证明 A 中有多余的条件. 这时我们说 A 不是 B 的必要条件, 因为 A 中的一些信息是多余的, 也就是没有必要的. 综上, A 是 B 的充分非必要条件.

现在我们从 B 的角度考虑. 虽然由条件 B 不能推导出条件 A , 但是 B 是 A 中信息的一部分, B 必须要成立才有可能使 A 成立, 也就是说如果 B 不成立 A 就不可能成立 (没有卫星的行星 X 绝对不可能是地球). 所以说 B 是 A 的必要条件. 另外, 由 B 中的少量信息不能得到 A , 所以 B 不是 A 的充分条件. 综上, B 是 A 的必要非充分条件.

例 2

命题 A : 三角形 X 的其中两内个角分别为 90° 和 45° . 命题 B : 三角形 X 有两个 45° 的内角.

利用三角形三个内角和为 180° 的事实, 可以从 A 推出 B , 说明 A 是 B 的充分条件, B 是 A 的必要条件. 但也可以从 B 推出 A , 说明 B 是 A 的充分条件, A 是 B 的必要条件. 所以 A 和 B 既是彼此的充分条件也是彼此的必要条件. 所以我们说 A 和 B 互为充分必要条件. 若 A 是 B 的充分必要条件, B 一定也是 A 的充分必要条件. 因为两种表述都意味着 A , B 命题等效, 所提供的信息都是一样的, 两者都没有任何多余的信息.

需要注意的是

1. 充分/必要条件是两个命题之间的关系，若直说一个命题是充分/必要条件没有意义。
2. 讨论充分/必要条件需要在一定的前提下进行。以上的例子中，例 1 的前提如：我们讨论的是现在的地球和其它行星，而不是很久以前或以后。例 2 的前提如：我们讨论的是欧几里得几何中的平面三角形。
3. 在证明 A 是 B 的充分必要条件时，需要分别证明 A （相对于 B ）的充分性和必要性。充分性需要由 A 证明 B ，必要性需要由 B 证明 A 。
4. 在证明 A 是 B 的充分非必要条件时，除了需要证明 A 的充分性，还需非必要性，即 B 不能推出 A 。只要我们可以举出一个 B 成立 A 不成立的反例，就立刻证明了不可能由 B 推出 A 。

极坐标系

预备知识 平面直角坐标系，矢量

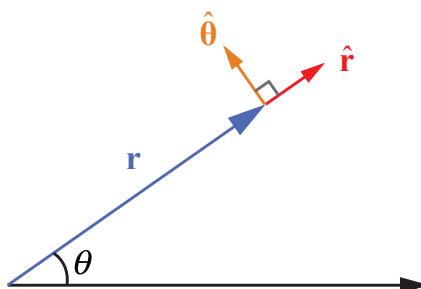


图 1: 极坐标系和两个单位矢量

在平面上取一个点作为极点，过极点的一条轴作为极轴。选定极轴的正方向，规定单位长度。该平面上某点与原点连成的线段叫做极径，其长度一般用 r （或 p ）表示。若 r 为负值，则表示反方向的长度。极径与极轴的夹角叫做极角（规定逆时针旋转极角增加，顺时针旋转则减少），用 θ 表示。若 θ 为负

值，则表示从极轴开始延顺时针方向转动 $|\theta|$ 角。 θ 的值通常表示成弧度。于是任何一点都可以用两个有序实数 (r, θ) 来表示其在该平面上的位置，这就是一个点的极坐标。

一般以坐标名上面加单位矢量符号表示该坐标对应的单位矢量。例如直角坐标系中， \hat{x} （有时也记为 \hat{i} ）是 x 坐标增加方向的单位矢量。所以在极坐标中，定义 \hat{r} 为 r 增加的方向的单位矢量， $\hat{\theta}$ 为 θ 坐标增加方向的单位矢量（即 \hat{r} 逆时针旋转 $\pi/2$ 的方向）。必须注意的是， \hat{r} 与 $\hat{\theta}$ 互相垂直，构成一对单位正交基底，平面上的任意向量都可以正交分解到这两个方向上。通常把 \hat{r} 的方向叫做径向，把 $\hat{\theta}$ 的方向叫做法向。

拓展阅读 极坐标中单位矢量的偏导，正交曲线坐标系

柱坐标系

预备知识 极坐标系^[6]

若在原有的直角坐标系上定义柱坐标系（图 1），可用三个变量 (r, θ, z) 描述三维空间中任意一点。其中 r 代表该点到 z 轴的距离 ($r \geq 0$)， θ 代表与 x 轴的夹角， z 与直角坐标系相同。

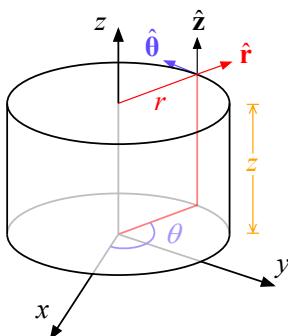


图 1：定义柱坐标系

单位矢量

柱坐标系中的单位矢量如图 1 中的 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}, \hat{\mathbf{z}}$ 所示. 与直角坐标系不同的是, 三个单位矢量与具体的坐标相关, 不是常矢量. 这在矢量求导时非常关键.

与直角坐标系之间的变换

根据三角函数相关定义以及勾股定理, 显然有

$$\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \\ z = z \end{cases} \quad \begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta = \arctan 2(x, y) \\ z = z \end{cases} \quad (1)$$

其中 $\arctan 2(x, y)$ 在第一四象限中就是我们熟知的 $\arctan(y/x)$, 但无法表示其他象限. 为了解决这个问题, 一些编程语言中加入了 $\arctan 2$. 这里将其定义为

$$\arctan 2(x, y) \equiv \begin{cases} \arctan(y/x) & (x > 0) \\ \pi/2 & (x = 0, y > 0) \\ -\pi/2 & (x = 0, y < 0) \\ \arctan(y/x) + \pi & (x < 0, y \geq 0) \\ \arctan(y/x) - \pi & (x < 0, y < 0) \end{cases} \quad (2)$$

球坐标系

预备知识 位矢^[150], 矢量的叉乘^[93]

球坐标

三维直角坐标系中的一点 P 的位置可以用 (r, θ, ϕ) 这 3 个有序实数来表示, 称为该点的球坐标 (图 1). 其中 r 表示该点到原点的距离 ($r \geq 0$), 即位矢^[150] 的模长; θ 表示该点的位矢与 z 轴的夹角 ($\theta \in [0, \pi]$), 即极角; ϕ 表示该点的位矢在 $x - y$ 平面上的投影与 x 轴的夹角 ($\phi \in [0, 2\pi]$ 或 $[-\pi, \pi]$), 即方位

角. 注意有些教材中用 θ 表示方位角, ϕ 表示极角, 或者将 ϕ 记为 φ , r 记为 ρ 等, 需要通过上下文判断每个坐标符号的具体含义.

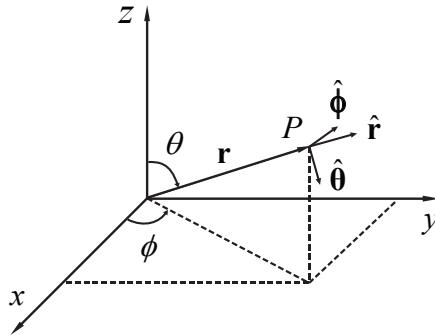


图 1: 球坐标系

球坐标系中的单位矢量

三个球坐标分别有对应的单位矢量 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \hat{\boldsymbol{\phi}}$ (如图). 定义它们的方向分别指向对应坐标增加的方向, 例如 r 增加时, 点 $P(r, \theta, \phi)$ 就向 $\hat{\mathbf{r}}$ 的方向移动. 三个单位矢量两两垂直, 形成一组正交归一基底, 任意三维矢量都可以表示成它们的线性组合. 即

$$\mathbf{v} = (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{r}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}) \hat{\boldsymbol{\theta}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}) \hat{\boldsymbol{\phi}} = v_r \hat{\mathbf{r}} + v_\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} + v_\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (1)$$

与直角坐标系不同的是, 按照定义, 球坐标的三个单位矢量是关于 θ 和 ϕ 的函数. 即 $\hat{\mathbf{r}}(\theta, \phi)$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}(\theta, \phi)$, $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\phi)$. 例如 P 的球坐标为 $(1, \pi/2, 0)$, 直角坐标为 $(1, 0, 0)$ 时, $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}} = -\hat{\mathbf{z}}$, $\hat{\boldsymbol{\phi}} = \hat{\mathbf{y}}$. 但是球坐标为 $(1, \pi/2, \pi/2)$, 直角坐标为 $(0, 1, 0)$ 时, $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{y}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}} = -\hat{\mathbf{z}}$, $\hat{\boldsymbol{\phi}} = -\hat{\mathbf{x}}$. 一般地, 对于球坐标为 (r, θ, ϕ) 的点 $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 与 $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$, $\hat{\mathbf{z}}$ 的关系见球坐标与直角坐标的转换^[10]. 另外注意改变 r 时 $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 都保持不变, 且 $\hat{\boldsymbol{\phi}}(\phi)$ 仅由坐标 ϕ 决定.

三个坐标按照 (r, θ, ϕ) 排序, 是为了使对应的单位矢量满足 $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\boldsymbol{\phi}}$ (类比直角坐标系的三个单位矢量必须满足 $\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{z}}$, 见矢量的叉乘^[93]). 这也是所有正交曲线坐标系的要求.

球坐标系中矢量的两种表示方法

球坐标系中，矢量可以用球坐标 (r, θ, ϕ) 表示，即矢量以原点为起点，以终点的球坐标表示该矢量。

更常见的方法，是将矢量投影到 3 个单位矢量上（当然，要说明是关于哪个点的单位矢量），用单位矢量的线性组合来表示。在矢量分析中，这种方法常用于表示矢量场。

例如任意一点 $P(r, \theta, \phi)$ 的位矢^[150] 都可以表示为 $r\hat{\mathbf{r}}$ 。又如原点处电荷 q 产生的电场为 $\mathbf{E} = kq\hat{\mathbf{r}}/r^2$ 。又如一个绕 z 轴逆时针旋转（角速度 ω ）的圆柱，在 P 点的线速度为

$$\mathbf{v} = \omega r \sin \theta \hat{\phi} \quad (2)$$

球坐标与直角坐标的转换

预备知识 球坐标系的定义^[8]

结论

根据球坐标的定义，可得两种坐标之间的变换关系

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta = \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\ \phi = \arctan \frac{y}{x} \end{cases} \quad (2)$$

以及两组基底之间的变换关系

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{r}} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\theta} = \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} - \sin \theta \hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\phi} = -\sin \phi \hat{\mathbf{x}} + \cos \phi \hat{\mathbf{y}} \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{x}} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \cos \phi \hat{\boldsymbol{\theta}} - \sin \phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \\ \hat{\mathbf{y}} = \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{r}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\boldsymbol{\theta}} + \cos \phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \\ \hat{\mathbf{z}} = \cos \theta \hat{\mathbf{r}} - \sin \theta \hat{\boldsymbol{\theta}} \end{cases} \quad (4)$$

推导

把空间中一点 P 的位矢 $r \hat{\mathbf{r}}$ 分解为垂直于 xy 平面的分量 $z = r \cos \theta$ 和 xy 平面的分量 $r \sin \theta$. 后者又可以进而分解成 x 分量和 y 分量 $y = r \sin \theta \cos \phi$, $x = r \sin \theta \sin \phi$, 这就得到了式 1.

在直接坐标系中, 显然有 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, 代入式 1 中的三条关系, 就可以很容易解出式 2 中的三条关系.

现在推导变换关系 (式 3). 由于 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \hat{\boldsymbol{\phi}}$ 都是关于 (r, θ, ϕ) 的函数, 所以在考察一点 (r, θ, ϕ) 时, $\hat{\mathbf{r}}$ 的球坐标是 $(1, \theta, \phi)$, 根据式 1 变换到直角坐标为

$$(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (5)$$

写成矢量的形式, 就是

$$\hat{\mathbf{r}} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \quad (6)$$

至于式 3 的第二条式子, 在同一个球坐标 (r, θ, ϕ) 处, $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的球坐标为 $(1, \theta + \pi/2, \phi)$, 根据式 1 变换到直角坐标再化简就得到直角坐标和对应的矢量形式为

$$(\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \sin \phi, -\sin \theta) \quad (7)$$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} - \sin \theta \hat{\mathbf{z}} \quad (8)$$

同理, 在同一点 (r, θ, ϕ) 处, $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 的球坐标为 $(1, \pi/2, \phi + \pi/2)$, 得到第三条式子.

下面推导变换式 4. 由于已经知道了变换式 3, 且直角坐标系和球坐标系中的基底都是单位正交基, 所以直接把变换式 3 中的系数写成 3×3 的矩阵形式, 再转置即可得到变换式 4 中的系数矩阵.

圆锥曲线的极坐标方程

预备知识 极坐标的定义^[6]

结论

圆锥曲线的极坐标方程为

$$\rho = \frac{p}{1 - e \cos \theta} \quad (1)$$

其中 p 是通径, e 是离心率.

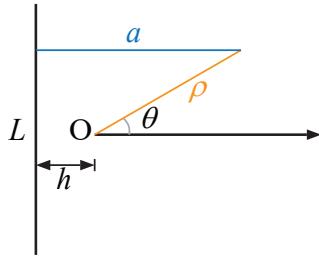


图 1: 由离心率定义圆锥曲线

推导

圆锥曲线的一种定义（与其他定义等效）为（图 1）：平面上有一点 O 和一条直线 L , 相距为 h . 平面上某一点到 O 的距离为 ρ , 到 L 的（垂直）距离为 a , 令常数 $e > 0$, 则所有满足

$$\rho/a = e \quad (2)$$

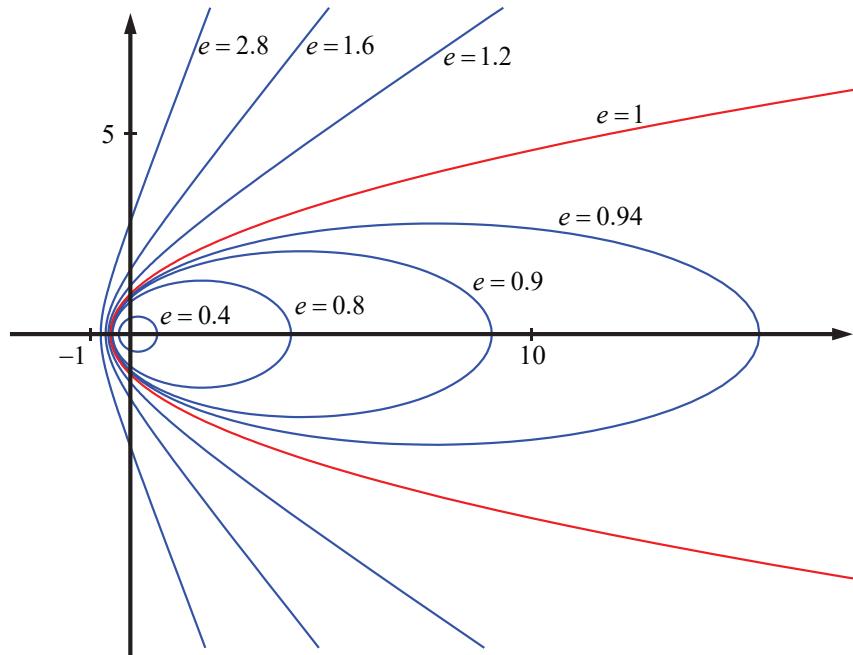
的点组成的曲线就是圆锥曲线. e 是常数, 是离心率, O 是焦点, L 是准线. 当 $0 < e < 1$ 时, 曲线是椭圆, $e = 1$ 时是抛物线, $e > 1$ 时是双曲线.

以 O 点为原点, 使极轴垂直于准线（如上图）. 则 $a = h + \rho \cos \theta$, 根据式 2 得

$$\frac{\rho}{h + \rho \cos \theta} = e \quad (3)$$

变形, 得

$$\rho = \frac{eh}{1 - e \cos \theta} \quad (4)$$

图 2: 不同离心率 e 的圆锥曲线

若定义圆锥曲线的通径为过焦点且平行于准线的直线被圆锥曲线截出的线段，令其长度为 $2p$ ，那么有 $\rho(\pi/2) = p$. 代入式 4 得. 所以式 4 又可以写为

$$\rho = \frac{p}{1 - e \cos \theta} \quad (5)$$

注意 p 和 e 分别控制圆锥曲线的大小和形状. 由于抛物线的 $e = 1$ 不变，所以所有抛物线的形状都相同.

若把曲线围绕焦点顺时针旋转 θ_0 ，方程就成为

$$\rho = \frac{p}{1 - e \cos(\theta + \theta_0)} \quad (6)$$

这是更一般的形式.

椭圆

预备知识 圆锥曲线的极坐标方程^[11]

从椭圆的极坐标公式难以看出椭圆的对称性，这里用相同的定义推导直角坐标的表达式。我们不妨先以一个焦点为原点定义直角坐标系

$$\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{x + h} = e \quad (1)$$

两边平方并整理得

$$(1 - e^2) \left(x - \frac{e^2 h}{1 - e^2} \right)^2 + y^2 = \frac{e^2 h^2}{1 - e^2} \quad (2)$$

由此可见，如果我们把椭圆左移 $e^2 h / (1 - e^2)$ ，椭圆将具有

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (3)$$

的形式。其中 a 为半长轴， b 为半短轴。这就是椭圆的第二种定义，即把单位圆沿两个垂直方向分别均匀拉长 a 和 b 。下面来看系数的关系。首先定义椭圆的焦距为焦点到椭圆中心的距离（即以上左移的距离）为

$$c = \frac{e^2 h}{1 - e^2} \quad (4)$$

[式 2](#) [式 3](#) 对比系数得

$$a = \frac{eh}{1 - e^2} \quad b = \frac{eh}{\sqrt{1 - e^2}} \quad (5)$$

不难证明

$$a^2 = b^2 + c^2 \quad (6)$$

以及

$$e = \frac{c}{a} \quad h = \frac{b^2}{c} \quad (7)$$

第三种定义

椭圆上任意一点到两焦点的距离之和等于 $2a$ 。由直角坐标方程可知对称性，可在两边做两条准线，令椭圆上任意一点到两焦点的距离分别为 r_1, r_2 ，到两准线的距离分别为 d_1, d_2 ，所以有

$$e = \frac{r_1}{d_1} = \frac{r_2}{d_2} = \frac{r_1 + r_2}{d_1 + d_2} \quad (8)$$

所以

$$r_1 + r_2 = e(d_1 + d_2) = 2e(c + h) = 2\frac{c}{a} \left(c + \frac{b^2}{c} \right) = 2a \quad (9)$$

证毕。

双曲线

双曲线的极坐标方程为 ($e > 1$)

$$r = \frac{p}{1 - e \cos \theta} \quad (1)$$

以相同的原点建立直角坐标系, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $r \cos \theta = x$, 得

$$\sqrt{x^2 + y^2} = p + ex \quad (2)$$

两边平方且化简得

$$\frac{(e^2 - 1)^2}{p^2} \left(x + \frac{ep}{e^2 - 1} \right)^2 + \frac{1 - e^2}{p^2} y^2 = 1 \quad (3)$$

对比直角坐标方程

$$\frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (4)$$

得 (直角坐标系沿 x 轴移动了 c)

$$a = \frac{p}{e^2 - 1} \quad b = \frac{p}{\sqrt{e^2 - 1}} \quad c = \frac{ep}{e^2 - 1} \quad (5)$$

$$c^2 = a^2 + b^2 \quad (6)$$

用 a, b, c 表示 e, p 有

$$e = \frac{c}{a} \quad p = \frac{b^2}{a} \quad (7)$$

由离心率的定义, 双曲线的焦点到准线的距离为 $p/e = b^2/c$, 准线的坐标为 $c - p/e = a^2/c$. 由对称性, 双曲线有两个焦点和两条准线, 任意一个焦点到双曲线两支的任意一点比上该点到焦点同侧准线的距离都等于离心率.

渐近线

当 $x, y \rightarrow \infty$ 时 1 可以忽略不计, 有 $y/x = \pm b/a$, 渐近线与 x 轴夹角为

$$\theta_0 = \arctan(b/a) \quad (8)$$

两条渐近线到两个焦点的距离都为

$$c \sin \theta_0 = c \times b/c = b \quad (9)$$

两个分支

若取右焦点建立极坐标系, 当 $|\theta| < \theta_0$ 时 $r < 0$, 是双曲线的左支, 当 $|\theta| > \theta_0$ 时 $r > 0$ 是双曲线的右支. 若想用左焦点的极坐标表示右支, 令 $|\theta| < \theta_0$ 且取相反数即可.

$$r = \frac{p}{e \cos \theta - 1} \quad (|\theta| < \theta_0) \quad (10)$$

复变函数

预备知识 复数

复变函数是自变量和因变量都在复数域内取值的函数, 通常表示为

$$w = f(z) \quad (1)$$

若把自变量用 z 的实部 x 和虚部 y 表示, 因变量表示成实部函数 $u(x, y)$ 和虚部函数 $v(x, y)$ 两个函数相加, 则复变函数记为

$$w = u(x, y) + i v(x, y) \quad (2)$$

例如, 复数范围内的指数函数被定义为

$$w = e^z = e^x \cos y + i e^x \sin y \quad (3)$$

由于复变函数的图像比较复杂, 没有必要记忆图像, 只需要知道一些基本的性质即可.

与实变函数的“兼容性”

复变函数中很多函数与我们原来我们学过的函数同名, 只是自变量的范围从实数拓展到了复数. 例如以指数函数, 三角函数, 对数函数, 指数函数, 等. 这些新函数的定义必须要与原来的函数“兼容”, 即当自变量被限制在实数范围内取值时, 这些函数与原来的函数相同.

例如, 当复数范围内的指数函数 $w = e^z = e^x \cos y + ie^x \sin y$ 的自变量只在实数范围取值 (即 $y = 0$) 时, 该函数变为我们原来所熟悉的 e^x . 又如, 复数范围内正弦函数被定义为

$$\sin z = \sin(x + iy) = \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y \quad (4)$$

其中 \sinh 和 \cosh 是双曲正弦和双曲余弦函数. 当 $y = 0$ 时, 该函数变为 $\sin x$ 所以从这个意义上来说, 与实变函数同名的复变函数只是把函数的定义域扩大了.

复变函数的导数

由于复变函数相当于两个实数自变量和两个实数因变量的函数, 一般情况下求导变得非常复杂. 但如果复变函数在某个域上解析, 那么可以在该域上进行求导, 得到唯一的导数. 对于复数域初等基本函数, 求导的结果也和实数域的求导一样.

指数函数（复数）

预备知识 指数函数, 复数简介

复数范围内的指数函数被定义为

$$w = e^z = e^{x+iy} = e^x(\cos y + i \sin y) \quad (1)$$

在复平面上表示这个函数, 则指数的实部 x 控制因变量 w 的模长, 虚部 y 控制 w 的幅角

$$|w| = e^x \quad (2)$$

$$\arg(w) = y \quad (3)$$

当指数为纯虚数时, 式 1 变为著名的欧拉公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta \quad (4)$$

虽然这里的 θ 只能是实数（物理中应用得最多的情况），但根据复数域三角函数的定义^[18]，对于任何复数 z ，都有欧拉公式

$$e^{iz} = \cos z + i \sin z \quad (5)$$

将“三角函数（复数）^[17]”中的式1和式2代入即可证明。

三角函数（复数）

预备知识 指数函数（复数）^[17]

定义

复数域的正弦函数为

$$\sin z = \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i} \quad (1)$$

复数域的余弦函数为

$$\cos z = \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2} \quad (2)$$

为什么三角函数要这么定义？因为只有这么定义，才能既“兼容”实数范围内的三角函数，同时满足解析的要求。

与实数函数的“兼容性”

将式1中的复数 z 取实数 x ，得

$$\sin z = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (3)$$

根据复数域的指数函数^[17]（欧拉公式），

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad (4)$$

$$e^{-ix} = \cos x - i \sin x \quad (5)$$

代入得

$$\sin z = \frac{(\cos x + i \sin x) - (\cos x - i \sin x)}{2i} = \sin x \quad (6)$$

同理

$$\cos z = \frac{(\cos x + i \sin x) + (\cos x - i \sin x)}{2} = \cos x \quad (7)$$

证毕.

两角和公式

利用欧拉公式, 容易证明, 复数范围内的正余弦函数同样满足两角和公式

$$\sin(z_1 + z_2) = \sin z_1 \cos z_2 + \cos z_1 \sin z_2 \quad (8)$$

$$\cos(z_1 + z_2) = \cos z_1 \cos z_2 - \sin z_1 \sin z_2 \quad (9)$$

实部和虚部

利用两角和公式, 令 z_1 等于实数 x , z_2 等于虚数 iy , 则有

$$\sin z = \sin(x + iy) = \sin x \cos iy + \cos x \sin iy \quad (10)$$

$$\cos z = \cos(x + iy) = \cos x \cos iy - \sin x \sin iy \quad (11)$$

其中

$$\cos iy = \frac{e^{-y} + e^y}{2} = \cosh y \quad (12)$$

$$\sin iy = \frac{e^{-y} - e^y}{2i} = i \frac{e^y - e^{-y}}{2} = i \sinh y \quad (13)$$

代入得

$$\sin z = \sin(x + iy) = \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y \quad (14)$$

$$\cos z = \cos(x + iy) = \cos x \cosh y - i \sin x \sinh y \quad (15)$$

这样, 就把正余弦的实部和虚部分开来了(当然也可以根据定义直接得到两式)

$$\operatorname{Re}(\sin z) = \sin x \cosh y, \operatorname{Im}(\sin z) = \cos x \sinh y \quad (16)$$

$$\operatorname{Re}(\cos z) = \cos x \cosh y, \operatorname{Im}(\cos z) = -\sin x \sinh y \quad (17)$$

解析性

由于 e^z 是解析函数, 而解析函数的线性组合也是解析函数, 所以正余弦函数都是解析函数. 但也可以根据柯西-黎曼公式直接证明.

第二章

一元微积分

微积分导航

从物理学巨人牛顿发明了微积分以来¹，微积分就在物理学的各个方面被大量使用。高中的物理教学有意避开了使用微积分，但从本科的学习开始，微积分与物理将形影不离。不夸张地说，不懂微积分，就几乎不懂物理。微积分最核心的内容就是极限，求导/微分，积分，常/偏微分方程和无穷级数。

极限

极限^[22]的概念是微积分的基础，大致可以理解为“某个表达式在某个量为无穷小或无穷大时所趋近的值”，例如 $1/x$ 在 $x \rightarrow \infty$ 时的极限为零， $(1+x)/(2+x)$ 在 $x \rightarrow 0$ 时的极限为 $1/2$ 。

导数

理解极限了以后，导数^[28]便是一个首要的应用。事实上高中物理的许多物理量都使用了导数的概念，只是没有提出“导数”这个词。例如（瞬时）速度的定义就是 $\Delta s/\Delta t$ 在 $\Delta t \rightarrow 0$ （趋近于 0）时的极限，而这恰好是导数的定义，即速度是位置矢量（关于时间的函数） $\mathbf{r}(t)$ 对时间的导数。同理，加速度矢量是速度矢量（关于时间的函数）对时间求导。又例如，高中对匀速圆周运动的向心加速度的推导过程中就运用了几何微元法，在微小时间 Δt 内计算圆周运动速度矢量的微小变化^[156]。学习了矢量求导^[113]以后，就不必再使用这种不成熟的“几何微元法”而直接按照矢量求导法^[157]则即可严谨而轻易地得出向心加速度的公式 $\mathbf{a} = -\omega^2 \mathbf{R}$ ，甚至可以计算非匀速圆周运动乃至任意变速曲线运动的加速度。

积分

高中物理中，位移 s 等于速度 v 乘以时间 t ，功 W 等于力 F 乘以位移 x 等概念都已经耳熟能详。然而如果速度随时间变化或者力随位置变化时，就不能用简单的乘法来计算这些问题。这时一个基本的思想就是把时间或位移分成

¹一般认为牛顿和莱布尼兹都分别在十七世纪中独立地发明了微积分，然而他们都声称对方窃取了自己的成果，并为此争执了一生

许多小份，每份中的速度或力都近似为恒定不变，然后再把所有小份的位移或做功加起来即可。这时用极限的思想，求出当这些小份为无穷小（或者说分成无穷多份）时求和的极限，就得到了总位移和总功。这个过程叫做定积分^[57]，以上例子中变化的量（速度，密度，力）。在求定积分时，我们需要先求出一个原函数，而巧妙的地方在于，

微分方程

大量的物理定律和问题都是通过微分方程（组）来描述的。最简单的微分方程是线性常微分方程，是函数 $y(x)$ 及不同阶导 $y'(x), y''(x)$ 以及自变量 x 组成的等式。例如力学中著名的弹簧振子^[169]（又称简谐振子）模型就是通过二阶线性常微分方程（二阶代表方程中出现的最高阶导数为 2）。

中，结合牛顿第二定律^[157] 和胡克定律得到 $ma = F = -kx$ 其中位移 x 可看做关于时间的函数 $x(t)$ ，是未知函数（微分方程的解），加速度是时间的二阶导数 $a(t) = x''(t)$ 。所以微分方程为

本章介绍本书物理部分需要使用的微积分内容，并以帮助读者理解为主而不求严谨详尽。对于一些定理如自然对数底极限和非整数幂的二项式定理，本章只给出数值验证的方法。

极限

先来看一个数列的例子。

例 1

我们都知道 π 是一个无理数，所以 π 的小数部分是无限多的。目前用计算机，已经可以将 π 精确地计算到小数点后数亿位。然而在实际应用中，往往只用取前几位小数的近似即可。下面给出一个数列，定义第 n 项是的前位小数近似（不考虑四舍五入），即

$$a_0 = 3, a_1 = 3.1, a_2 = 3.14, a_3 = 3.141, \dots \quad (1)$$

这个数列显而易见的性质，就是当 n 趋于无穷时， a_n 趋（近）于 π 。无穷通常用符号 ∞ 来表示（像“8”横过来写）。我们把这类过程叫做极限。以上

这种情况，用极限符号表示，就是

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \pi \quad (2)$$

这里 \lim 是极限 (limit) 的意思，下方用箭头表示某个量变化的趋势。 $\lim_{n \rightarrow \infty}$ 在这里相当于一个“操作”，叫算符 (operator). a_n 是其作用的对象 (相当于函数的自变量)，算符的“因变量”就是一个数 (a_n 的极限值). 所以不要误以为这条式子是说当 $n \rightarrow \infty$ 时， $a_n = \pi$ (a_n 是有理数， π 是无理数，等式恒不成立)，而要理解成 a_n 经过算符 $\lim_{n \rightarrow \infty}$ 的作用以后，得出其极限是 π . 类比函数 $\sin x = y$ ，并不是说 $x = y$ ，而是说 x 经过正弦函数作用后等于 y .

所以从概念上来说，极限中的 趋于和 等于 是不同的. 趋于更强调变化的过程. 趋于的意思可以粗略理解为

- 越来越接近，但不一定相等
- (在不相等的情况下) 只有更近，没有最近

对极限来说，第 2 点成立是非常必要的. 但是怎样能说明“没有最近”呢？可以看出，当 n 越大， a_n 越接近 π ，他们的“距离”，可以用 $|a_n - \pi|$ 来表示. 也就是说，对任何一个 a_n ，如果所对应的距离 $|a_n - \pi| \neq 0$ ，总能找到一个更大的数 $m > n$ ，使 $|a_m - \pi| < |a_n - \pi|$ (更近)，并且要求之后的所有项都能满足这一条件. 只有这样，才能从数学上说明上面两个意思. 这就是极限思想的精髓. 根据这个思想，下面可以写出数列的极限的定义. 这个定义无需硬记，如果理解了上面的描述，就觉得它理所当然了.

对于任意给定的 (无论它有多么小)，总存在 N ，当 $n > N$ 时，就有 $|a_n - A| < \delta$ (A 为常数) 成立，那么数列 a_n 的极限就是 A .

在命题中，通常把“任意”用“ \forall ” (any) 表示，把“存在”用“ \exists ” (exist) 表示. 即对 $\forall \delta$, $\exists N$, 当 $n > N$ 时，有 $|a_n - A| < \delta$.

由于以上讨论中 \lim 作用的对象是数列，那么箭头右边只能是 ∞ (准确来说应该是正无穷 $+\infty$ ，但是由于数列的项一般是正的，所以正号省略了).

把定义套用到上面的例一中，如果要求 $|a_n - \pi| < 10^{-3}$ (给定 $\delta = 10^{-3}$)，只要令 $N = 3$ (当然也可以令 $N = 4, N = 5$ ，等) 就可以保证第 N 项后面所有的项都满足要求. 一般地如果给定 $\delta = b \times 10^{-q}$ ($b > 1$)，就令 $N = q$ ，第 N 项以后的项就满足要求. 这就从定义直接证明了 $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \pi$.

小角正弦极限

预备知识 极限^[22]

这里要介绍的是一个很显然的几何问题，然而它在高等数学和物理中却非常频繁地出现。

设平面上 O 点为圆心，以 R 作为半径画圆。取一段的圆心角为 θ 的圆弧 AB （令长为 l ），并作线段 AB （如图 1）。

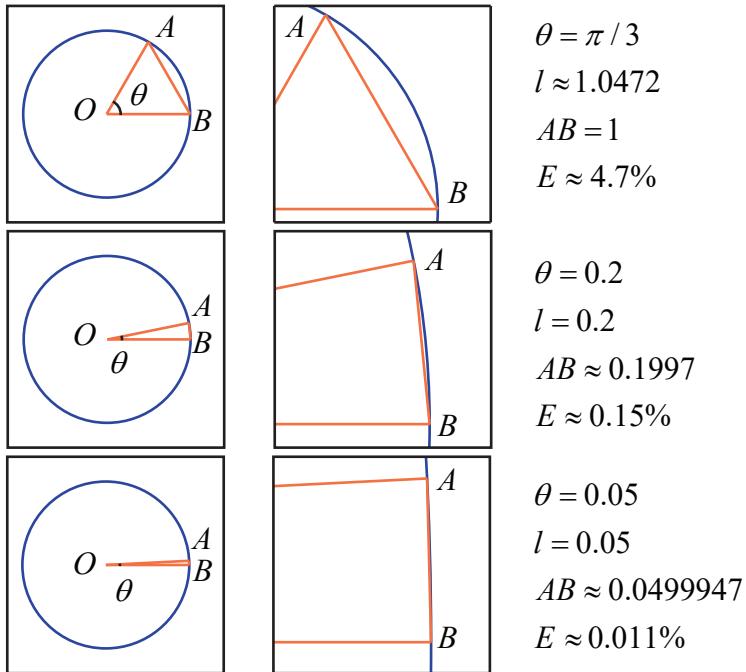


图 1：单位圆中，随着角度不断减小，弧长与线段长度的相对误差也不断减小

由弧长公式得

$$l = R\theta \quad (1)$$

线段 AB 的长度为

$$AB = 2R \sin \frac{\theta}{2} \quad (2)$$

显然弧长 l 大于线段长度 AB （两点之间直线最短），但从图中可以看出随着 θ 越来越小，二者的相对误差（ E ）越来越小。用极限^[22]的语言来说，就是当 θ

趋近于 0 时，它们的比值趋近于 1². 现在我们可以总结出 $\theta \rightarrow 0$ 时的两个结论

1. 线段长度 AB 趋近于弧长 l ，一般情况下可近似认为 $AB = l$ ³.
2. 代入上面的长度表达式（式 1），有

$$1 = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{AB}{l} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{2R \sin(\theta/2)}{R\theta} = \lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\sin(\theta/2)}{\theta/2} \quad (3)$$

令 $x = \theta/2$, 有

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1 \quad (4)$$

这是一个非常重要的极限.

自然对数底

预备知识 极限^[22]

微积分中有一个重要的极限，极限值是一个无理数，叫做自然对数底，记为⁴ e .

$$e \equiv \lim_{x \rightarrow 0} (1 + x)^{\frac{1}{x}} = 2.71828\dots \quad (1)$$

这里仅用数值的方法验证该极限⁵（表 1）.

表 1: 极限 e 数值验证

x	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
$(1 + x)^{1/x}$	2.59374	2.70481	2.71692	2.71815	2.71827	2.71828

以 e 为底的对数函数 $\log_e x$ 叫做自然对数通常记为

$$\ln x \quad \text{或} \quad \log x \quad (2)$$

²注意这只是一个经验上的总结，证明参考高等数学教材.

³严格来说，这是一个一阶近似，见泰勒级数.

⁴为了与其他变量区分，本书使用正体字母表示自然对数底.

⁵注意若 x 从负值趋近 0 时该极限同样成立

切线与割线

预备知识 极限^[22]

如图一，在一段光滑曲线上任取两点，过这两点做直线，就是曲线过 A 点与 B 点的割线（当然直线与曲线还可以有其他交点）。当 A, B 两点逐渐向 C

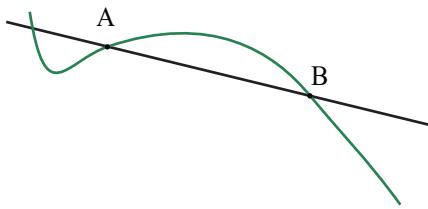


图 1: 割线

点靠近，割线的位置逐渐趋于不变，割线位置的极限^[22]就叫做曲线在 C 点的切线。

以上对切线的定义中，假设在 A, B 两点靠近 C 点的过程中，割线位置的极限存在。如果这个极限不存在，那么 C 点没有极限。下面举一个简单的例子说明。

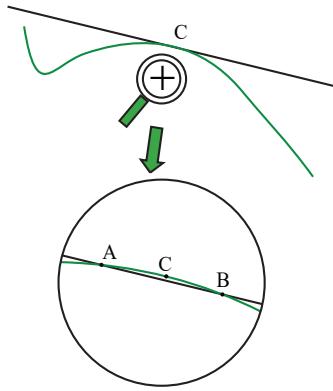


图 2: 割线的极限是切线

例如要求正方形一角的切线，用 A, B 两点接近 C 点，则无论 AB 点有多么靠近 C ，切线的位置还要取决于 AB 点的具体位置（如右图）若 B 更接近

C , 则直线就更接近竖直方向. 反之直线就更接近水平方向.

而真正的极限, 只取决于点 A , B 都趋于点 C 的事实, 而不要求他们谁更趋近. 所以这个极限不存在.

拓展阅读 多重极限

导数

预备知识 极限^[22]

导数的几何理解

一个一元函数 $y = f(x)$, 在直角坐标系中表示为一条曲线. 在这个曲线的光滑部分取一点 A , 并作其切线^[26].

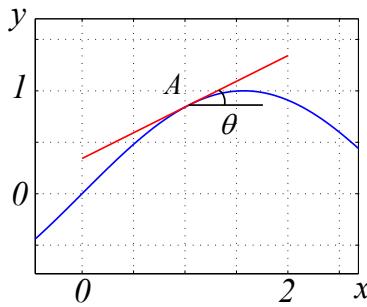


图 1: 点 A 的切线

若切线存在, 该切线与 x 轴的夹角的正切值 θ 就叫点 A 的导数. 当函数在 A 点递增时, 可能的取值为 $\theta \in (0, \pi/2)$, 即 $\tan \theta \in (0, +\infty)$. 递减时, 取 $\theta \in (-\pi/2, 0)$, 即 $\tan \theta \in (-\infty, 0)$. 当切线水平时, $\theta = \tan \theta = 0$.

若函数曲线在 x 的某一开区间每一点都可导, 则这个区间上每一个 x 对应一个导数. 将其写成关于 x 的函数 $g(x)$, $g(x)$ 就是该区间上的 **导函数**. 通常将导函数记为以下的一种 (后 3 种记号的来源见下文)

$$f'(x), \quad [f(x)]', \quad \frac{dy}{dx}, \quad \frac{df}{dx}, \quad \frac{d}{dx}f(x) \quad (1)$$

另外, 若切线不存在 (例如折线的棱角处, 但也有其他更复杂的情况), 我们说点 A 不可导.

若函数曲线在某一点附近是光滑的, 那么在这点附近取一小段, 当这一段取得足够小, 可以近似认为它是线段且与切线重合 (如下图). 以这条线段为斜边, 作一直角三角形, 令其底边长为 dx (在微积分中, 通常把非常小的一

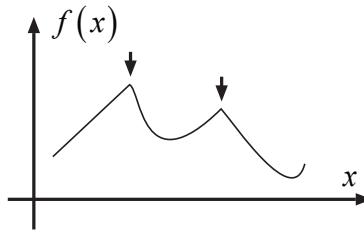


图 2: 棱角处不可导

段 Δx 记为 dx , dx 是一个不能分割的整体符号, 而不是两个量相乘), 垂直边的边长为 dy (当函数递增时, dy 取正值, 反之取负值). 根据上面导数的定义, $dy/dx = \tan \theta$ 就是函数的导数. 所以导数通常表示为 dy/dx , 导数的倒数则为 dx/dy .

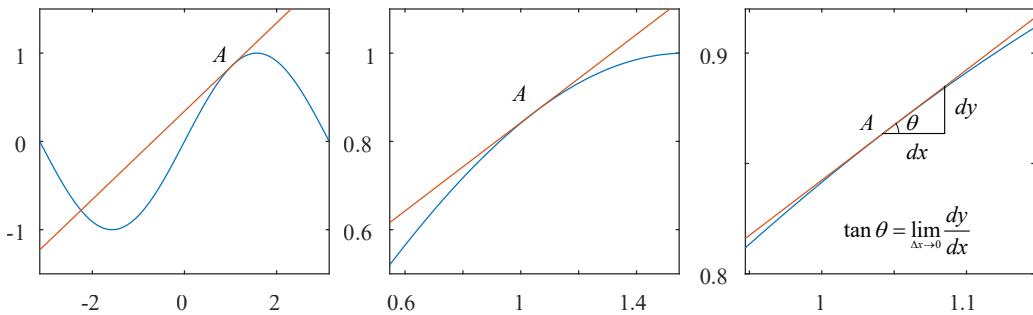


图 3: 将切点放大, 会发现切线和曲线在切点附近“重合”

由上面的讨论可得, 当 x 增加一小段 dx 时, y 轴的增量约为 $dy = f'(x) dx$, 且当 dx 越小, 这条式子就越精确成立. 这个关系就叫函数的微分 (看到这里, 你可能会觉得, 原来微分这么简单! 其实“微积分”基本就是在讲“微分”和“积分”而一元函数的微分及其基本原理的几何理解基本上就可以认为是上面这张图所表示的).

导数的代数理解

导数的代数理解就是: 一个量关于另一个量的变化率. 例如质点直线运动时, 速度的大小就是其路程对时间的导数. 把这种描述用极限^[22]表达出来就是

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (2)$$

在图 3 的右图中, Δx 的始末位置并不非常重要, 既可以从 x 取到 $x + \Delta x$, 也可以从 $x - \Delta x$ 取到 x 等等(因为当 Δx 非常小的时候, x 附近的曲线基本处处跟切线重合, 他们的斜率都是一样的). 所以导数的定义也有其他类似的形式

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (3)$$

虽然上面用到了诸如“近似”等词, 但根据定义, 极限都是精确的.

应用举例 一维运动的速度定义, 一维运动的加速度定义

拓展阅读 基本初等函数的导数^[36], 求导法则, 高阶导数

求导法则

预备知识 导数^[28], 基本初等函数的导数^[36]

结论

如果需要求导的函数可以看做若干个已知导函数的函数（如基本初等函数）经过四则运算或复合得到的，那么我们可以直接使用一系列求导法则对其进行求导

四则运算

$$[f(x) \pm g(x)]' = f'(x) \pm g'(x) \quad (1)$$

$$[f(x)g(x)]' = f'(x)g(x) + f(x)g'(x) \quad (2)$$

$$\left[\frac{f(x)}{g(x)} \right]' = \frac{f'(x)g(x) - g'(x)f(x)}{g(x)^2} \quad (3)$$

复合函数

$$f(g(x)) = f'(g(x))g'(x) \quad (4)$$

详细见“一元复合函数求导（链式法则）^[44]”

线性

对求导而言，线性是指若干函数线性组合（即把若干个函数分别乘以常数再相加）的求导等于对这些函数先分别求导再进行同样的线性组合。由于函数加减法属于函数线性组合的两种简单情况，这里只需要证明求导运算是线性的，即求导是一种线性运算即可。令若干常数为 c_i ，若干可导函数为 $f_i(x)$ ，根

据导数的定义，这些函数线性组合的导数为

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx} \sum_i c_i f_i(x) &= \lim_{h \rightarrow 0} \left[\sum_i c_i f_i(x+h) - \sum_i c_i f_i(x) \right] / h \\
 &= \sum_i c_i \lim_{h \rightarrow 0} [f_i(x+h) - f_i(x)] / h \\
 &= \sum_i c_i f'_i(x)
 \end{aligned} \tag{5}$$

例 1 对函数 $f(x) = 5 \sin x + 3x^2$ 求导

这里的 $f(x)$ 可以看做三角函数 $\sin x$ 函数和幂函数 x^2 的线性组合，二者都是基本初等函数，导数分别为 $\cos x$ 和 $2x$ ，由于求导是线性运算，我们只需要对两个函数各自的导函数进行同样的线性组合即可

$$f'(x) = 5 \sin' x + 3(x^2)' = 5 \cos x + 3(2x) = 5 \cos x + 6x \tag{6}$$

两函数相乘的导数

令两函数分别为 $f(x)$ 和 $g(x)$ ，现在求 $f(x)g(x)$ 的导函数。由导数的定义式 2^[28] 得

$$[f(x)g(x)]' = \lim_{h \rightarrow 0} [f(x+h)g(x+h) - f(x)g(x)] / h \tag{7}$$

从几何上来看，我们可以把 $f(x)g(x)$ 看做一个矩形的面积

反函数求导

预备知识 导数^[28]

结论

若已知 $f(x)$ 的导函数为 $f'(x)$, 则 $f(x)$ 的反函数 $f^{-1}(x)$ 的导函数为

$$[f^{-1}(x)]' = \frac{1}{f'(f^{-1}(x))} \quad (1)$$

为了消除上式可能产生的歧义, 记 $f(x)$ 的导函数为 $h(x)$, $f(x)$ 的反函数为 $g(x)$. 上式变为

$$g'(x) = \frac{1}{h(g(x))} \quad (2)$$

反函数存在的条件

函数 $y = f(x)$, 在某个区间 (x_1, x_2) 内连续且单调, 且 x 与 y 一一对应. 因为如果一个 y 有多个 x 对应, 反函数中将会出现一个 x 对应多个 y 的情况.

反函数的定义

令满足上述条件的某函数和反函数分别为 $f(x)$, $g(x)$, 在有定义的区间内的任何一对满足 $y = f(x)$ 的 x , y 都满足 $g(y) = x$, 则 $g(x)$ 是 $f(x)$ 的反函数.

证明

根据导数和微分的关系, $y = f(x)$ 在曲线上的某点 (x_0, y_0) , 有

$$\mathrm{d}y = f'(x_0) \mathrm{d}x \quad (3)$$

同一点也满足 $g(y_0) = x_0$, 且

$$g'(y_0) \mathrm{d}y = \mathrm{d}x \quad (4)$$

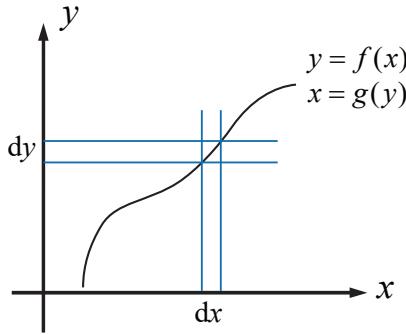


图 1: 在同一点处, $f' = \frac{dy}{dx}$, $g' = \frac{dx}{dy}$, 互为倒数

对比式 3 和式 4, 得

$$g'(y_0) = \frac{dx}{dy} = \frac{1}{f'(x_0)} \quad (5)$$

可见图 1 曲线上同一点处 f' 和 g' 互为倒数. 把 $x_0 = g(y_0)$ 代入上式, 得

$$g'(y_0) = \frac{dx}{dy} = \frac{1}{f'(g(y_0))} \quad (6)$$

上式中, y_0 可以是 g 函数定义域的任意一点, 所以

$$g'(y) = \frac{1}{f'(g(y))} \quad (7)$$

或者用习惯上的 x 作为自变量, 得

$$g'(x) = \frac{1}{f'(g(x))} \quad (8)$$

证毕.

基本初等函数

预备知识 导数[\[28\]](#)

基本初等函数的导数

预备知识 导数^[28]

基本初等函数

基本初等函数由以下五类函数构成（ a 是常数）

- 幂函数

$$x^a \quad (a \in R) \quad (1)$$

- 指数函数

$$a^x \quad (a > 0, a \neq 1) \quad (2)$$

- 对数函数

$$\log_a x \quad (a > 0, a \neq 1) \quad (3)$$

当底为 $a = e$ 时，叫做自然对数函数，记为 $\ln x$.

- 三角函数

$$\sin x \quad \cos x \quad \tan x \quad (4)$$

- 反三角函数

$$y = \arcsin x \quad \arccos x \quad \arctan x \quad (5)$$

由以上函数经过有限次四则运算和有限次函数复合所构成并可用一个式子表示的函数，称为初等函数。例如

$$y = \sqrt{1 - x^2} \quad y = \sin^2 x \quad y = \sqrt{\cot \frac{x}{2}} \quad (6)$$

基本初等函数的导数

基本初等函数在其定义域内都是可导的，导函数如下
幂函数

$$(x^a)' = ax^{a-1} \quad (a \in R) \quad (7)$$

三角函数

$$\sin' x = \cos x \quad \cos' x = -\sin x \quad \tan' x = 1/\cos^2 x = \sec^2 x \quad (8)$$

指数函数

$$(a^x)' = \ln(a) a^x \quad (9)$$

特殊地， $(e^x)' = e^x$

对数函数

$$(\log_a x)' = \frac{1}{\ln(a)x} \quad (10)$$

特殊地， $\ln' x = 1/x$.

幂函数证明

由导数的代数定义， $f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} [f(x+h) - f(x)]/h$ ，而

$$(x+h)^a - x^a = x^a [(1+h/x)^a - 1] \quad (11)$$

由于 $h \rightarrow 0$, $h/x \rightarrow 0$. 令 $\varepsilon = h/x$, 由非整数二项式定理^[3],

$$(1+\varepsilon)^a = 1 + a\varepsilon + \frac{a(a-1)}{2!}\varepsilon^2 + \frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\varepsilon^3 \dots \quad (12)$$

所以

$$\begin{aligned} (x^a)' &= x^a \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{(1+\varepsilon)^a - 1}{\varepsilon x} \\ &= x^{a-1} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(a + \frac{a(a-1)}{2!}\varepsilon + \frac{a(a-1)(a-2)}{3!}\varepsilon^2 \dots \right) = ax^{a-1} \end{aligned} \quad (13)$$

正弦函数证明

使用三角函数和差化积公式化简极限

$$\sin' x = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\sin(x+h) - \sin x}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\sin(h/2)}{h/2} \cos\left(x + \frac{h}{2}\right) \quad (14)$$

由小角正弦值极限^[24] 中的结论, 其中

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\sin(h/2)}{h/2} = 1 \quad (15)$$

所以

$$\sin' x = \lim_{h \rightarrow 0} \cos\left(x + \frac{h}{2}\right) = \cos x \quad (16)$$

余弦函数证明

若 $f'(x) = g(x)$, 且 b 为任意常数, 根据导数的定义 $f'(x+b) = g(x+b)$ 同样成立 (证明略). 所以 $\sin'(x+\pi/2) = \cos(x+\pi/2)$. 而 $\sin(x+\pi/2) = \cos x$, $\cos(x+\pi/2) = -\sin x$ 所以 $\cos' x = -\sin x$

正切函数证明

根据求导法则^[31], 因为 $\tan x = \sin x / \cos x$, 所以

$$\tan' x = \frac{\sin' x \cos x - \cos' x \sin x}{\cos^2 x} = \frac{\cos^2 x + \sin^2 x}{\cos^2 x} = \frac{1}{\cos^2 x} = \sec^2 x \quad (17)$$

对数函数证明

先证明 $\ln' x = 1/x$. $\ln(x+h) - \ln x = \ln(1+h/x)$, 所以

$$\ln' x = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\ln(x+h) - \ln x}{h} = \frac{1}{x} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\ln(1+h/x)}{h/x} \quad (18)$$

令 $\varepsilon = h/x$, 则

$$\ln' x = \frac{1}{x} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln(1+\varepsilon)}{\varepsilon} = \frac{1}{x} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \ln(1+\varepsilon)^{\frac{1}{\varepsilon}} \quad (19)$$

由自然对数底的定义, $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (1 + \varepsilon)^{\frac{1}{\varepsilon}} = e$, 所以

$$\ln' x = \frac{\ln e}{x} = \frac{1}{x} \quad (20)$$

再证明 $\log'_a x = 1/(x \ln a)$. 由对数函数的性质 $\log_a b = \ln b / \ln a$

$$\log'_a x = \left(\frac{\ln x}{\ln a} \right)' = \frac{1}{\ln a} \ln' x = \frac{1}{x \ln a} \quad (21)$$

指数函数证明

先证明 $(e^x)' = e^x$. 由于上面已经证明了 $\ln' x = 1/x$, 而 e^x 是 $\ln x$ 的反函数. 所以令 $f(x) = \ln x$, $f'(x) = 1/x$, $f^{-1}(x) = e^x$, 代入反函数的求导法则^[33]

$$[f^{-1}(x)]' = \frac{1}{f'[f^{-1}(x)]} \quad (22)$$

得

$$(e^x)' = \frac{1}{1/e^x} = e^x \quad (23)$$

再证明 $(a^x)' = a^x \ln a$. $(a^x)' = [(e^{\ln a})^x]' = (e^{(\ln a)x})'$. 把 $e^{(\ln a)x}$ 看成是 e^u 和 $u = (\ln a)x$ 的复合函数, 根据复合函数的求导法则^[31], $(a^x)' = (\ln a)a^x$

导数与函数极值

预备知识 导数^[28]

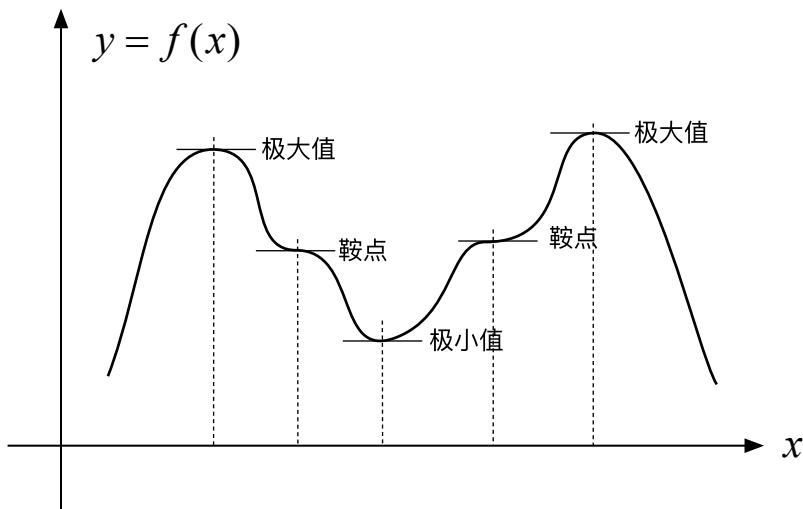


图 1: 导数为零的三种点

若一个一元函数 $y = f(x)$ 在考察的区间内处处可导 (即对区间内的任何 x 导数 $f'(x)$ 都存在), 若某些 x_i 能使 $f'(x_i) = 0$, 则在这些点处函数曲线的斜率为零.

而从函数图像来看, 这样的点又分为三类: 极大值, 极小值, 鞍点.

例 1

抛物线的极值点?

$x + 1/x$ 的极值点? 等等

用极值点确定函数图像

预备知识 导数与函数的极值^[40]

许多时候，我们可以通过函数极值点的位置以及种类确定函数的大致图像。

例 1

求以下函数的极值点，并判断该函数的大致图像

$$f(x) = a + \frac{b}{2}x^2 - \frac{c}{4}x^4 + \frac{d}{6}x^6 \quad (a, b, c, d > 0) \quad (1)$$

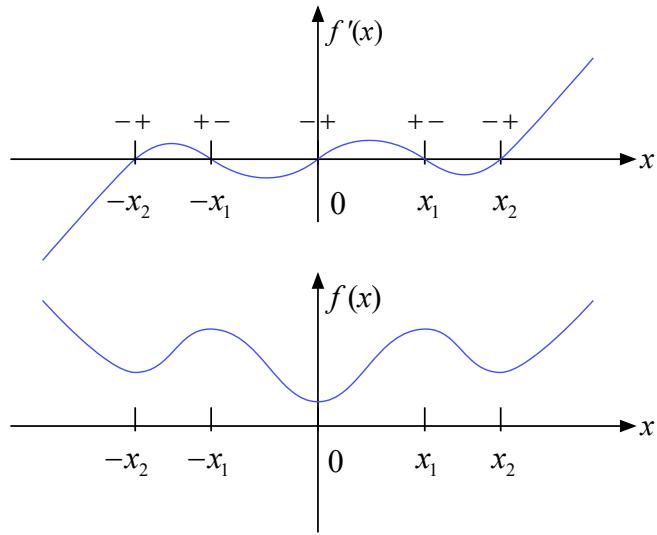


图 1: 导数 $f'(x)$ 与原函数 $f(x)$

先对函数求导，得

$$f'(x) = bx - cx^3 + dx^5 \quad (2)$$

这是一个 5 次多项式，最多可能有五个零点。但由于多项式只有奇数项，不难解出可能的根。

$$bx + cx^3 + dx^5 = x[b + c(x^2) + d(x^2)^2] \quad (3)$$

所以其中一个解是 $x = 0$, 而 $b + c(x^2) + d(x^2)^2$ 是关于 x^2 的二次方程, 当判别式 $\Delta = c^2 - 4bd$ 大于零时, x^2 存在两个大小不等的正根, 姑且记为 x_1^2 和 x_2^2 , $x_1 < x_2$. 此时五个根分别为 $0, \pm x_1, \pm x_2$.

$$f'(x) = d \cdot x (x^2 - x_2^2) (x^2 - x_1^2) = d \cdot x (x + x_1) (x - x_1) (x + x_1) (x - x_2) \quad (4)$$

由于 $d > 0$, 可以大致画出 $f'(x)$ 图像如图 1 (下).

用二阶导数判断分类. 若二阶导数为正, 则是极小值, 若为负, 则是极大值, 若为零, 则是鞍点.

一元函数的微分

预备知识 导数^[28]

考察一个连续光滑的函数 $y = f(x)$, 在 x 处函数值为 y , 若此时函数增加一个无穷小量 dx , 函数值会相应增加无穷小量 dy . 根据导数的定义^[28] $f'(x) = dy/dx$, 我们将 dy 与 dx 的关系记为

$$dy = f'(x) dx \quad (1)$$

这就是一元函数的微分. 注意一元函数的求导和微分除了表达方式不同外并无太大区别. 从形式上来看, 微分是微小变化量之间的线性关系, 而导数则强调变化率.

微分近似

严格来说, 类似式 1 的微分关系式默认取极限 $dx \rightarrow 0$ 才能使等号成立, 但只要在一定范围 Δx 内导函数 $f'(x)$ 的变化非常小, 就可以将函数值的变化量 $\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x)$ 近似为

$$\Delta y \approx f'(x) \Delta x \quad (2)$$

注意在近似式中不能出现微分符号 d , 也不能使用等号.

例 1 测量误差

若测得立方体的边长为 a , 测量的最大可能误差为 σ_a (可以假设 $\sigma_a \ll a$), 估计立方体体积的最大误差 σ_V .

立方体的体积与边长的关系为 $V(a) = a^3$, 根据微分近似, 有

$$\sigma_V \approx V'(a) \sigma_a = 3a^2 \sigma_a \quad (3)$$

一元复合函数求导（链式法则）

预备知识 微分^[43]

若有一元函数 $f(x)$ 和 $g(x)$, 我们可以用 $f[g(x)]$ 表示其复合函数, 即把 g 的因变量作为 f 的自变量. 现在假设 f 和 g 在某定义域可导, 且我们已知导函数 f' 和 g' , 如何求复合函数 $f[g(x)]$ 的导数呢?

我们不妨先引入中间变量 u 作为 f 的自变量和 g 的因变量, 即 $y = f(u)$, $u = g(x)$. 现在可以写出微分关系^[43]

$$dy = f'(u) du \quad du = g'(x) dx \quad (1)$$

即 y 的微小变化由 u 的微小变化引起, 而 u 的微小变化又由 x 引起. 代入消去 du , 得

$$dy = f'(u)g'(x) dx = f'[g(x)]g'(x) dx \quad (2)$$

或记为

$$df = \frac{df}{dg} \frac{dg}{dx} dx \quad (3)$$

写成导数的形式为

$$\frac{dy}{dx} = f'[g(x)]g'(x) \quad \text{或} \quad \frac{df}{dx} = \frac{df}{dg} \frac{dg}{dx} \quad (4)$$

这就是一元复合函数求导的**链式法则**.

对于多重嵌套的情况如 $f[g(h(x))]$, 可以先对 $g[h(x)]$ 求导得 $g'[h(x)]h'(x)$ 再得到

$$\frac{d}{dx}f[g(h(x))] = f'[g(h(x))]g'[h(x)]h'(x) \quad (5)$$

例 1 对函数求导

$$\frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}} \quad (6)$$

首先令 $f(x) = 1/\sqrt{x}$ 再令 $g(x) = x^2 + a^2$, 上式等于 $f[g(x)]$. 由基本初等函数的导数^[36],

$$f'(x) = -\frac{1}{2\sqrt{x^3}} \quad g'(x) = 2x \quad (7)$$

代入式 4, 得

$$\frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}} = f'[g(x)]g'(x) = -\frac{x}{\sqrt{(x^2 + a^2)^3}} \quad (8)$$

例 2 对函数求导

$$\sin^2 x \quad (9)$$

类似地, 令 $f(x) = x^2$ 再令 $g(x) = \sin(x)$, 上式等于 $f[g(x)]$. 由基本初等函数的导数,

$$f'(x) = 2x \quad g'(x) = \cos(x) \quad (10)$$

代入式 4, 得

$$\frac{d}{dx} \frac{1}{\sqrt{x^2 + a^2}} = f'[g(x)]g'(x) = 2 \sin x \cos x \quad (11)$$

一种较灵活的情况是, 当三个变量只有一个自由度⁶时, 任何一个变量都可以看做任何另外一个变量的函数⁷, 这时可以根据需要灵活运用链式法则, 如例 3.

例 3 加速运动公式

假设质点做一维运动, 位移, 速度和加速度分别为 $x(t)$, $v(t) = dx/dt$, $a(t) = dv/dt$, 但若把速度 v 看做复合函数 $v[x(t)]$, 根据链式法则有

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{dv}{dx} \frac{dx}{dt} = \frac{dv}{dx} v \quad (12)$$

写成微分表达式, 有 $a dx = v dv$. 注意到 $d(v^2) = 2v dv$, 代入得

$$d(v^2) = 2a dx \quad (13)$$

若质点做匀加速运动, 该式的物理意义是在任何一段微小时间内, 速度平方的增量正比于这段时间内的位移增量. 在一段时间 $[t_1, t_2]$ 内把这些增量累加起

⁶即任何一个变量值确定后, 另外两个变量也随之确定

⁷姑且假设不会出现一个自变量对应两个因变量的情况

来，就得到高中熟悉的运动学公式

$$v_2^2 - v_1^2 = 2a(x_2 - x_1) \quad (14)$$

其中 x_1, v_1 和 x_2, v_2 分别是 t_1, t_2 时刻的位置和速度.

泰勒展开

预备知识 高阶导数

若一个函数在某个区间内可以求任意阶的导数（例如幂函数，三角函数，指数函数，对数函数等），那么这个函数可以用一个多项式近似，且总项数 N 越多，近似得越精确。令多项式为

$$f(x) \approx c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)^2 + \dots = \sum_{n=0}^N c_n(x - x_0)^n \quad (1)$$

其中 x_0 是该区间内的任意一点，多项式每一项的系数由函数在 x_0 处的第 n 阶导数求得

$$c_n = \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0) \quad (2)$$

注意其中 0 的阶乘为 $0! = 1$ 。另外由式 1 得，当 $x = x_0$ 时，函数值等于多项式值。当项数 N 有限时，通常 $|x - x_0|$ 越小多项式就越接近函数。以上这种把函数展开成多项式的方法就叫泰勒展开。我们先来看一个例子

例 1 正弦函数

我们在 $x_0 = 0$ 处展开 $\sin x$ ，由式 1 和式 2 得

$$\sin x = x + \frac{1}{3!}x^3 - \frac{1}{5!}x^5 + \dots \quad (3)$$

取不同的项数 N 求和，画图如图 1。可见随着项数增加，多项式慢慢趋近正弦函数。

事实上，泰勒展开可以看成是微分近似^[43]的一种高阶拓展。微分近似中，在某点 x_0 附近有

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad (4)$$

而这恰好是泰勒展开的前两项。然而，这只是函数曲线在 x_0 处的切线（见图 1 中 $N = 1$ 的情况），显然没有高阶的泰勒展开那么精确。

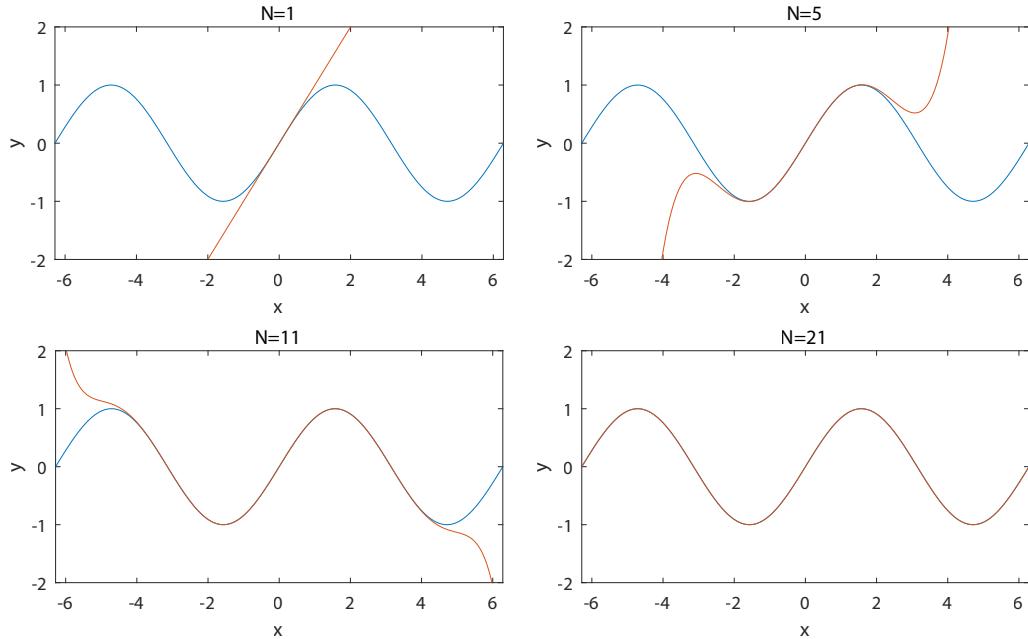


图 1: $\sin x$ 在原点处的泰勒展开的前 N 项求和. 容易看出, 求和的项数越多, 多项式 (橙) 与 $\sin x$ (蓝) 吻合得越好.

系数公式的推导

我们假设当项数 $N \rightarrow \infty$ 时, 总存在一个多项式趋于函数 $f(x)$ ⁸, 即

$$f(x) = \sum_{n=0}^N c_n (x - x_0)^n \quad (5)$$

首先代入 $x = x_0$, 可得第一个系数 $c_0 = f(x_0)$. 现在我们对上式两边在 x_0 处求导, 得

$$f'(x_0) = c_1 + \sum_{n=2}^N n c_n (x - x_0)^{n-1} \Big|_{x=x_0} = c_1 \quad (6)$$

如果对式 5 两边在 x_0 处求二阶导数, 得

$$f''(x_0) = 2c_2 + \sum_{n=3}^N n(n-1)c_n (x - x_0)^{n-2} \Big|_{x=x_0} = 2c_2 \quad (7)$$

⁸这叫做多项式的完备性, 这里不予证明.

即 $c_2 = f''(x_0)/2!$. 以此类推, 如果对式 5 两边在 x_0 处求 m 阶导数得

$$f^{(m)}(x_0) = m!c_m + \sum_{n=m+1}^N \frac{n!}{(n-m)!} c_n (x - x_0)^{n-m} \Big|_{x=x_0} = m!c_m \quad (8)$$

所以系数公式为

$$c_m = \frac{1}{m!} f^{(m)}(x_0) \quad (9)$$

泰勒展开的存在说明了无穷可导函数的一个重要性质: 任何一点的性质都能决定完整的函数曲线, 这可以类比生物中用一个细胞克隆出一个完整生物体.

一些常见函数关于原点的泰勒展开

作为一个求导的练习, 请验证以下泰勒展开式

$$\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 \dots \quad (10)$$

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \frac{1}{6!}x^6 \dots \quad (11)$$

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 \dots \quad (12)$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 \dots \quad (13)$$

$$\frac{1}{1+x} = 1 - x + x^2 - x^3 \dots \quad (14)$$

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 \dots \quad (15)$$

不定积分

预备知识 导数^[28], 基本初等函数的导数^[36]

对一个函数 $f(x)$ 的不定积分（简称积分）可得到另一个函数 $F(x)$, 叫做 $f(x)$ 的原函数. 不定积分用符号表示为

$$F(x) = \int f(x) \, dx \quad (1)$$

不定积分被定义为求导的逆运算. 即若能找到 $F(x)$ 使其导数为 $f(x)$, 那么 $F(x)$ 就是 $f(x)$ 的一个原函数.

$$F'(x) = f(x) \quad (2)$$

给出一个 $f(x)$, 可以找到许多不同的原函数, 且这些原函数都只相差一个常数. 也就是说, 给 $f(x)$ 的任意一个原函数加上一个常数 C , 就可以得到 $f(x)$ 的另一个原函数.

证明: 由于常数导数^[28] 为 0, 给原函数加上常数后式 2 仍然成立

$$\frac{d}{dx}[F(x) + C] = f(x) \quad (3)$$

我们可以从几何上来理解该式: 将函数曲线整体在 y 方向平移并不影响某个 x 坐标处函数曲线的斜率. 所以根据不定积分的定义, $F(x) + C$ 也是 $f(x)$ 原函数, C 叫做积分常数.

不定积分的基本性质

由于求导是线性运算, 不定积分也是线性运算. 即若干函数的线性组合的积分等于分别对这些函数积分再线性组合. 令 a_n 为常数, 有

$$\int [a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) \dots] \, dx = a_1 \int f_1(x) \, dx + a_2 \int f_2(x) \, dx \dots \quad (4)$$

不定积分计算方法

与求导不同，计算不定积分没有特定的步骤，这里介绍几种方法

1. 最简单直接的方法是把已知的各种常见函数的导数写成积分的形式，例如已知 $\sin x$ 的导数是 $\cos x$ ， $\cos x$ 的积分就是 $\sin x$ 加任意常数.
2. 换元积分法^[62]. 包括第一类换元法和第二类换元法.
3. 分部积分法
4. 查表法. 许多高等数学教材（包括本书）都会给出一个积分表. 当然，在信息技术发达的今天这种方法几乎已经被计算软件和网站取代.
5. 计算软件和网站. 常见的符号计算软件有 Mathematica，Maple 等，数学网站有 Wolfram Alpha 等（建议先把积分技巧练熟再使用这些方法）. 其中 Wolfram Alpha 对许多积分还会给出详细的计算步骤.

对于一些常用积分，一般要求能熟记或快速推出. 见积分表^[52] 中的常用积分部分.

积分表

预备知识 不定积分^[50]

这里给出一个基本积分表和一个常用积分表，前者建议熟记。部分积分有的给出计算步骤，没有给出则是由基本初等函数的导数^[36]直接逆向得出。所有的不定积分公式都可以通过求导验证。

应用换元积分法^[62]，表中任何积分都可以拓展为

$$\int f(ax + b) \, dx = \frac{1}{a} F(ax + b) \quad (1)$$

基本积分表

$$\int x^a \, dx = \frac{1}{a+1} x^{a+1} + C \quad (a \in R, a \neq -1) \quad (2)$$

$$\int \frac{1}{x} \, dx = \ln|x| + C \quad (\text{例 6}) \quad (3)$$

$$\int \cos x \, dx = \sin x + C \quad (4)$$

$$\int \sin x \, dx = -\cos x + C \quad (5)$$

$$\int \tan x \, dx = -\ln|\cos x| + C \quad (\text{例 2}) \quad (6)$$

$$\int \cot x \, dx = \ln|\sin x| + C \quad (\text{例 3}) \quad (7)$$

$$\int \frac{1}{\cos^2 x} \, dx = \tan x + C \quad (8)$$

$$\int \frac{1}{1+x^2} \, dx = \arctan x + C \quad (9)$$

$$\int e^x \, dx = e^x + C \quad (10)$$

$$\int x e^x \, dx = e^x(x-1) + C \quad (\text{例 7}) \quad (11)$$

$$\int a^x \, dx = \frac{1}{\ln a} a^x + C \quad (\text{例 1}) \quad (12)$$

常用积分表

$$\int \sin^2 x \, dx = \frac{1}{2}(x - \sin x \cos x) + C \quad (\text{例 4}) \quad (13)$$

$$\int \cos^2 x \, dx = \frac{1}{2}(x + \sin x \cos x) + C \quad (\text{例 5}) \quad (14)$$

$$\int \sec x \, dx = \ln |\tan x + \sec x| + C \quad (\text{例 10}) \quad (15)$$

$$\int \ln x \, dx = x \ln x - x + C \quad (\text{例 8}) \quad (16)$$

$$\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \, dx = \arcsin(x) + C \quad (\text{例 9}) \quad (17)$$

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \, dx = \ln(1 + \sqrt{1+x^2}) = \sinh^{-1}(x) + C \quad (\text{例 11}) \quad (18)$$

例 1

$$\int a^x \, dx \quad (19)$$

我们已经知道如何算 e^x 的积分，而 $a = e^{\ln a}$ ，再根据式 1 就有

$$\int e^{\ln(a)x} \, dx = \frac{1}{\ln a} e^{\ln(a)x} + C = \frac{1}{\ln a} a^x + C \quad (20)$$

例 2

$$\int \tan x \, dx \quad (21)$$

这个积分用第一类换元积分法（式 2^[62]）

$$\int f[u(x)]u'(x) \, dx = F[u(x)] + C \quad (22)$$

首先 $\tan x = \sin x / \cos x$ ，令 $u(x) = \cos x$ ，则 $\sin x = -u'(x)$ ，对比得 $f(x) = -1/x$ 其原函数为 $F(x) = -\ln|x|$ ，所以

$$\int \tan x \, dx = \int f[u(x)]u'(x) \, dx = F[u(x)] + C = -\ln|\cos x| + C \quad (23)$$

例 3

类似**例 2**, $\cot x = \cos x / \sin x$, 令 $u(x) = \sin x$, 则 $\cos x = u'(x)$, 对比得 $f(x) = 1/x$, 原函数为 $F(x) = \ln|x|$ (**式 3**), 所以

$$\int \cot x \, dx = F[u(x)] + C = \ln |\sin x| + C \quad (24)$$

例 4

$$\int \sin^2 x \, dx \quad (25)$$

用降幂公式 (**??^[?]**) 和不定积分的线性 (**式 4^[50]**) 把上式变为常数的积分和 $\cos 2x$ 的积分, 再利用**式 4** 和**式 1** 计算后者即可

$$\begin{aligned} \int \sin^2 x \, dx &= \int \frac{1}{2} \, dx - \frac{1}{2} \int \cos 2x \, dx \\ &= \frac{x}{2} - \frac{1}{4} \sin(2x) = \frac{1}{2}(x - \sin x \cos x) + C \end{aligned} \quad (26)$$

例 5

$$\int \cos^2(x) \, dx \quad (27)$$

与**例 4** 类似, 用三角恒等式 $\cos^2(x) = [1 + \cos(2x)]/2$ 得

$$\begin{aligned} \int \cos^2 x \, dx &= \int \frac{1}{2} \, dx + \frac{1}{2} \int \cos(2x) \, dx \\ &= \frac{x}{2} + \frac{1}{4} \sin(2x) = \frac{1}{2}(x + \sin x \cos x) + C \end{aligned} \quad (28)$$

例 6

$$\int \frac{1}{x} \, dx \quad (29)$$

首先在区间 $(0, +\infty)$ 内, 由于 $\ln x$ 的导数是 $1/x$, 所以积分结果为 $\ln x + C$ 。现在再来考虑区间 $(-\infty, 0)$, 注意 $\ln x$ 在这里没有定义, 不妨看看 $\ln(-x)$, 由复合函数求导, 其导数恰好为 $1/x$ 。所以在除去原点的实数范围内, 有

$$\int \frac{1}{x} \, dx = \ln|x| + C \quad (30)$$

事实上，由于 $1/x$ 在 $x = 0$ 没有定义，更广义的原函数可以取

$$\int \frac{1}{x} dx = \begin{cases} \ln x + C_1 & (x > 0) \\ \ln(-x) + C_2 & (x < 0) \end{cases} \quad (31)$$

其中 C_1 和 C_2 是两个不相同的待定常数。

例 7

$$\int x e^x dx \quad (32)$$

使用用分部积分式 1^[64]

$$\int F(x)g(x) dx = F(x)G(x) - \int f(x)G(x) dx \quad (33)$$

令 $F(x) = x$, 求导得 $f(x) = 1$, 令 $g(x) = e^x$, 由式 10, $G(x) = e^x$. 代入分部积分得

$$\int x e^x dx = x e^x - \int 1 \cdot e^x dx = e^x(x - 1) + C \quad (34)$$

例 8

$$\int \ln x dx \quad (35)$$

方法一：使用第二类换元法式 6^[62]

$$\int f(x) dx = \int f[x(t)] d[x(t)] = \int f[x(t)]x'(t) dt \quad (36)$$

令⁹ $x = e^t$, 求导得 $x'(t) = e^t$, 换元得

$$\int \ln x dx = \int \ln(e^t) e^t dt = \int t e^t dt \quad (37)$$

由例 7 中的分部积分得

$$\int \ln x dx = e^t(t - 1) + C = e^{\ln x}(\ln x - 1) + C = x(\ln x - 1) + C \quad (38)$$

方法二：直接使用分部积分法式 1^[64], 对常数 1 积分, 对 $\ln x$ 求导, 得

$$\int \ln x dx = x \ln x - \int x \cdot \frac{1}{x} dx = x \ln x - x + C \quad (39)$$

⁹注意被积函数只在 $x > 0$ 区间有定义, 否则使用 $x = e^t$ 将会自动忽略 $x \leq 0$ 的情况.

例 9

$$\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (40)$$

使用第二类换元法式 6^[62], 令 $x = \sin t$ 得

$$\int \frac{1}{\sqrt{1-\sin^2 t}} d(\sin t) = \int dt = t + C = \arcsin x + C \quad (41)$$

例 10

$$\int \sec x dx \quad (42)$$

分子分母同时乘以 $\sec x + \tan x$, 可以发现分子是分母的导数。再用第一类换元积分法 (式 2^[62]), 令 $u(x) = \sec x + \tan x$, 再使用式 3 即可

$$\begin{aligned} \int \sec x dx &= \int \frac{\sec^2 x + \sec x \tan x}{\sec x + \tan x} dx = \int \frac{u'(x)}{u} dx = \int \frac{1}{u} du \\ &= \ln |u| + C = \ln |\sec x + \tan x| + C \end{aligned} \quad (43)$$

例 11

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} dx \quad (44)$$

使用第二类换元法式 6^[62], 令 $x = \tan t$, 再利用三角恒等式??^[??] 和式 3 得

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+\tan^2 t}} d(\tan t) = \int \frac{1}{\sec t} \sec^2 t dt = \ln |\tan t + \sec t| + C \quad (45)$$

由同一三角恒等式, $\sec t = \sqrt{1+\tan^2 t} = \sqrt{1+x^2}$, 所以

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} dx = \ln \left(x + \sqrt{1+x^2} \right) + C \quad (46)$$

注意上式中 \ln 后面的绝对值符号消失是因为 $x + \sqrt{1+x^2} \geq 0$ 恒成立。另外由 $\sinh^{-1} x$ 函数的定义可知上式又等于 $\sinh^{-1} x + C$ 。

定积分

预备知识 导数^[28], 极限^[22]

首先以不均匀细绳的质量为例, 引入定积分的思想

例 1 不均匀细绳的质量

一条密度不均匀的绳子长为 L , 横截面积是 S , 细绳距离 O 端 x ($x < L$) 处的密度为 $\rho(x)$. 求绳子的质量.

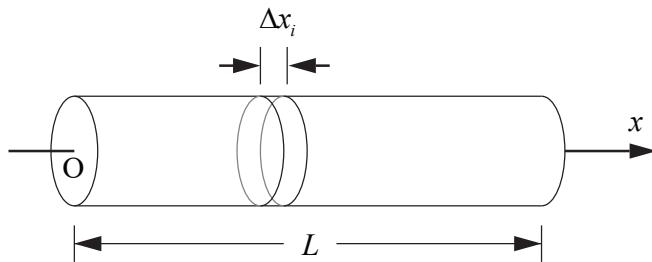


图 1: 密度不均匀的绳子

如果题目中, 密度是恒定的, 那么直接可以写出绳子的质量为 $m = LS\rho$. 但是题中 $\rho(x)$ 是关于 x 的函数, 所以我们要寻找另外的做法. 假设绳子的密度变化是连续且“平滑”的, 我们可以通过把绳子分割成 n 小节 (注意这些小节必须严格地首尾相接, 不能有重合或者空隙). 第 i 节取 x_i 到 x_{i+1} , 令其长度为 $x_{i+1} - x_i = \Delta x_i$ 使每一个小节内, 密度可以近似看成是恒定的, 这样我们可以用 $\rho(\xi_i)$ ($x_i \leq \xi_i \leq x_{i+1}$) 来代替第 i 节的密度, 当每一节足够小时, 可以认为 ξ_i 在 $x_i \leq \xi_i \leq x_{i+1}$ 约束下的取值并不会影响结果. 第 i 小节的质量为

$$\Delta m_i = \rho(\xi_i) \Delta x_i S \quad (1)$$

所以总的质量用求和符号来表示, 就是

$$m = \sum_{i=1}^n \Delta m_i \approx \sum_{i=1}^n \rho(\xi_i) \Delta x_i S = S \sum_{i=1}^n \rho(\xi_i) \Delta x_i \quad (2)$$

由于当 n 取有限值时, 上式并不精确成立, 所以只能使用约等号, 但是 n 越大,

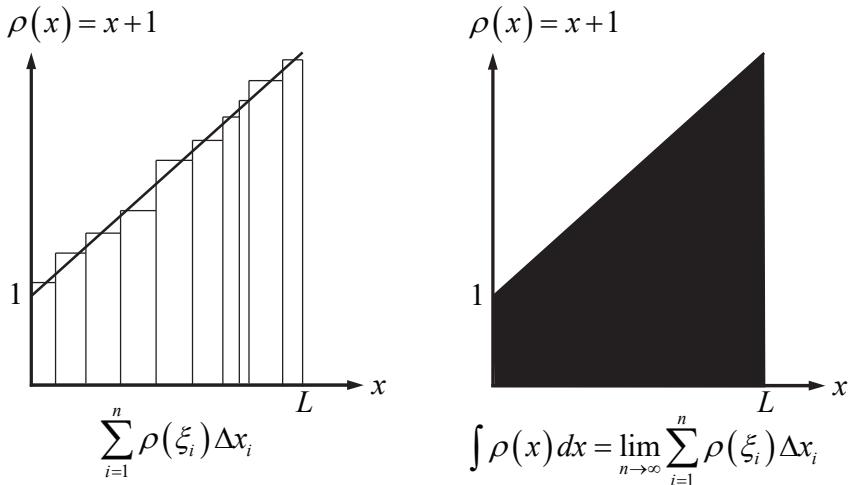
约等号两边就越精确成立。这是极限的思想，用极限符号来表，就是

$$m = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \Delta m_i = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \rho(\xi_i) \Delta x_i S = S \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \rho(\xi_i) \Delta x_i \quad (3)$$

这种表达式在物理中反复出现，所以使用积分符号 \int 用于代替极限和求和符号。另外把 ξ_i 写成 x （当 n 趋近于无穷大时，参量 i 和 Δx_i 具体是多少就不重要了），把表示增量的 Δ 变为表示微小量的 d ，上式就写为

$$m = \int dm = \int S \rho(x) dx = S \int \rho(x) dx \quad (4)$$

下面先看看 $\int \rho(x) dx$ ，即 $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \rho(\xi_i) \Delta x_i$ 的另一种理解。画出 $\rho(x)$ 图像。例如 $\rho(x) = x+1$ ，则 $\rho(\xi_i) \Delta x_i$ 可以表示左图的第 i 个小长方形的面积， $\sum_{i=1}^n \rho(\xi_i) \Delta x_i$ 表示长方形面积之和。如果 n 非常大且每个 Δx_i 取得非常小，左图看起来就会像右图（题外话，如果用放大镜看屏幕，右图阴影部分也是由屏幕像素排成的长方形组成的）。所以 $\int \rho(x) dx$ 可以用来表示右图阴影部分的面积。



但 $\int \rho(x) dx$ 里面显然不包含 0 和 L 的信息，我们根据题目中的情况，说这个积分是“从 0 积到 L ”，其中 0 是积分下限， L 是积分上限。为了表示这个信息，把它写到积分号右边变为

$$\int_0^L \rho(x) dx \quad (5)$$

这就是定积分的标准形式，但有时候为了书写方便，在不混淆的情况下可以把积分上下限省略。

这样的写法是很形象的，可以想象，积分号就是函数的曲线需要积分的部分，下标的位置代表曲线的起点，上标代表曲线的终点。这样，物理中很多问题就可以用积分表示了。

要注意的是，根据上面积分的定义，如果曲线在 x 轴的下方，面积应该表示成负值。但根据例 1 的物理情景，可知密度不可能是负值。

至于计算积分的具体方法，比求导要复杂得多，甚至很多积分的结果不能用初等函数表示，只能表示为级数等形式。然而对于基本初等函数的积分，用牛顿—莱布尼兹公式^[60] 即可马上求解。

牛顿-莱布尼兹公式

预备知识 不定积分^[50], 定积分^[57]

牛顿-莱布尼兹公式描述了定积分和不定积分的关系. 我们已知不定积分是求导的逆运算, 而定积分是函数曲线下方的面积, 二者乍看起来没什么联系, 但牛顿-莱布尼兹公式却揭示了二者之间的重要关系.

若 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的一个原函数^[50], 则

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) \quad (1)$$

推导

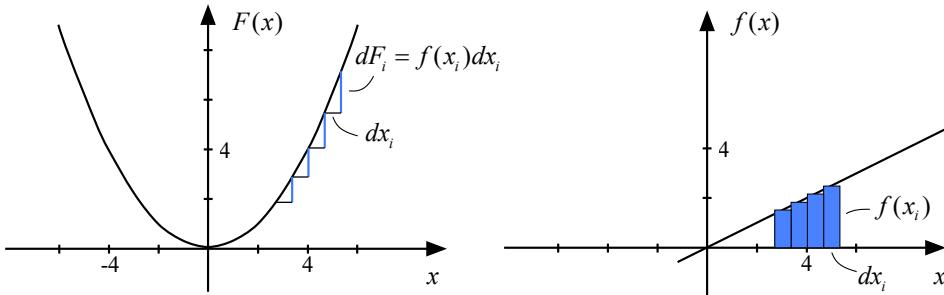


图 1: 右图中 $f(x)$ 的原函数为左图中的 $F(x)$, 当步长趋近 0 时, 右图中的长方形面积趋近于左图中小竖线的长度.

如图 1, 根据定积分^[57] 的定义, 有¹⁰

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i f(x_i) \Delta x_i \quad (2)$$

其中 $f(x_i) \Delta x_i$ 可看成是右图中第 i 个小矩形的面积, 求和是对从 a 到 b 的所有小矩形求和. 现在不妨把 x_i 设为第 i 个小矩形左端的 x 坐标. 考虑到求导是不定积分的逆运算, 有 $f(x_i) = F'(x_i)$, 所以小矩形的面积变为

$$f(x_i) \Delta x_i = F'(x_i) \Delta x_i \simeq \Delta F_i = F(x_{i+1}) - F(x_i) \quad (3)$$

¹⁰这里假设极限存在.

最后一步使用了微分近似. 该式可以理解成, 右图中的小矩形面积约等于左图中的小竖线长度, 即原函数 $F(x)$ 在 x_i 到 x_{i+1} 间的增量. 当取极限 $\Delta x_i \rightarrow 0$ 时, 上式取等号. 代回式 1, 有

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i [F(x_{i+1}) - F(x_i)] = F(b) - F(a) \quad (4)$$

该式可理解为, 如果把左图中每一段 Δx_i 所对应的微小增量 ΔF_i 都加起来, 再取极限 $\Delta x_i \rightarrow 0$, 就是 $F(x)$ 从 a 到 b 的总增量.

例 1 计算定积分

$$\int_{m\pi}^{n\pi} \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx \quad (5)$$

先计算对应的不定积分. 由积分表得 $\sin(x)$ 的原函数为 $-\cos(x)$, 由第一类换元法中式 () 得 $\sin(ax)$ 原函数为 $-\cos(ax)/a$. 所以

$$\int \sin^2\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = \frac{1}{2}(x - \sin x \cos x) + C \quad (6)$$

原函数值得指出, 另一种更简单的方法是, 由于被积函数的对称性, 可将一个周期内高为 1 的长方形 (面积为 π) 划分成等面积的两部分, 曲线下方的面积 $\pi/2$ 就是积分结果.

换元积分法

预备知识 不定积分^[50]

第一类换元积分法

由复合函数的求导法则，若令 $F'(x) = f(x)$ ，则

$$\frac{d}{dx}F[u(x)] = f[u(x)]u'(x) \quad (1)$$

由于求导的逆运算是积分，有

$$\int f[u(x)]u'(x) dx = F[u(x)] + C \quad (2)$$

所以如果某个积分可以看成 $\int f[u(x)]u'(x) dx$ 的形式，且 $F(x)$ 较容易求出，即可根据式 2 写出结果。这种方法叫做第一类换元积分法。这类换元积分法的技巧就在于如何看出被积函数的结构是 $\int f[u(x)]u'(x) dx$ ，只有多练习才能熟能生巧。

例 1

计算

$$\int a \sin(ax + b) dx$$

令 $f(x) = \sin(x)$, $u(x) = ax + b$, 则上式刚好是 $\int f[u(x)]u'(x) dx$ 的形式。从基本初等函数积分表已知 $\sin x$ 的一个原函数是 $F(x) = -\cos x$, 那么答案就是

$$F[u(x)] + C = -\cos(ax + b) + C \quad (3)$$

总结到更一般的情况，根据换元积分法，若已知 $\int f(x) dx = F(x) + C$ ，则对于任意常数 a 和 b ，必有 $\int a f(ax + b) dx = F(ax + b)$ 。根据积分的基本性质，两边同除 a ，得

$$\int f(ax + b) dx = \frac{1}{a}F(ax + b) \quad (4)$$

该式使用频率很高，需要熟练掌握。类似例子还有

$$\int \frac{1}{ax + b} dx = \frac{1}{a} \ln(ax + b) + C \quad \int e^{ax+b} dx = \frac{1}{a}e^{ax+b} + C$$

等等。

积分变量替换

换元积分法的过程在形式上可以记为(见微分^[43])

$$\begin{aligned}\int f[u(x)]u'(x) \, dx &= \int f[u(x)] \, d[u(x)] = \int f(u) \, du = F(u) + C \\ &= F[u(x)] + C\end{aligned}\quad (5)$$

该式把积分变量由 x 换成了 u , 故称为换元积分法.

第二类换元积分法

第二类换元积分法从某种意义上和第一类换元积分相反. 若要对一个函数积分, 先把它的自变量看做另一个变量的函数, 再逆向使用式 5, 即可化简积分.

$$\int f(x) \, dx = \int f[x(t)] \, d[x(t)] = \int f[x(t)]x'(t) \, dt \quad (6)$$

这个积分看似复杂了, 但是如果 $x(t)$ 选取适当, 反而可以使计算化简.

例 2

计算

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

显然 $x \in (-1, 1)$, 选取 $x(t) = \sin t$. 替换后的定义域为 $t \in (-\pi/2, \pi/2)$, 函数单调递增¹¹. 上面积分变为

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \int \frac{d \sin t}{\sqrt{1-\sin^2 t}} = \int \frac{\cos t \, dt}{\cos t} = \int 1 \, dt = t + C = \arcsin x + C \quad (7)$$

验证: 根据反函数求导法则^[33]

$$\arcsin' x = \frac{1}{\cos(\arcsin x)} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (8)$$

¹¹注意任何积分换元法中的两个变量必须有一一对应的关系, 即相互的函数关系在定义域内都为单调.

分部积分法

预备知识 不定积分^[50], 牛顿莱布尼兹公式^[60]

结论

$$\int F(x)g(x) \, dx = F(x)G(x) - \int f(x)G(x) \, dx \quad (1)$$

$$\int_a^b F(x)g(x) \, dx = [F(x)G(x)]_a^b - \int_a^b f(x)G(x) \, dx \quad (2)$$

$$\int f(x)g(x) \, dx = f(x)g^{[1]}(x) - f^{(1)}(x)g^{[2]}(x) + \int f^{(2)}(x)g^{[2]}(x) \, dx \quad (3)$$

推导

令 $f(x) = F'(x)$, $g(x) = G'(x)$, 根据乘法的求导公式

$$[F(x)G(x)]' = f(x)G(x) + F(x)g(x) \quad (4)$$

即

$$F(x)g(x) = [F(x)G(x)]' - f(x)G(x) \quad (5)$$

两边不定积分（积分常数可任取）得

$$\int F(x)g(x) \, dx = F(x)G(x) - \int f(x)G(x) \, dx \quad (6)$$

所以如果被积函数等于两个函数的乘积，则可选择其中一个 (F) 为“求导项”进行求导，另一个 (g) 为“积分项”进行不定积分（积分常数可任取），然后代入该式即可。

若要计算定积分，既可以先计算不定积分然后使用牛顿-莱布尼兹公式，也可以直接对式 5 进行定积分得

$$\int_a^b F(x)g(x) \, dx = [F(x)G(x)]_a^b - \int_a^b f(x)G(x) \, dx \quad (7)$$

例 1 求 xe^{-x} 的不定积分和从 0 到 $+\infty$ 的定积分

令 x 项为“求导项”，导数为 1， e^{-x} 为“积分项”，积分为 $-e^{-x}$. 代入式 6 得

$$\int xe^{-x} dx = x(-e^{-x}) - \int 1 \times (-e^{-x}) dx = -xe^{-x} - e^{-x} + C \quad (8)$$

如果直接计算定积分，把“求导项”和“积分项”直接代入式 7 得

$$\int_0^{+\infty} xe^{-x} dx = [x(-e^{-x})]_0^{+\infty} - \int_0^{+\infty} 1 \times (-e^{-x}) dx = 0 - [e^{-x}]_0^{+\infty} = 1 \quad (9)$$

连续分布积分

由于 $f(x)$ 的 n 次导数可以记为 $f^{(n)}(x)$ ，不妨把 $g(x)$ 的 n 次不定积分（ n 个积分常数任取）记为¹² $g^{[n]}(x)$. 则分部积分式 6 可记为

$$\int f(x)g(x) dx = f(x)g^{[1]}(x) - \int f^{(1)}(x)g^{[1]}(x) dx \quad (10)$$

再对第二项利用分部积分，仍然将 $f^{(1)}$ 作为“求导项”， $g^{[1]}$ 作为“积分项”，得

$$\int f(x)g(x) dx = f(x)g^{[1]}(x) - f^{(1)}(x)g^{[2]}(x) + \int f^{(2)}(x)g^{[2]}(x) dx \quad (11)$$

再把 $f^{(2)}$ 作为“求导项”， $g^{[2]}$ 作为“积分项”，分布积分得

$$\int f(x)g(x) dx = f(x)g^{[1]}(x) - f^{(1)}(x)g^{[2]}(x) + f^{(2)}(x)g^{[3]}(x) - \int f^{(3)}(x)g^{[3]}(x) dx \quad (12)$$

可以发现若要使用 N 次分部积分，第 $i \leq N$ 项等于第 $i-1$ 项中的“求导项”求导，“积分项”积分，再取相反数，最后不定积分中只需把“求导项”额外求一次导即可.

¹²这是我自己的符号

多维球体的体积

预备知识 定积分^[57], Γ 函数^[231]

结论

$$V_n = \begin{cases} \frac{R^n}{(n/2)!} \pi^{(n-1)/2} & (n = 2n-1) \\ \frac{R^n}{(n/2)!} \pi^{n/2} & (n = 2n) \end{cases} = \frac{\pi^{n/2} R^n}{\Gamma(1+n/2)} \quad (1)$$

说明

若定义 n 维球体的表面满足方程 $\sum_{i=1}^n x_i^2 = R_n^2$, 其中 x_i 为 n 维直角坐标系中第 i 个坐标. 所有满足 $\sum_{i=1}^n x_i^2 \leq R_n^2$ 的坐标点都定义为球内的点, 且定义 n 维直角坐标系中的体积为 $V_n = \int dx_1 dx_2 \dots dx_n$, 积分是对所有球内的点积分.

如果这些定义看起来很抽象, 不妨代入到三维空间中考虑. 三维直角坐标系中, x_1, x_2, x_3 分别是 x, y, z , R_3 是球的半径, 球表面上任意一点都满足 $x^2 + y^2 + z^2 = R_3^2$, 且球的体积分为 $\int dx dy dz$ 是对球内部的所有点积分. 另外, 若把上述定义代入到 1 维和 2, 不难发现所谓的“1 维球”和“2 维球”分别是半径为 R_1 的线段和半径为 R_2 的圆.

推导

由于正常人的空间想象力最高是 3 维, 我们先由 3 维以内的球体总结出体积的递推公式, 这样即使我们无法想象高维球的形状, 也可以计算其体积. 下面在推导前 3 个维度时, 请把所有 $x_1 x_2 x_3$ 想象成 xyz .

1 维球

这是一条线段, 满足 $x_1^2 \leq R_1^2$, “体积”就是线段长度

$$V_1 = \int dx_1 = 2R_1 \quad (2)$$

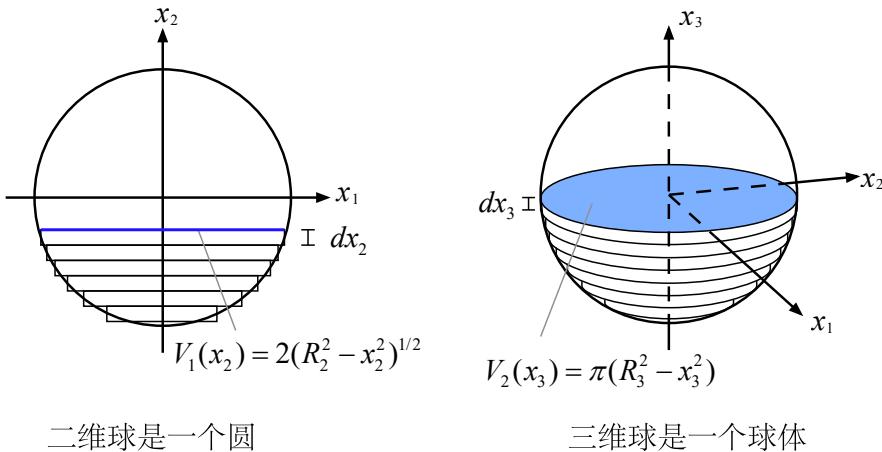


图 1: 二维和三维球的体积

2 维球

这是一个圆，满足 $x_1^2 + x_2^2 \leq R_2^2$ ，在计算体积 $V_2 = \int dx_1 dx_2$ 时，可以先对 x_1 积分再对 x_2 积分

$$V_2 = \int \left(\int dx_1 \right) dx_2 = \int V_1(x_2) dx_2 \quad (3)$$

在几何上，这就是说把圆从沿 x_1 轴切成许多一维球（线段），由 $x_1^2 \leq R_2^2 - x_2^2$ ，一维球的半径为 $R_1(x_2) = (R_2^2 - x_2^2)^{1/2}$ 。代入式 2，得 x_2 处切出的一维球的体积（线段的长度）为

$$V_1(x_2) = \int dx_1 = 2R_1 = 2(R_2^2 - x_2^2)^{1/2} \quad (4)$$

再代入式 3，得二维球的体积为（注意 $-R_2 < x_2 < R_2$ ）

$$V_2 = \int V_1 dx_2 = \int 2(R_2^2 - x_2^2)^{1/2} dx_2 = \pi R_2^2 \quad (5)$$

3 维球

这是一个球体，满足 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R_3^2$ ，计算体积 $V_3 = \int dx_1 dx_2 dx_3$ 时，可以先对 $x_1 x_2$ 积分

$$V_3 = \int \left(\int dx_1 dx_2 \right) dx_3 = \int V_2(x_3) dx_3 \quad (6)$$

在几何意义上，这是说把求沿 x_1x_2 平面切成许多二维球（圆），然后把求的体积（面积）沿 x_3 轴积分。由 $x_1^2 + x_2^2 \leq R_3^2 - x_3^2$ ，得 x_3 处二维球半径为 $R_2 = (R_3^2 - x_3^2)^{1/2}$ 。由式 5 得体积为

$$V_2(x_3) = \pi R_2^2 = \pi(R_3^2 - x_3^2) \quad (7)$$

代入式 6 得三维球体积（注意 $-R_2 < x_2 < R_2$ ）

$$V_3 = \int V_2(x_3) dx_3 = \int \pi(R_3^2 - x_3^2) dx_3 = \frac{4}{3}\pi R^3 \quad (8)$$

n 维球

由以上两个推导，可以在代数上总结出递推的规律。把 n 维球在 $n+1$ 维积分，得（可使用 Mathematica 软件计算积分，见 Mathematica 积分）

$$V_4 = \int_{-R}^R \frac{4}{3}\pi(R_4^2 - x_4^2)^{3/2} dx_4 = \frac{1}{2}\pi^2 R^4 \quad (9)$$

$$V_5 = \int_{-R}^R \frac{1}{2}\pi^2(R_5^2 - x_5^2)^{4/2} dx_5 = \frac{8}{15}\pi^2 R^5 \quad (10)$$

$$V_6 = \int_{-R}^R \frac{8}{15}\pi^2(R_6^2 - x_6^2)^{5/2} dx_6 = \frac{1}{6}\pi^3 R^6 \quad (11)$$

$$V_7 = \int_{-R}^R \frac{1}{6}\pi^3(R_7^2 - x_7^2)^{6/2} dx_6 = \frac{16}{105}\pi^3 R^7 \quad (12)$$

对奇数项和偶数项分别总结规律，不难发现

$$V_n = \begin{cases} \frac{R^n}{(n/2)!} \pi^{(n-1)/2} & (n = 2n-1) \\ \frac{R^n}{(n/2)!} \pi^{n/2} & (n = 2n) \end{cases} \quad (13)$$

半整数的阶乘的定义^[231] 为

$$\frac{n}{2}! = \frac{n}{2} \cdot \left(\frac{n}{2} - 1\right) \cdots \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (14)$$

若用 Γ 函数^[231] 表示以上结果，就是

$$V_n = \frac{\pi^{n/2} R^n}{\Gamma(1 + n/2)} \quad (15)$$

二阶常系数齐次微分方程

二阶常系数齐次微分方程形式如下

$$ay'' + by' + c = 0 \quad (1)$$

注意到指数函数 $y = Ce^{rx}$ 第 n 阶导数为 $r^n e^{rx}$, 不妨尝试把指数函数代入方程, 得

$$(ar^2 + br + c) e^{rx} = 0 \quad (2)$$

由于 $e^{rx} \neq 0$, 必有 $ar^2 + br + c = 0$. 把这个二次函数叫做**特征方程**, 解特征方程, 就可以得到方程的解. 下面分 4 种情况来讨论

1. 有两个不同的实根 r_1, r_2 ($b^2 - 4ac > 0$), 方程的通解为

$$y = C_1 e^{r_1 x} + C_2 e^{r_2 x} \quad (3)$$

2. 有一个重根 r ($b^2 - 4ac = 0$), 方程的通解为

$$y = C_1 e^{rx} + C_2 x e^{rx} \quad (4)$$

3. 有两个纯虚数根 ($b = 0, b^2 - 4ac < 0$), 方程的通解为 (见弹簧振子,LC 振荡电路[??])

$$y = C_1 \cos(\omega_0 x) + C_2 \sin(\omega_0 x) \quad (5)$$

或

$$y = C_1 \cos(\omega_0 x + C_2) \quad (6)$$

其中 $\omega_0 = \sqrt{c/a}$.

4. 有两个复数根 $r \pm i\omega$ ($b \neq 0, b^2 - 4ac < 0$), 方程的通解为 (见受阻弹簧振子, 无源 LRC 电路)

$$y = e^{rx} [C_1 \cos(\omega x) + C_2 \sin(\omega x)] \quad (7)$$

或

$$y = C_1 e^{rx} \cos(\omega x + C_2) \quad (8)$$

其中 $r = -\frac{b}{2a}, \omega = \frac{1}{2a} \sqrt{4ac - b^2}$

若令 $\omega_0 = \sqrt{\frac{c}{a}}, \gamma = \frac{b}{2\sqrt{ac}}$, 则 $r = -\omega_0 \gamma, \omega = \omega_0 \sqrt{1 - \gamma^2}$. 满足 $r^2 + \omega^2 = \omega_0^2$.

二阶常系数非齐次微分方程

结论

在二阶常系数齐次微分方程的右端加上一个函数 $f(x)$, 就得到了二阶常系数非齐次微分方程

$$y'' + by' + cy = f(x) \quad (1)$$

这就是二阶常系数非齐次微分方程. 其解为

$$y(x) = C_1 y_1 + C_2 y_2 - y_1 \int \frac{y_2 f}{W} dx + y_2 \int \frac{y_1 f}{W} dx \quad (2)$$

其中 W 可以写成二阶行列式

$$W = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y'_1 & y'_2 \end{vmatrix} = y_1 y'_2 - y'_1 y_2 \quad (3)$$

其中 y_1, y_2, W, f 都是 x 的函数, 后面的括号和自变量被省略. 和是对应齐次方程

$$y'' + by' + cy = 0 \quad (4)$$

的两个线性无关的解.

应用

推导

下面介绍的方法叫常数变易法, 其主要思想可参考一阶线性非齐次微分方程的通解:

设通解的形式为

$$y = v_1 y_1 + v_2 y_2 \quad (5)$$

其中, 也是关于的函数. 对该式两边求导, 得

$$y' = v'_1 y_1 + v'_2 y_2 + v_1 y'_1 + v_2 y'_2 \quad (6)$$

为了接下来计算方便，我们规定 v_1, v_2 满足关系¹³

$$v'_1 y_1 + v'_2 y_2 = 0 \quad (7)$$

把式 7 代入式 6，得到

$$y' = v_1 y'_1 + v_2 y'_2 \quad (8)$$

继续对求导，得到

$$y'' = v'_1 y'_1 + v'_2 y'_2 + v_1 y''_1 + v_2 y''_2 \quad (9)$$

把式 5 式 8 式 9 代回原方程式 1 得

$$(v'_1 y'_1 + v'_2 y'_2 + v_1 y''_1 + v_2 y''_2) + b(v_1 y'_1 + v_2 y'_2) + c(v_1 y_1 + v_2 y_2) = f \quad (10)$$

化简，得

$$(v'_1 y'_1 + v'_2 y'_2) + v_1(ay''_1 + by'_1 + cy_1) + v_2(ay''_2 + by'_2 + cy_2) = f \quad (11)$$

由于 y_1 和 y_2 都是式 4 的解，式 (9) 化为

$$v'_1 y'_1 + v'_2 y'_2 = f \quad (12)$$

总结一下，刚刚的推导说明，和在 (5) 的假设条件下，只要满足 (10) 即可满足 (1) 式。联立 (5) 和 (10) 式，得到关于 v'_1 和 v'_2 的方程组

$$\begin{cases} y_1 v'_1 + y_2 v'_2 = 0 \\ y'_1 v'_1 + y'_2 v'_2 = f \end{cases} \quad (13)$$

解得

$$\begin{cases} v'_1 = -y_2 f / W \\ v'_2 = y_1 f / W \end{cases} \quad (14)$$

其中

$$W = y_1 y'_2 - y_2 y'_1 = \begin{vmatrix} y_1 & y_2 \\ y'_1 & y'_2 \end{vmatrix} \quad (15)$$

¹³ 这么规定会不会丢失一部分解呢？或许会，但是由于我们已经有了式 1 对应的齐次解 y_1 和 y_2 ，根据线性微分方程解的结构（见同济大学的《高等数学》），只需要找到式 1 的任意一个解，就可以找到它的通解。

对(13)的两条式子积分，即可得到

$$v_1 = - \int \frac{y_2 f}{W} dx + C_1$$

$$v_2 = \int \frac{y_1 f}{W} dx + C_2$$

(15)(16)代入(5)式，得到方程(1)的解为

$$y(x) = C_1 y_1 + C_2 y_2 - y_1 \int \frac{y_2 f}{W} dx + y_2 \int \frac{y_1 f}{W} dx$$

由于上式满足线性微分方程解的结构，所这已经是通解了。但是必须注意，根据常数变易法，我们只能找到没有零点的区间内找到方程式1的通解。

拓展阅读 一阶线性非齐次微分方程的通解

正交函数系

预备知识 定积分[\[57\]](#)

因变量为实数的情况

定义给出一组函数（有限或无限多个）， $f_i(x)$ ($i = 1, 2 \dots$)，如果满足

$$\int_a^b f_i(x) f_i(x) dx \neq 0 \quad (1)$$

当整数 $m \neq n$ 时

$$\int_a^b f_m(x) f_n(x) dx = 0 \quad (2)$$

那么这一组函数就是区间 $[a, b]$ 内的一个正交函数系。

这一组函数的性质可以类比矢量的正交，“两个函数相乘再积分”这个步骤可以类比矢量的点乘。如果两个不同的矢量正交（垂直），则它们的点乘为零。如果他们的模长不为零，则一个矢量点乘自身不为零。

特殊地，若给正交函数系中的每个函数的平方进行归一化，使得

$$\int_a^b f_i(x) f_i(x) dx = 1 \quad (3)$$

那么该正交函数系就是归一的. 其性质可以表示为

$$\int_a^b f_m(x) f_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (4)$$

其中 δ_{mn} 是克罗内克 δ 函数 (Kronecker Delta Function).

因变量为复数的情况

若函数系中 $f_i(x)$ 的自变量为实数, 因变量为复数, 则正交的定义变为

$$\int_a^b f_i^*(x) f_j(x) dx \neq 0 \quad (i \neq j) \quad (5)$$

归一化的定义变为

$$\int_a^b f_i^*(x) f_i(x) dx = 1 \quad (6)$$

正交归一条件可以统一写成

$$\int_a^b f_i^*(x) f_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (7)$$

傅里叶级数（三角）

预备知识 几何矢量, 定积分^[57]

结论

满足狄利克雷条件的周期函数 $f(x)$ (周期为 $2l$) 可以使用以下三角函数展开

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{n\pi}{l}x\right) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \quad (1)$$

其中

$$a_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx \quad (2)$$

$$b_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx \quad (3)$$

狄利克雷条件: 函数值有限, 存在有限个间断点和有限个极值点.

说明

注意式 1 的所有 a_n 项为偶函数项, 所有 b_n 项为奇函数项. 若 $f(x)$ 是偶函数, 所有 b_n 项为零, 若是奇函数, 则所有 a_n 项为零¹⁴. 如果 $f(x)$ 不具有奇偶性, 可以表示为偶函数和奇函数之和, 分别对应所有 a_n 项和所有 b_n 项

$$f(x) = \frac{1}{2}[f(x) + f(-x)] + \frac{1}{2}[f(x) - f(-x)] \quad (4)$$

$f(x)$ 的函数值既可以是实数也可以是复数. 实函数的展开系数 a_n, b_n 也必须取实数, 复函数的展开系一定不全是实数.

¹⁴证明: 如果 $f(x)$ 是偶函数, 那么 式 3 中的被积函数就是奇函数, 所以在区间 $[-l, l]$ 的积分为零. 奇函数的证明类似.

完备性

傅里叶级数最奇妙的地方大概就是它能展开任意满足狄利克雷条件的函数，这个性质叫做**完备性**. 一般高等数学教材中不证明完备性，这里只给出几个例子说明随着求和项数增加，三角函数如何逼近不连续或不光滑的函数.

例 1 方波

首先定义一个方波为

$$f(x) = \begin{cases} 1 & 2k\pi < x \leq (2k+1)\pi \\ -1 & (2k-1)\pi < x \leq 2k\pi \end{cases} \quad (5)$$

注意 $f(x)$ 在 $x = k\pi$ 处存在间断点. 进行傅里叶级数展开得

$$f(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{4}{\pi(2k+1)} \sin((2k+1)x) \quad (6)$$

注意由于 $f(x)$ 是奇函数，求和只有正弦项. 取级数的前 m 项求和并画图如图 1.

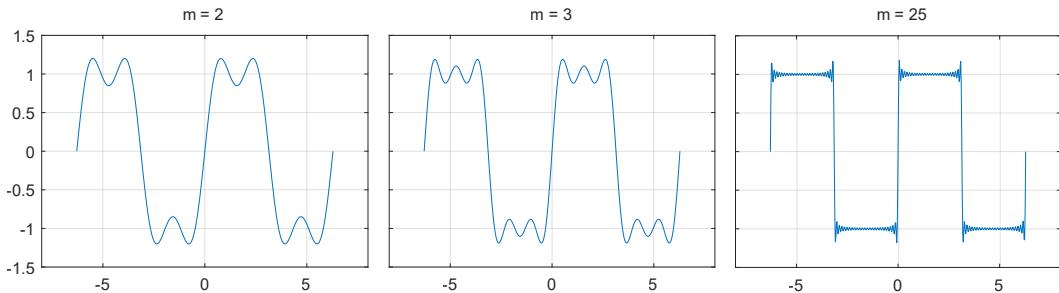


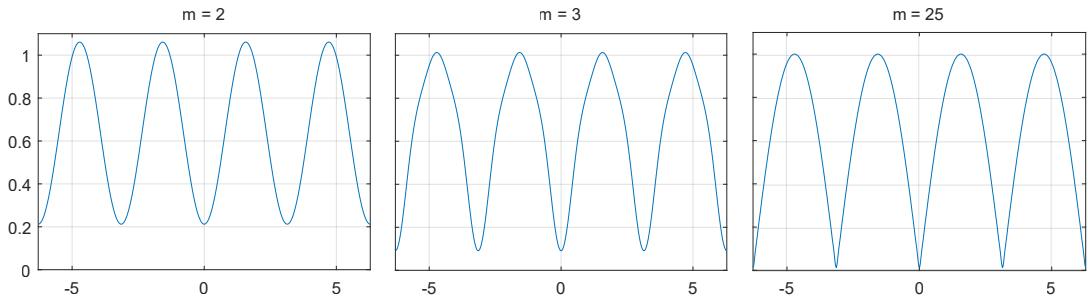
图 1: 有限项傅里叶级数逼近方波

例 2 正弦函数的绝对值

偶函数 $f(x) = |\sin x|$ 存在不光滑的点，展开成傅里叶级数为

$$f(x) = |\sin x| = \frac{2}{\pi} - \frac{4}{\pi} \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{4k^2 - 1} \cos 2kx \quad (7)$$

前 m 项和画图如图 2.

图 2: 有限项傅里叶级数逼近 $|\sin(x)|$

系数公式推导

在泰勒级数^[47]中，我们通过求 n 阶导数的方式来“过滤”出第 n 阶系数。这里我们用积分的方式来“过滤”系数。这里我们通过一个重要的类比来讲解，即几何矢量在正交（不归一）基底上的展开。

给出一组无穷多个函数

$$\frac{1}{2}, \sin \frac{\pi}{l}x, \cos \frac{\pi}{l}x, \sin \frac{2\pi}{l}x, \cos \frac{2\pi}{l}x, \dots \sin \frac{n\pi}{l}x, \cos \frac{n\pi}{l}x \dots \quad (8)$$

其中 n 是正整数。我们把任意满足狄利克雷条件的函数（以下简称任意函数）比作几何矢量，把上面这组函数（式 8）比作矢量基底（称为函数基底），任意函数都可以表示成这组基底的线性组合（式 1）。现在把两个任意函数（矢量） $f(x)$ 和 $g(x)$ 的点乘定义为它们的乘积在 $[-l, l]$ 内积分

$$\langle f|g \rangle = \int_{-l}^l f(x)g(x) dx \quad (9)$$

可以证明这组基底正交（即任意两个不同的基底点乘为 0，证明见词条最后）但不归一（某矢量与自身点乘等于 1）。与“几何矢量在正交但不归一的基底上展开”一样，我们只要把函数分别与各个基底点乘，再除以基底的模长平方（模方）即可获得线性组合的系数 a_n 和 b_n 。可以证明所有基底的模方为 l ，这样我们就得到了系数公式（式 2 式 3）。

正弦基底

若我们只需要在一个区间 $[0, l]$ 上展开函数 $f(x)$ 而不在意其他地方，那么我们可以假想 $f(x)$ 是以 $2l$ 为周期的奇函数，这样，我们只需要用正弦基底展

开 $f(x)$ 即可¹⁵. 于是我们可以说, 式 8 中给出的所有正弦基底在区间 $[0, l]$ 具有完备性.

例 3 用正弦基底展开闭区间内的函数

定义区间 $[0, a]$ 内的一个三角形函数如下, 先把函数归一化, 再用正弦基底做傅里叶展开.

$$f(x) = \begin{cases} \frac{2}{a}x & (0 < x \leq \frac{a}{2}) \\ 2 - \frac{2}{a}x & (\frac{a}{2} < x < a) \end{cases} \quad (10)$$

首先假想 $f(x)$ 为奇函数, 原则上可以直接使用式 3 计算展开系数, 但由于被积函数 $f(x) \sin(x)$ 为偶函数, 可以先把式 3 化简为

$$b_n = \frac{2}{a} \int_0^a f(x) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad (11)$$

又注意 $f(x)$ 关于区间中点的对称性, 我们可以进一步判断出 (如图 *) n 为偶数时 b_n 项都为零, 而 n 为奇数项的 b_n 在 $[0, a/2]$ 的积分等于在 $[a/2, a]$ 的积分, 所以

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{4}{a} \int_0^{a/2} f(x) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{8}{a^2} \int_0^{a/2} x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \end{aligned} \quad (12)$$

这个积分既可以见例 *, 也可以用 Wolfram Alpha 或 Mathematica 完成. 结果是

$$b_n = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{8}{\pi^2 n^2} \quad (n \text{ 为奇数}) \quad (13)$$

进一步说, 我们可以用正弦基底在任意区间 $[x_0, x_0 + l]$ 上展开任意函数. 要这样做, 我们只需要把所有正弦基底平移 x_0 即可.

$$\sin \frac{\pi}{l}(x - x_0), \sin \frac{2\pi}{l}(x - x_0), \dots \sin \frac{n\pi}{l}(x - x_0) \dots \quad (14)$$

¹⁵ 显然我们也可以假想 $f(x)$ 是以 $2l$ 为周期的偶函数, 用余弦基底展开 $f(x)$. 但更常见的是使用正弦基底, 经常在量子力学中使用, 因为无限深势阱要求波函数在区间两端消失.

证明函数基底正交

现在证明任意两个不同的基底点乘等于 0. 当 $m \neq n$ 时, 有

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} \sin(mx) \cdot \sin(nx) dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[(m-n)x] dx - \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[(m+n)x] dx = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx) \cdot \cos(nx) dx \\ &= -\frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[(m-n)x] dx + \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos[(m+n)x] dx = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} \sin(mx) \cdot \cos(nx) dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \sin[(m+n)x] dx - \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \sin[(m-n)x] dx = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} 1 \cdot \sin x dx = 0 \quad (18)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} 1 \cdot \cos x dx = 0 \quad (19)$$

其中任意一个函数与自己点乘都等于 π (除了常函数 1 积分为 2π).

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sin^2(nx) dx = \pi \quad (20)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos^2(nx) dx = \pi \quad (21)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} 1^2 dx = 2\pi \quad (22)$$

傅里叶级数 (指数)

结论

预备知识 傅里叶级数（三角）^[74], 欧拉公式^[17]

$f(x)$ 是自变量为实数的复变函数, 若满足狄利克雷条件, 则可展在区间 $[-l, l]$ 展开成复数的傅里叶级数

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n \exp\left(i \frac{n\pi}{l} x\right) \quad (1)$$

其中

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) \exp\left(-i \frac{n\pi}{l} x\right) dx \quad (2)$$

当 $f(x)$ 为实函数时, c_n 与 c_{-n} 互为复共轭. 当 $f(x)$ 为偶函数或奇函数时, 分别有 $c_{-n} = c_n$ 或 $c_{-n} = -c_n$.

推导

类比三角傅里叶级数^[74] 的情况. 这时, 函数基底变为

$$f_n(x) = \exp\left(i \frac{n\pi}{l} x\right) \quad n \in N \quad (3)$$

定义复函数 $f(x), g(x)$ 的点乘为

$$\langle f | g \rangle = \int_{-l}^l f(x)^* g(x) dx \quad (4)$$

可证明函数基底 (式 3) 正交且模长为 $2l$, 用克罗内克 δ 函数表示为

$$\langle f_m | f_n \rangle = 2l \delta_{mn} \quad (5)$$

与三角傅里叶级数同理, 可得式 1 和式 2.

与三角傅里叶级数的关系

考虑到正余弦函数和复指数函数的关系

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \quad \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (6)$$

三角傅里叶级数的系数式 2^[74] 和式 3^[74] 可以用指数傅里叶级数的系数表示

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx \\ &= \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) \exp\left(i\frac{n\pi}{l}x\right) dx + \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) \exp\left(-i\frac{n\pi}{l}x\right) dx \\ &= c_{-n} + c_n \end{aligned} \quad (7)$$

同理，

$$b_n = \frac{c_{-n} - c_n}{i} \quad (8)$$

注意这里全都有 $n \geq 0$. 由以上两式，也可以解得

$$c_n = \frac{a_n - ib_n}{2} \quad c_{-n} = \frac{a_n + ib_n}{2} \quad (9)$$

实函数，奇函数，和偶函数的情况

特殊地，当 $f(x)$ 为实函数时，由于 a_n 和 b_n 必定是实数，根据式 9 可知

$$c_{-n} = c_n^* \quad (10)$$

即正负系数互为复共轭。当 $f(x)$ 为偶函数或奇函数时，三角傅里叶级数分别只有 a_n 或 b_n 不为零^[74]，同样根据式 9 可得，两种情况分别对应

$$c_{-n} = c_n = \frac{a_n}{2} \quad c_{-n} = -c_n = i\frac{b_n}{2} \quad (11)$$

由以上两式可得，如果 $f(x)$ 既是实函数又是偶函数时， c_n 和 c_{-n} 是相等的实数，如果既是实函数又是奇函数， c_n 和 c_{-n} 是相反的纯虚数。

偏导数

预备知识 导数^[28]

对一个多元函数 $y = f(x_1, x_2 \dots x_i \dots)$, 如果求导时只把 x_i 看成自变量, 剩下的 $x_{j \neq i}$ 都看做常数, 得到的导数就叫函数 (关于 x_i) 的偏导数. 以二元函数 $z = f(x, y)$ 为例, 对 x 的偏导数常记为

$$\frac{\partial z}{\partial x} \quad \frac{\partial f}{\partial x} \quad f_x \quad \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_y \quad (1)$$

最后一种记号在括号右下角声明了保持不变的自变量, 这在许多情况下能避免混淆.

例 1

对于函数 $f(x, y) = x^2 + 2y^2 + 2xy$, 两个偏导数分别为

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x + 2y \quad \frac{\partial f}{\partial y} = 4y + 2x \quad (2)$$

例 2

对于函数 $z = \sin(y \cos x) + \cos^2 x$

$$\frac{\partial z}{\partial x} = -y \cos(y \cos x) \sin x - 2 \cos x \sin x = -y \cos(y \cos x) - \sin 2x \quad (3)$$

$$\frac{\partial z}{\partial y} = \cos(y \cos x) \cos x \quad (4)$$

几何意义

类比导数的几何意义 (曲线的斜率), 若在三维直角坐标系中画出曲面 $f(x, y)$, 则 $\partial f / \partial x$ 和 $\partial f / \partial y$ 分别是某点处曲面延 x 方向和 y 方向的斜率. 所以从某点 (x_0, y_0) 延 x 方向移动一个微小量 Δx , 假设曲面平滑, 则函数值增加

$$\Delta f \approx \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x \quad (5)$$

写成微分关系就是

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx \quad (y \text{ 不变}) \quad (6)$$

高阶偏导

与一元函数的高阶导数类似，多元函数也可以求高阶偏导数，不同的是，由于每求一次偏导都需要指定对哪个变量。例如二元函数的二阶偏导有

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \quad (7)$$

若高阶偏导的分母中出现不止一个变量，我们就称其为混合偏导。混合偏导的一个重要性质就是偏导的顺序可以任意改变，例如上式中有 $\partial^2 f / \partial x \partial y = \partial^2 f / \partial y \partial x$ 。这点本书不做证明，可以通过以上的例子验证。

全微分

预备知识 偏导数^[81]

以二元函数为例，在偏微分的几何意义中，若 $z = f(x, y)$ 在某点 (x_0, y_0) 附近的曲面光滑¹⁶，那么如果考虑一个足够小的区域，可以把曲面近似为平面。设平面方程为

$$z = c_0 + c_x(x - x_0) + c_y(y - y_0) \quad (1)$$

当 $x = x_0, y = y_0$ ，时显然有 $c_0 = f(x_0, y_0)$ ，求两个偏导，又有

$$c_x = \frac{\partial f}{\partial x} \quad c_y = \frac{\partial f}{\partial y} \quad (2)$$

令坐标增量为 $\Delta x \equiv x - x_0, \Delta y \equiv y - y_0, \Delta z \equiv z - c_0$ ，则平面方程变为

$$\Delta z = \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial f}{\partial y} \Delta y \quad (3)$$

令增量为无穷小，即

$$dz = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (4)$$

这就是全微分关系。全微分的意义是，从某一点开始向任意方向移动 (dx, dy) ，函数的增量等于只向 x 方向移动 dx 的增量加上只向 y 方向移动 dy 的增量。类似地， N 元函数的全微分关系为

$$dz = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i \quad (5)$$

事实上，偏微分也可以理解为是由该式定义的。

全微分近似

类比一元函数的微分近似^[??] $\Delta y \approx df/dx \cdot \Delta x$ ，若 N 元函数各个变量的一阶偏导在一小块区域内变化不大，那么函数值的变化可近似为

$$\begin{aligned} \Delta z &= f(x_1 + \Delta x_1 \dots x_N + \Delta x_N) - f(x_1 \dots x_N) \\ &\approx \frac{\partial f}{\partial x_1} \Delta x_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial x_N} \Delta x_N \end{aligned} \quad (6)$$

¹⁶光滑的数学定义是，各阶偏导数在区域内连续，即没有断点。

例 1 测量误差

测量一个边长各不相同的长方体的体积，若三边的测量值和最大测量误差分别为 $a, \sigma_a, b, \sigma_b, c, \sigma_c$ （假设不确定度远小于边长），求体积的最大测量误差 σ_V 及最大相对误差 σ_V/V 。

类比“一元函数微分”中的例 1，长方体的体积为 $V(a, b, c) = abc$ ，由全微分近似得

$$\sigma_V \approx \frac{\partial V}{\partial a} \sigma_a + \frac{\partial V}{\partial b} \sigma_b + \frac{\partial V}{\partial c} \sigma_c = bc\sigma_a + ac\sigma_b + ab\sigma_c \quad (7)$$

相对不确定度为

$$\frac{\sigma_V}{V} \approx \frac{\sigma_a}{a} + \frac{\sigma_b}{b} + \frac{\sigma_c}{c} \quad (8)$$

复合函数的偏导 链式法则

预备知识 复合函数的偏导 链式法则^[85]

若已知二元函数 $z = f(u, v)$, z 是 u, v 的函数, 但若 u 和 v 都又是 x 和 y 的函数, 则 z 最终是 x 和 y 的函数, 即

$$z(x, y) = f[u(x, y), v(x, y)] \quad (1)$$

那如何求 z 对 x 和 y 的偏微分呢? 我们先来看全微分关系. 首先

$$dz = \frac{\partial f}{\partial u} du + \frac{\partial f}{\partial v} dv \quad (2)$$

而 u 和 v 的微小变化又都是由 x 和 y 的微小变化引起的

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy \quad dv = \frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy \quad (3)$$

所以

$$\begin{aligned} dz &= \frac{\partial f}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy \right) + \frac{\partial f}{\partial v} \left(\frac{\partial v}{\partial x} dx + \frac{\partial v}{\partial y} dy \right) \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial x} \right) dx + \left(\frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial y} \right) dy \end{aligned} \quad (4)$$

这就是 z 关于 x 和 y 的全微分关系. 根据定义

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial x} \quad (5)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial y} \quad (6)$$

这也叫偏导的链式法则.

通用函数名

物理中常常会出现一种容易混淆的情况¹⁷, 就是当一个因变量可以有几套自变量 (例如上面的 $z(u, v)$ 和 $z(x, y)$) 时, 通常直接用因变量 (z) 作为函数名而另外不定义函数名 (f). 然而 $z(u, v)$ 与 $z(x, y)$ 中的 z 并不是同一个函数. 以下举例说明

¹⁷ “通用函数名”是我的叫法

例 1

在二维直角坐标系中，定义势能函数为

$$V = f(x, y) = x^2 + y^2 + 2x \quad (7)$$

而若用极坐标描述该势能，则函数变为

$$V = g(r, \theta) = f(r \cos \theta, r \sin \theta) = r^2 + 2r \cos \theta \quad (8)$$

但许多物理书为了表述方便并不用 f 和 g 区分两个不同的函数，而是使用 $V(x, y)$ 表示式 7 和 $V(r, \theta)$ 表示式 8。这样后者就有可能被误解为

$$V(r, \theta) = r^2 + \theta^2 + 2r \quad (\text{错}) \quad (9)$$

这就需要从语境中判断是否使用了通用函数名。

使用通用函数名时，要注意判断偏导数使用的是哪一套变量，例如 $\partial V / \partial x$ 默认使用 $V(x, y)$ 求偏导， $\partial V / \partial r$ 默认使用 $V(r, \theta)$ 求偏导。一种更复杂的情况如 $(\partial V / \partial x)_\theta$ 。按照定义¹⁸，应该是仅用 x 和 θ 表示 V ，然后求偏导。考虑极坐标的定义， θ 不变意味着 y 与 x 成正比即 $y = x \tan \theta$ ，代入式 7 得

$$V(x, \theta) = x^2(1 + \tan^2 \theta) + 2x \quad (10)$$

现在再对 x 求偏导即可（略）。

¹⁸ 见偏导数^[81] 中的式 1

全导数

预备知识 全微分^[83]

若多元函数包含若干个变量（以下以 $f(x, y, t)$ 为例），我们知道它可以对其中任意一个变量求偏导，即 $\partial f / \partial x$, $\partial f / \partial y$, $\partial f / \partial t$ ，注意求偏导时其余两个变量不变。现在若把 x, y 看做 t 的函数，那么 f 归根结底也是 t 的函数 $f(x(t), y(t), t)$ ，我们可以将其对 t 求导。为了强调这与对 t 求偏导有所不同，我们把得到的函数叫做全导数。

与偏微分中的链式法的推导类似，我们先来看函数的全微分^[83]

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial t} dt \quad (1)$$

而根据 x, y 与 t 的微分关系

$$dx = \frac{dx}{dt} dt \quad dy = \frac{dy}{dt} dt \quad (2)$$

代入上式得

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \right) dt \quad (3)$$

而若把 f 看做 t 的一元函数，又应该有全微分关系

$$df = \frac{df}{dt} dt \quad (4)$$

对比以上两式可得 f 关于 t 的全导数为

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (5)$$

第三章

线性代数

线性代数导航

几何矢量

高中数学和物理中最熟悉的矢量就是**几何矢量**，这里先回顾几何矢量（以下简称矢量）并引入一些新的概念。

矢量的存在与坐标系无关，可以将其想象成空间中的一些有长度有方向的箭头。我们对它的位置不感兴趣，所有长度和方向相同的矢量都视为同一矢量。对于讨论问题的不同，我们有时仅需要处于同一平面（**二维空间**）的所有矢量，有时需要**三维空间**中的所有矢量，最简单的情况下只需要沿某条线（**一维空间**）的所有矢量（这时我们可以规定一个正方向，且仅使用矢量的模长加正负号来表示矢量以简化书写）。

矢量的一些基本运算^[??] 同样不需要有任何坐标系的概念，**矢量相加**按照三角形法则或平行四边形法则即可。**矢量数乘**就是把矢量的模长乘以一个实数，若乘以正数，方向不变，若乘以负数，取相反方向。**矢量的线性组合**是把若干矢量分别乘以一个实数再相加得到新的矢量。

矢量的**点乘**^[91] 等于一个矢量在另一个矢量上的投影长度乘以另一个矢量的模长得到一个实数，矢量的**模长**等于矢量与自身点乘再开方，把矢量除以自身模长使模长变为单位长度的过程叫做**归一化**。若两矢量点乘为零，这两个矢量相互**正交**¹。

两矢量**叉乘**^[93] 得到的矢量垂直于两矢量，模长为一个矢量在另一个矢量垂直方向的投影长度乘以另一个矢量的模长。

为了方便描述矢量之间的关系，我们选取一些**线性无关**的矢量作为所有几何矢量的**基底**，使空间中的任何矢量可以用这些基底的唯一一种**线性组合**来表示， N 维空间需要 N 个基底。一般来说，基底不必互相正交。我们先把这些基底排序，任意矢量表示成它们的线性组合时，把式中的 N 个系数按照顺序排列，就是该矢量的**坐标**，通常用列矢量表示。由于线性组合的唯一性，每个矢量的坐标是唯一的。

为了方便计算任意矢量的坐标，往往取正交归一的基底^[102]（所有基底模

¹对于几何矢量，正交就是方向垂直，不加区分。

长为 1, 任意两基底互相正交). 这样, 任意矢量的坐标都可以通过与基底的点乘得到.

我们可以设计一种规则把某个空间的任意矢量对应（**映射**）到另一个矢量, 叫做**变换**². 如果对于某个变换, 任意矢量线性组合的变换等于这些矢量分别进行该变换再线性组合, 这个变换就是**线性变换**^[103]. 在某组基底下, 矢量的线性变换可以用其坐标的线性变换表示, 并且可以写成矩阵与坐标列矢量相乘的形式.

旋转矩阵^[108] 可以有两种理解, 一是矢量绕某个轴相对于当前的正交归一基底转动, 其坐标产生了变换, 二是矢量本身没有变, 只是其坐标在两个不同的正交归一基底中不同. 这种矩阵的特点是所有列(行)矢量都正交归一, 所以叫做**单位正交阵**. 单位正交阵的特点是逆矩阵等于转置矩阵.

矢量微积分

N 维矢量可以作为一个或多个标量的函数 (**矢量函数**), 可以看成是 N 个普通函数与矢量基底的数乘. 矢量函数同样可以对其自变量求导 (或求偏导), 也可以积分. 不同的是, 矢量函数还可以进行曲线积分和面积分

²更广义地, 变换可以在不同的空间中进行, 例如把一个三维空间中的矢量映射到一个二维空间中的矢量

矢量点乘

预备知识 矢量，二维与三维直角坐标，正交归一基^[102]

几何定义

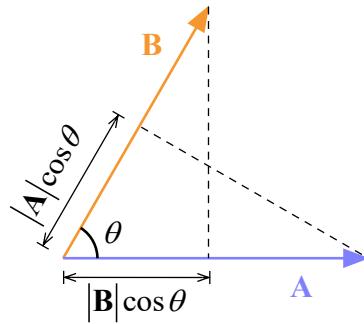


图 1: 点乘的几何定义

两个矢量的点乘 (dot product)³，就是把它们的模长相乘，再乘以他们的夹角的余弦值. 即

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \cos \theta \quad (1)$$

其中 θ 是两个矢量的夹角. 如图，几何定义中，既可以把点乘理解为 \mathbf{A} 投影在 \mathbf{B} 上的模长乘以 \mathbf{B} 的模长，也可以理解为 \mathbf{B} 投影在 \mathbf{A} 上的模长乘以 \mathbf{A} 的模长⁴. 可见当两矢量模长不变时，若方向相同，点乘取最大值 $|\mathbf{A}||\mathbf{B}|$; 若方向相反，点乘取最小值 $-|\mathbf{A}||\mathbf{B}|$; 若相互垂直，则点乘为 0.

点乘的性质

1. 交换律⁵

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} \quad (2)$$

³也叫点积，标量积 (scalar product) 或内积 (inner product)

⁴在这种理解下，若量矢量的夹角为钝角，投影长度取负值

⁵由式 1 易证

2. 分配律⁶

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \quad (3)$$

注意点乘不满足结合律，即

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbf{C} \neq \mathbf{A}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \quad (4)$$

前者是 \mathbf{C} 方向的矢量，后者是 \mathbf{A} 方向的矢量，显然不相等。

点乘的代数定义

若已知 \mathbf{A}, \mathbf{B} 在平面直角坐标系 xy 中坐标分别为 (A_x, A_y) 和 (B_x, B_y) ，那么如何用坐标表示点乘运算的结果呢？先用正交归一基^[102] 将两矢量展开

$$\mathbf{A} = A_x \hat{\mathbf{x}} + A_y \hat{\mathbf{y}} \quad \mathbf{B} = B_x \hat{\mathbf{x}} + B_y \hat{\mathbf{y}} \quad (5)$$

所以

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = (A_x \hat{\mathbf{x}} + A_y \hat{\mathbf{y}}) \cdot (B_x \hat{\mathbf{x}} + B_y \hat{\mathbf{y}}) \quad (6)$$

根据分配律式 3，我们可以把两个括号拆开，变为 4 个点乘之和。

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{x}} + A_y B_y \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{y}} + A_x B_y \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{y}} + A_y B_x \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{x}} \quad (7)$$

其中 $\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{x}} = 0$ (相互垂直)，而 $\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{y}} = 1$ (相互平行且模长都为 1)。所以最后结果为

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x + A_y B_y \quad (8)$$

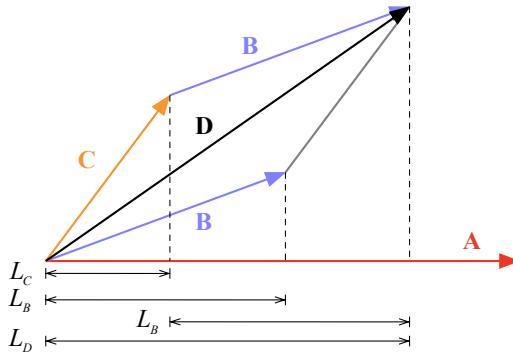
同理，可以在三维直角坐标系 xyz 中把点乘结果用坐标表示

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z \quad (9)$$

证明点乘的分配律

如图，令 $\mathbf{D} \equiv \mathbf{B} + \mathbf{C}$ ，把 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}$, $\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}$ 分别用几何定义理解为 \mathbf{B} , \mathbf{C} , \mathbf{D} 在 \mathbf{A} 上的投影乘 $|\mathbf{A}|$ ，且令投影长度分别为 L_B , L_C , L_D 。那么要证明 $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}$ ，只需证明 $L_D = L_B + L_C$ 即可。现在把 \mathbf{B} 平移使其起点与 \mathbf{C} 的终点对接 (投影长度不变)。从图中立即得出 $L_D = L_B + L_C$ 。

⁶证明见词条最后。



矢量叉乘

预备知识 三阶行列式^[109]

叉乘的几何定义

两个矢量 \mathbf{A} , \mathbf{B} 的叉乘 (cross product)⁷, 是一个矢量 \mathbf{C} . 叉乘用 “ \times ” 表示, 且不可省略, 即 $\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{C}$. 要确定一个矢量, 只需分别确定模长和方向.

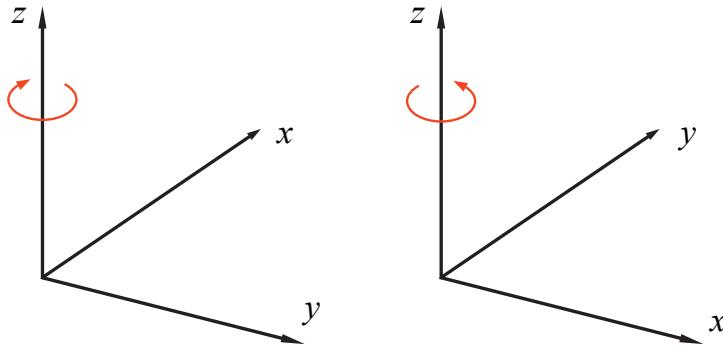
1. \mathbf{C} 的模长等于 \mathbf{A}, \mathbf{B} 的模长之积与夹角 θ ($0 \leq \theta \leq \pi$) 的正弦值相乘.

$$|\mathbf{C}| = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \sin \theta \quad (1)$$

2. \mathbf{C} 的方向垂直于 \mathbf{A}, \mathbf{B} 所在的平面, 但一个平面有两个垂直方向, 根据右手定则决定是哪个.

使用右手, 并不是说“右”比“左”在数学上更加优越, 而只是一种约定. 这么约定跟我们的直角坐标系的定义方式有关. 通常我们使用的直角坐标系如下面的右图所示, 叫做右手系(左图中则是左手系). 右(左)图之所以叫做右(左)手系, 是因为把右(左)手的四指先指向 x 轴, 再弯向 y 轴, 竖起拇指, 则拇指所指的方向就是 z 轴.

⁷也叫叉积 (cross product), 向量积 (vector product) 或矢量积



按照上面的定义，在右手系中，三个坐标轴的单位矢量⁸ $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 满足

$$\begin{cases} \hat{x} \times \hat{y} = \hat{z} \\ \hat{y} \times \hat{z} = \hat{x} \\ \hat{z} \times \hat{x} = \hat{y} \end{cases} \quad (2)$$

另外，跟点乘和数乘不同，叉乘不满足交换律。根据几何定义， $\mathbf{B} \times \mathbf{A}$ 与 $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 模长相同，方向却相反。表示某个矢量的反方向，就是在前面加负号，所以有

$$\mathbf{B} \times \mathbf{A} = -\mathbf{A} \times \mathbf{B} \quad (3)$$

于是由关系式 2 可得

$$\begin{cases} \hat{y} \times \hat{x} = -\hat{z} \\ \hat{z} \times \hat{y} = -\hat{x} \\ \hat{x} \times \hat{z} = -\hat{y} \end{cases} \quad (4)$$

根据定义，一个矢量叉乘自身，模长为 0。所以叉乘结果是零矢量 $\mathbf{0}$ 。于是又有

$$\begin{cases} \hat{x} \times \hat{x} = \mathbf{0} \\ \hat{y} \times \hat{y} = \mathbf{0} \\ \hat{z} \times \hat{z} = \mathbf{0} \end{cases} \quad (5)$$

式 2，式 4 和式 5 中共 9 条式子，描述了 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 任意两个叉乘的结果。

⁸模长为 1 的矢量

叉乘与数乘的混合运算

在 $\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{C}$ 中, \mathbf{C} 的方向仅由 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 的方向决定. 当 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 的方向不变时, \mathbf{C} 的模长正比 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 的模长相乘. 假设 λ 为常数 (标量), 显然有

$$(\lambda \mathbf{A}) \times \mathbf{B} = \mathbf{A} \times (\lambda \mathbf{B}) = \lambda(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (6)$$

即标量的位置可以任意变换, 但矢量与乘号的位置关系始终要保持不变.

叉乘的分配律

叉乘一个最重要的特性, 就是它满足分配律.

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \mathbf{C} \quad (7)$$

由式 3 及上式可以推出

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \times \mathbf{C} = -\mathbf{C} \times (\mathbf{A} + \mathbf{B}) = -\mathbf{C} \times \mathbf{A} - \mathbf{C} \times \mathbf{B} = \mathbf{A} \times \mathbf{C} + \mathbf{B} \times \mathbf{C} \quad (8)$$

在大部分的书上或课堂上, 这个结论只是被简单地列出来, 让学生觉得这是天经地义的 (就因为这种运算叫做“叉乘”?). 但从几何的角度理解, 这个结论并不显然 (见矢量叉乘分配律的几何证明^[98])

叉乘的坐标运算

把矢量 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 分别在直角坐标系的三个单位矢量 (也叫基底或矢基) 展开, 得到

$$\mathbf{A} = a_x \hat{\mathbf{x}} + a_y \hat{\mathbf{y}} + a_z \hat{\mathbf{z}} \quad \mathbf{B} = b_x \hat{\mathbf{x}} + b_y \hat{\mathbf{y}} + b_z \hat{\mathbf{z}} \quad (9)$$

(a_x, a_y, a_z) 和 (b_x, b_y, b_z) 分别是 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 的坐标. 根据叉乘的分配律 (式 7 式 8), 可得到如下 9 项

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times \mathbf{B} &= (a_x \hat{\mathbf{x}} + a_y \hat{\mathbf{y}} + a_z \hat{\mathbf{z}}) \times (b_x \hat{\mathbf{x}} + b_y \hat{\mathbf{y}} + b_z \hat{\mathbf{z}}) \\ &= +a_x b_x (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{x}}) + a_x b_y (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{y}}) + a_x b_z (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{z}}) \\ &\quad + a_y b_x (\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{x}}) + a_y b_y (\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{y}}) + a_y b_z (\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{z}}) \\ &\quad + a_z b_x (\hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{x}}) + a_z b_y (\hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{y}}) + a_z b_z (\hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{z}}) \end{aligned} \quad (10)$$

注意每一项中的运算在式 2, 式 4 和式 5 中都能找到答案, 于是上式化为

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = (a_y b_z - a_z b_y) \hat{\mathbf{x}} + (a_x b_z - a_z b_x) \hat{\mathbf{y}} + (a_x b_y - a_y b_x) \hat{\mathbf{z}} \quad (11)$$

令 $\mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{B}$, 则 \mathbf{C} 的分量表达式为

$$\begin{cases} c_x = a_y b_z - a_z b_y \\ c_y = a_x b_z - a_z b_x \\ c_z = a_x b_y - a_y b_x \end{cases} \quad (12)$$

式 11 可以用三阶行列式^[109] 表示为

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ a_x & a_y & a_z \\ b_x & b_y & b_z \end{vmatrix} \quad (13)$$

与普通行列式不同的是, 这个行列式中的元有部分是矢量, 所以得出的结果也是矢量.

例 1

空间直角坐标系中三角形的三点分别为 $O(0, 0, 0)$, $A(1, 1, 0)$, $B(-11, 1, 0)$. 求三角形的面积和一个单位法向量.

令 O 到 A 的矢量和 O 到 B 的矢量分别为

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= (1, 1, 0) - (0, 0, 0) = (1, 1, 0) \\ \mathbf{b} &= (-11, 1, 0) - (0, 0, 0) = (-11, 1, 0) \end{aligned} \quad (14)$$

三角形的面积为

$$S = \frac{1}{2} ab \sin \theta \quad (15)$$

其中 θ 是 \mathbf{a} 与 \mathbf{b} 的夹角. 根据叉乘的几何定义中的式 1

$$S = \frac{1}{2} ab \sin \theta = \frac{1}{2} |\mathbf{a} \times \mathbf{b}| \quad (16)$$

令

$$\mathbf{v} = \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ 1 & 1 & 0 \\ -11 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + 2\hat{\mathbf{z}} \quad (17)$$

坐标为 $(1, -1, 2)$, 模长为 $|\mathbf{v}| = \sqrt{1 + 1 + 2^2} = \sqrt{6}$, 所以面积为 $S = \sqrt{6}/2$.

根据叉乘的几何定义, $\mathbf{v} = (1, -1, 2)$ 就是三角形的法向量, 进行归一化⁹ 得单位法向量为

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} = \frac{(1, -1, 2)}{\sqrt{6}} = \left(\frac{\sqrt{6}}{6}, -\frac{\sqrt{6}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{3} \right) \quad (18)$$

⁹把矢量长度变为 1, 方向不变

矢量叉乘分配律的几何证明

预备知识 矢量的叉乘^[93]

证明 $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \mathbf{C}$

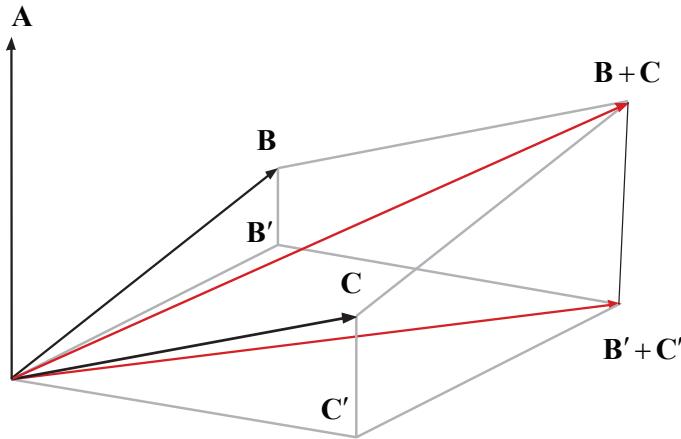


图 1: 把 $\mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$ 投影到与 \mathbf{A} 垂直的平面上

首先令

$$\mathbf{D} = \mathbf{B} + \mathbf{C} \quad (1)$$

把矢量 $\mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$ 在与矢量 \mathbf{A} 垂直的平面上投影，分别得到 $\mathbf{B}', \mathbf{C}', \mathbf{D}'$. 显然， $\mathbf{D}' = \mathbf{B}' + \mathbf{C}'$.

现在先证明

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{A} \times \mathbf{B}' \quad (2)$$

这是叉乘的一个基本的性质. 首先，根据叉乘的几何定义^[93]， $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 与 $\mathbf{A} \times \mathbf{B}'$ 的方向相同. 另外

$$|\mathbf{A} \times \mathbf{B}| = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \sin \theta_{AB} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}'| = |\mathbf{A} \times \mathbf{B}'| \quad (3)$$

所以二者模长也相等，证毕.

同理有

$$\mathbf{A} \times \mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{C}' \quad (4)$$

$$\mathbf{A} \times \mathbf{D} = \mathbf{A} \times \mathbf{D}' \quad (5)$$

所以，要证明

$$\mathbf{A} \times \mathbf{D} = \mathbf{A} \times \mathbf{B} + \mathbf{A} \times \mathbf{C} \quad (6)$$

只需要证明

$$\mathbf{A} \times \mathbf{D}' = \mathbf{A} \times \mathbf{B}' + \mathbf{A} \times \mathbf{C}' \quad (7)$$

即可。

由于 $\mathbf{B}', \mathbf{C}', \mathbf{D}'$ 都与 \mathbf{A} 垂直，所以 \mathbf{A} 与之叉乘的效果相当于 $\mathbf{B}', \mathbf{C}', \mathbf{D}'$ 的模长分别乘以 $|\mathbf{A}|$ ，且绕 \mathbf{A} 逆时针分别旋转 90° 。所以上式就是在说，“ \mathbf{D}' 乘以 $|\mathbf{A}|$ 旋转 90° ”和“ \mathbf{B}' 与 \mathbf{C}' 分别乘以 $|\mathbf{A}|$ 旋转 90° 再相加”结果相同，而这显然成立。

证毕。

连续叉乘的化简

预备知识 矢量的叉乘^[93]

连续两个叉乘的化简也叫 BAC-CAB 定理

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \quad (1)$$

$$(\mathbf{B} \times \mathbf{C}) \times \mathbf{A} = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B} \cdot (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) \quad (2)$$

这个定理既可以“暴力破解”，也可以用几何的方法证明。以下对几何原理略作说明，便可解释该公式的结构，方便理解和记忆。考察第一条式子，先计算 $\mathbf{B} \times \mathbf{C}$ （命名为 \mathbf{D} ）方向垂直于 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 所在平面。又因为 $\mathbf{A} \times \mathbf{D}$ 垂直于 \mathbf{D} ，所以结果还是落到 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 所在平面，所以等式右边是 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 的线性组合。

这里介绍一种简单的记忆方法，括号外的矢量在哪边，括号内靠近那边的矢量所在的项前面就是正号，另一项前面则是负号，如图 1 所示。

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= \underbrace{\mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})}_{\text{括号内化简}} \\ (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) \times \mathbf{A} &= \underbrace{\mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})}_{\text{括号内化简}} \end{aligned}$$

图 1: 三矢量叉乘的化简

三矢矢积

预备知识 矢量的叉乘^[93]

定义

任意的三个矢量，如果其中两个叉乘再与第三个矢量点乘，那么这种运算叫做这三个矢量的混合积

$\mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}$ 是矢量 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ 的混合积，且满足

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{B} \times \mathbf{C} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{C} \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \quad (1)$$

这个公式可由下图记忆。混合积的方向由叉乘的方向决定，与点乘无关。如果

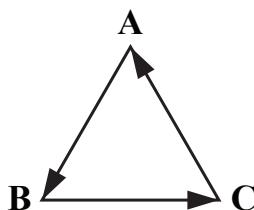


图 1: 式 1 记忆法

混合积的顺序取与右图相反的方向，根据叉乘的定义，需要在前面加上负号（叉乘不满足乘法交换律！）。下面三式与上面三式互为相反数。

$$\mathbf{C} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{A} \times \mathbf{C} \cdot \mathbf{B} \quad (2)$$

另外要注意混合积的方向是由叉乘的次序所决定的，与点乘的次序无关。所以上式也可记为

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{B}) = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{A}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{C}) \quad (3)$$

注意括号是必须的， $\mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \times \mathbf{B}$ 是错误的式子，因为 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}$ 是常数，不能与 \mathbf{B} 叉乘。

几何法证明

设三个矢量都以原点作为起点，以三个矢量为棱作平行六面体(如图，). 从矢量的叉乘^[93]可知 $|\mathbf{A} \times \mathbf{B}|$ 就是 \mathbf{A}, \mathbf{B} , 所在平行四边形的面积。令 $\mathbf{A} \times \mathbf{B} = |\mathbf{A} \times \mathbf{B}| \hat{\mathbf{n}}$ ，则 $\hat{\mathbf{n}}$ 为平面的法向量。平行六面体的高为 $|\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{C}|$ ，所以平行六面体的体积为底面积乘以高

$$V = |\mathbf{A} \times \mathbf{B}| |\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{C}| = |\mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}| \quad (4)$$

同理可得对于同一平行六面体

$$V = |\mathbf{B} \times \mathbf{C} \cdot \mathbf{A}| = |\mathbf{C} \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}| \quad (5)$$

这里只证明了绝对值，证明正负关系并不难，留给读者思考。

代数法证明

不难证明三矢积若展开成分量的形式，等于三个矢量组成的行列式。而利用行列式中任意两行置换符号改变，即可证明式 1

正交归一基

正交归一基(也叫单位正交基). 这里先讨论几何矢量或者代数矢量, 但结论也适用于其他矢量.

如果所讨论的任意的矢量都可以用一组矢量 $\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2 \dots \hat{\mathbf{x}}_n$ 的线性组合表示, 且定义了点乘运算, 使得 $\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}_j = \delta_{ij}$ (是克罗内克 δ 函数), 那么 $\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2 \dots \hat{\mathbf{x}}_n$ 就是正交归一基, 因为 $\hat{\mathbf{x}}_i$ 的模长 $\sqrt{\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}_i} = \sqrt{\delta_{ii}} = 1$, 且任意两个不同的矢量正交.

任意矢量在单位正交基上的展开

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i) \hat{\mathbf{x}}_i = \sum_{i=1}^n v_i \hat{\mathbf{x}}_i \quad (1)$$

最常见的例子就是几何矢量在直角坐标系的 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ 三个单位正交矢量上的展开.

$$\mathbf{v} = (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{x}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{y}}) \hat{\mathbf{y}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{z}}) \hat{\mathbf{z}} = v_x \hat{\mathbf{x}} + v_y \hat{\mathbf{y}} + v_z \hat{\mathbf{z}} \quad (2)$$

证明

由于任何矢量都可以表示成基底 $\hat{\mathbf{x}}_1 \dots \hat{\mathbf{x}}_n$ 的线性组合, 设

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n c_i \hat{\mathbf{x}}_i \quad (3)$$

用 $\hat{\mathbf{x}}_k$ 乘以等式两边, 得 $\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}_k = \sum_{i=1}^n c_i \hat{\mathbf{x}}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}_k = \sum_{i=1}^n c_i \delta_{ik} = c_k$. 所以式 3 中的系数有唯一确定的值 $c_k = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}_k$. 证毕.

线性变换

预备知识 直角坐标的旋转变换

从代数的角度来说，对于给出几个数，把他们分别与一些常数相乘再把积相加，得到另外几个数的过程就叫线性变换。例如，在直角坐标的旋转变换中，直角坐标系中任意一点 P 的坐标 (x, y) 绕原点旋转角 α 以后的坐标为

$$\begin{cases} x' = (\cos \alpha) x + (-\sin \alpha) y \\ y' = (\sin \alpha) x + (\cos \alpha) y \end{cases} \quad (1)$$

这就是一个典型的线性变换，任意给出两个实数 x, y ，通过与常数相乘再相加的方法得到两个新的实数 x', y' 。

有些线性变换是一一对应的，例如上面的例子中，任何一组 x, y ，有且仅有一组 x', y' 与之对应，反之亦然。在这种情况下，这个变换存在逆变换。求逆变换的一般方法就是把等号右边的 n 个变量作为未知数，求解 n 元一次方程组即可得到逆变换的表达式。

线性变换的矩阵表示

由 n 个数 $x_1 \dots x_n$ 变换到 m 个数 $y_1 \dots y_m$ 的线性变换的一般形式为

$$\begin{cases} y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ y_m = a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \end{cases} \quad (2)$$

这里一共有 $m \times n$ 个系数，每个系数的下标由两个数组成， a_{ij} 是计算 y_i 时 x_j 前面的系数。为了书写方便，把这些系数写成一个 m 行 n 列的数表，用圆括号括起来，就是表是该变换的矩阵。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \quad (3)$$

矩阵

预备知识 线性变换^[103]

本书中矩阵符号用加粗的正体字母来表示，而对应的矩阵元一般用斜体加行标和列标表示。例如矩阵 \mathbf{A} 的第 i 行第 j 列的矩阵元表示为 A_{ij} .

矩阵的转置

任意矩阵 \mathbf{A} 的转置（Transpose）记为 \mathbf{A}^T . 转置操作把 \mathbf{A} 的第 i 行变为 \mathbf{A}^T 的第 i 列，相当于把矩阵沿对角线翻转 180° . 即任意矩阵元满足

$$A_{ij}^T = A_{ji} \quad (1)$$

行矢量和列矢量可看做特殊的矩阵，行矢量转置后变为列矢量，反之亦然

$$(x_1, x_2 \dots, x_n)^T = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad (2)$$

为了排版方便，在正文中通常用 $(x_1, x_2 \dots, x_n)^T$ 表示列矢量.

矩阵的乘法

矩阵最常见的运算是矩阵的乘法. 线性变换^[103]

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1 = A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \dots + A_{1n}x_n \\ y_2 = A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \dots + A_{2n}x_n \\ \vdots \\ y_m = A_{m1}x_1 + A_{m2}x_2 + \dots + A_{mn}x_n \end{array} \right. \quad (3)$$

可用矩阵与列矢量的乘法表示为

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

令列矢量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$, 系数矩阵为 \mathbf{A} , 上式可记为

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax} \quad (5)$$

注意 \mathbf{A} 的列数必须和 \mathbf{x} 的行数相等. 由此可以定义矩阵乘以列矢量的运算规则: $m \times n$ 矩阵乘以 $n \times 1$ 列矢量会得到 $m \times 1$ 的列矢量. 要计算 y_i , 就用 $m \times n$ 矩阵的第 i 行的 n 个数和 x_1, \dots, x_n 分别相乘再相加, 即点乘^[91] 的代数定义

$$y_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j \quad (6)$$

若有 l 个不同的 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} , 第 k 个记为 $\mathbf{x}_k = (x_{1k}, \dots, x_{nk})^T$ 和 $\mathbf{y}_k = (y_{1k}, \dots, y_{mk})^T$, 对应的变换为

$$\begin{pmatrix} y_{1k} \\ y_{2k} \\ \vdots \\ y_{mk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1k} \\ x_{2k} \\ \vdots \\ x_{nk} \end{pmatrix} \quad (7)$$

可以将所有的 \mathbf{x}_k 和 \mathbf{y}_k 分别横向拼成 $n \times l$ 和 $m \times l$ 的矩阵

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nl} \end{pmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{m1} & \cdots & y_{ml} \end{pmatrix} \quad (8)$$

现在把 l 组线性变换用一条式子表示为

$$\begin{pmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{m1} & \cdots & y_{ml} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & \cdots & A_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1l} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nl} \end{pmatrix} \quad (9)$$

由此，可以定义一般的矩阵乘法： $m \times n$ 的矩阵 \mathbf{A} 和 $n \times l$ 的矩阵 \mathbf{X} 相乘得到 $m \times l$ 的矩阵 \mathbf{Y} ， Y_{ij} 等于 \mathbf{A} 的第 i 行和 \mathbf{X} 的第 j 列点乘.

$$\mathbf{Y} = \mathbf{AX} \quad (10)$$

矩阵元公式为

$$Y_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} X_{kj} \quad (11)$$

再次注意两个相乘的矩阵，左边矩阵的列数必须等于右边矩阵的行数.

根据定义，容易证明矩阵乘法满足分配律 $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC}$ ，但一般不满足交换律，举一个反例：

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

矩阵乘法的结合律

现在来看三个矩阵相乘，令

$$\mathbf{D} = \mathbf{A}(\mathbf{BC}) \quad (13)$$

这里的括号是为了强调顺序. 即使没有括号，习惯上也是从右向左计算. \mathbf{D} 的矩阵元为

$$D_{ij} = \sum_l A_{il} (BC)_{lj} = \sum_l A_{il} \left(\sum_k B_{lk} C_{kj} \right) \quad (14)$$

拆括号，得

$$D_{ij} = \sum_k \sum_l (A_{il} B_{lk} C_{kj}) \quad (15)$$

对 C_{kj} 进行合并同类项，得

$$D_{ij} = \sum_k \left(\sum_l A_{il} B_{lk} \right) C_{kj} \quad (16)$$

括号中恰好是 \mathbf{A} 乘以 \mathbf{B} 所得矩阵的矩阵元 $(AB)_{ik}$ 所以

$$D_{ij} = \sum_k (AB)_{ik} C_{kj} \quad (17)$$

即

$$\mathbf{D} = (\mathbf{AB})\mathbf{C} \quad (18)$$

证毕.

平面旋转变换

预备知识 正余弦函数的两角和公式

结论

已知直角坐标系中一点 $P(x, y)$, P 绕原点逆时针旋转 α 角 ($\alpha \in R$) 之后变为 $P'(x', y')$ 则有

$$x' = (\cos \alpha)x + (-\sin \alpha)y \quad (1)$$

$$y' = (\sin \alpha)x + (\cos \alpha)y \quad (2)$$

其逆变换如下, 即已知 $P'(x', y')$ 求 $P(x, y)$

$$x = (\cos \alpha)x' + (\sin \alpha)y' \quad (3)$$

$$y = (-\sin \alpha)x' + (\cos \alpha)y' \quad (4)$$

推导 (方法 1)

第一种推导方法不需要学习矩阵和线性变换, 只需要极坐标的定义^[6] 即可.

平面上一点 $P(x, y)$ 也可以用极坐标 (r, θ) 表示, 一般情况下令极点与原点重合, 极径与 x 轴重合, 则有

$$x = r \cos \theta \quad y = r \sin \theta \quad (5)$$

把点 P 绕原点逆时针旋转 α 角变为 P' , 则 P' 极坐标为 $(r, \theta + \alpha)$. 根据上式计算为 P' 的直角坐标 (x', y') 并用两角和公式化简如下

$$x' = r \cos(\theta + \alpha) = r \cos \theta \cos \alpha - r \sin \theta \sin \alpha = x \cos \alpha - y \sin \alpha \quad (6)$$

$$y' = r \sin(\theta + \alpha) = r \sin \theta \cos \alpha + r \cos \theta \sin \alpha = x \sin \alpha + y \cos \alpha \quad (7)$$

这就证明了式 1 和式 2 两式.

若要证式3和式4有两种方法. 一是将式1和式2式中的 x, y 看成未知数, 解二元一次方程组. 另一种方法的思路是, 既然 P 逆时针旋转 α 角为 P' , 那么把 P' 顺时针旋转 α 角可得到 P . 而“顺时针旋转 α 角”就是“逆时针旋转 $-\alpha$ 角”. 把变换式1和式2中的 α 换为 $-\alpha$ 再化简得

$$x = \cos(-\alpha)x' - \sin(-\alpha)y' = \cos(\alpha)x' + \sin(\alpha)y' \quad (8)$$

$$y = \sin(-\alpha)x' + \cos(-\alpha)y' = -\sin(\alpha)x' + \cos(\alpha)y' \quad (9)$$

证毕.

推导（方法2）

平面旋转矩阵

预备知识 平面旋转变换^[107], 矩阵的定义^[104]

旋转变换显然属于线性变换, 可以用矩阵 \mathbf{R}_2 表示. 虽然我们可以直接把变换写成矩阵乘以列矢量的形式, 但这里我们用另一种方法推导一次, 更能帮助理解和记忆.

$$\mathbf{R}_2(c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2) = c_1\mathbf{R}_2\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{R}_2\mathbf{v}_2 \quad (1)$$

已知单位矢量 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 逆时针旋转 θ 为

$$\mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2)$$

而任何矢量 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ 都可以表示成 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 的线性组合 $x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 所以

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_2 \left[x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] &= x_1 \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= x_1 \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3)$$

所以旋转矩阵为

$$\mathbf{R}_2 = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (4)$$

这与平面旋转变换^[107] 得出的结果一致.

逆矩阵

与逆变换对应的矩阵叫逆矩阵我们既可以使用平面旋转变换^[107] 中求逆变换的方法把 θ 变为 $-\theta$ 再化简求出 \mathbf{R}_2 的逆矩阵，或使用求逆矩阵的一般方法. 但最方便的是，由于这是一个**单位正交阵** (矩阵的列矢量是互相垂直的单位矢量)，我们只需要把矩阵转置即可得到逆矩阵.

$$\mathbf{R}_2^{-1} = \mathbf{R}_2^T \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (5)$$

行列式

行列式是线性代数中的一个重要工具，主要用于判断方阵中的所有列向量的线性无关¹⁰. 行列式运算的结果是一个数，若结果不为零，则线性无关，为零则线性相关. 物理中经常出现的是二阶和三阶行列式，高阶行列式的计算较为复杂（见词条最后），不必记忆其算法，可通过数学软件¹¹ 计算.

二阶行列式的定义

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \quad (1)$$

¹⁰充分必要条件是所有行向量也线性无关

¹¹详见 Matlab, Mathematica 和 Wolfram Alpha 的计算方法.

三阶行列式的定义

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \begin{cases} a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ -a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31} \end{cases} \quad (2)$$

几何理解

N 阶行列式是 N 维空间中平行体的体积, 平行体由矩阵的列矢量(或行矢量) 定义. 例如, 二阶行列式代表一个平行四边形的面积(二维体积), 平行四边形的四个顶点坐标分别为 $(0, 0)$, (a_{11}, a_{21}) , (a_{12}, a_{22}) 和 $(a_{11} + a_{12}, a_{21} + a_{22})$. 用几何理解可以很形象地解释下面的性质 1, 3, 4.

行列式的性质

以下性质中, 把“列”换成“行”同样成立, 这是因为性质 2.

1. 若矩阵的列矢量线性相关, 行列式为零, 否则不为零.
2. 矩阵转置后行列式的值不变.
3. 矩阵的任意一列乘以常数, 行列式的值也要乘以该常数.
4. 把矩阵的第 i 列叠加上“第 j 列乘任意常数”, 行列式的值不变.

以上性质证明略¹².

高阶行列式的定义

N 阶行列式(N 为正整数¹³)共有 $N!$ 项, 每一项都是 N 个矩阵元的乘积. 这 N 个矩阵元的行数和列数各不相同, 我们既可以在每一项中按照行标来排序, 也可以按照列标, 我们选用前者. 排序后, 行列式展开后的任意一项可记

¹²见同济大学的《线性代数》

¹³一阶行列式定义为 $|a_{11}| = a_{11}$, 虽然几乎从不被使用

为 (先不考虑前面的 ± 号)

$$\prod_{i=1}^N a_{i,P_n(i)} = a_{1,P_n(1)} \cdot a_{2,P_n(2)} \cdots \quad (3)$$

其中列标 $P_n(i)$ 是数列 $1, 2, \dots, N$ 置换 (用某种顺序排列) 后的第 i 个数, 显然该数列共有 $N!$ 种不同的排列, 这里用 n 表示第 n 种排列, 也表示行列式展开的第 n 项.

现在来考虑式 3 前面的 ± 号. 这由 P_n 的 逆序数 决定, 若逆序数为偶数, 则前面加正号, 奇数则加负号. 逆序数被定义为

$$\sum_{i=2}^N \text{满足 } P_n(i) < P_n(j) \ (j < i) \text{ 的个数} \quad (4)$$

若根据 P_n 对应的符号定义数列 S_n (取值 1 或 -1), 则 N 阶行列式的公式为

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum_{n=1}^{N!} S_n \prod_{i=1}^N a_{i,P_n(i)} \quad (5)$$

第四章

多元微积分

矢量的导数 求导法则

预备知识 矢量的加减, 矢量的数乘, 矢量函数, 导数^[28]

矢量的导数

若矢量 \mathbf{v} 只是一个标量 t 的函数, 记为 $\mathbf{v}(t)$, 则 \mathbf{v} 对 t 的导数可记为以下的一种 (括号可选择省略)

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad \frac{d}{dt}\mathbf{v} \quad \dot{\mathbf{v}} \quad (1)$$

其定义为 (类比导数^[28] 中导数的代数定义)

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(t + \Delta t) - \mathbf{v}(t)}{\Delta t} \quad (2)$$

唯一与标量函数的导数不同的是, 这里的减法是矢量相减, 结果还是矢量. 除以 Δt 相当于矢量的数乘 $1/\Delta t$, 结果也是矢量. 所以 $d\mathbf{v}/dt$ 也是一个关于 t 的矢量函数.

直角坐标系中对单变量矢量函数求导就是对矢量的各个分量分别求导 (见下文 “求导法则”).

应用举例 速度和加速度 (矢量)^[153], 匀速圆周运动的速度^[154] 和加速度^[156] (几何法)

矢量的偏导数

与标量函数的偏导类似, 对一个多元的矢量函数 $\mathbf{v}(x_1, x_2 \dots x_N)$, 如果把其他自变量都看做常数而对 x_i 求导, 那么就得到矢量函数关于 x_i 的偏导数.

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x_i} = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(x_1 \dots x_i + \Delta x_i \dots x_N) - \mathbf{v}(x_1 \dots x_i \dots x_N)}{\Delta x_i} \quad (3)$$

直角坐标系中对多变量矢量函数求偏导就是对矢量的各个分量分别求偏导 (见下文 “求导法则”).

矢量的求导法则

与标量函数一样，由定义不难证明矢量函数求导也是线性算符（ c_i 为常数）¹

$$\frac{d}{dt}[c_1 \mathbf{v}_1(t) + c_2 \mathbf{v}_2(t) + \dots] = c_1 \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} + c_2 \frac{d\mathbf{v}_2}{dt} \dots \quad (4)$$

直角坐标中，矢量函数可以看做三个分量上的标量函数且矢量基底不变，所以由上式可得矢量求导就是对每个标量函数求导。

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d}{dt}[v_x(t)\hat{\mathbf{x}}] + \frac{d}{dt}[v_y(t)\hat{\mathbf{y}}] + \frac{d}{dt}[v_z(t)\hat{\mathbf{z}}] = \dot{v}_x(t)\hat{\mathbf{x}} + \dot{v}_y(t)\hat{\mathbf{y}} + \dot{v}_z(t)\hat{\mathbf{z}} \quad (5)$$

要特别注意该式成立的条件是三个基底不随 t 改变，这在其他坐标系中并不成立，例如“极坐标中单位矢量的偏导^[??]”。

应用举例 匀速圆周运动的速度^[155] 和加速度^[157]（求导法）

矢量数乘，点乘或叉乘的求导在形式上都与标量函数的情况类似。

$$\frac{d}{dt}[f(t)\mathbf{v}(t)] = \frac{df}{dt}\mathbf{v} + f \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{v}(t)] = \frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (7)$$

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{u}(t) \times \mathbf{v}(t)] = \frac{d\mathbf{u}}{dt} \times \mathbf{v} + \mathbf{u} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (8)$$

由定义出发，不难证明以上三式，这里以式 7 为例进行证明。根据点乘定义以及标量函数的求导法则^[31] 有

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) &= \frac{d}{dt}(u_x v_x + u_y v_y + u_z v_z) \\ &= \left(\frac{du_x}{dt} v_x + u_x \frac{dv_x}{dt} \right) + \left(\frac{du_y}{dt} v_y + u_y \frac{dv_y}{dt} \right) + \left(\frac{du_z}{dt} v_z + u_z \frac{dv_z}{dt} \right) \\ &= \left(\frac{du_x}{dt} v_x + \frac{du_y}{dt} v_y + \frac{du_z}{dt} v_z \right) + \left(u_x \frac{dv_x}{dt} + u_y \frac{dv_y}{dt} + u_z \frac{dv_z}{dt} \right) \\ &= \frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} \end{aligned} \quad (9)$$

¹以下法则虽然以导数为例，但对偏导也同样适用。

应用举例 动量定理^[186], 角动量定理 (单个质点) ^[167]

矢量的高阶导数和偏导

与标量函数的高阶导数类似, 对某个矢量连续求 N 次导数, 就得到该函数的 N 阶导数. 上面在求圆周运动的加速度时, 事实上我们已经计算了位置矢量的导数 (速度) 的导数, 即位置矢量关于时间的二阶导导数.

与标量函数的偏导^[81]类似, 多元矢量函数的高阶导数也要声明各阶导数是对哪个变量进行的

方向导数

预备知识 全微分^[83], 点乘^[91], 正交归一基^[102]

先来看一幅等高线图 (图 1). 令高度 z 为位置的函数 $z = f(\mathbf{r})$. 这里 \mathbf{r} 是位矢^[150], 即 $f(\mathbf{r}) = f(x, y)$. 当位矢沿着等高线移动时, z 不变, 而当位矢沿垂直于等高线的方向移动时, z 变化得最快. 位置沿其他方向运动, z 的变化速度介于两者之间.

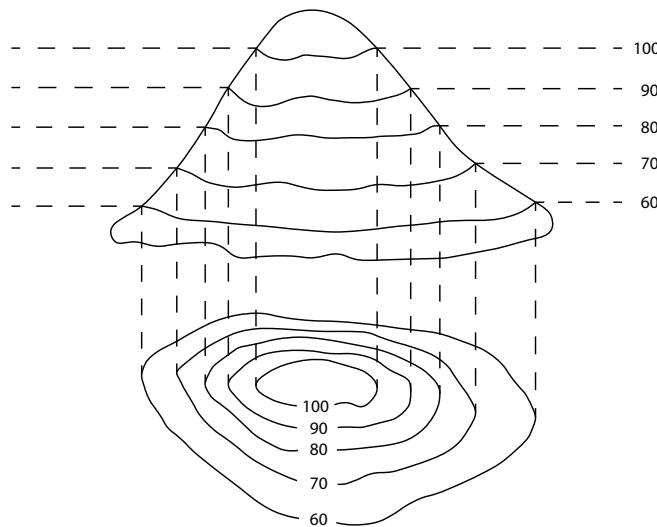


图 1: 等高线

那么如何衡量位置向各个方向移动时 z 变化的快慢呢？我们先规定一个方向 $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, n_y)$ （平面单位矢量，满足 $n_x^2 + n_y^2 = 1$ ），然后用方向导数来衡量变化率，其定义如下

$$\frac{df}{dn} \equiv \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{n}}\Delta s) - f(\mathbf{r})}{\Delta s} = \frac{df}{ds} \quad (1)$$

其中 $\hat{\mathbf{n}}\Delta s$ 代表沿 $\hat{\mathbf{n}}$ 方向的微小位移。从几何上来讲，二维函数 $f(\mathbf{r})$ 表示一个曲面，曲面上某点的方向导数就是曲面在该方向的斜率。

由“全微分^[83]”中的结论

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (2)$$

而现在我们往 $\hat{\mathbf{n}} = (n_x, n_y)$ 方向移动 ds ，所以

$$dx = n_x ds \quad dy = n_y ds \quad (3)$$

代入上式，得

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial x} n_x + \frac{\partial f}{\partial y} n_y \right) ds \quad (4)$$

根据导数与微分的关系（也可以通俗地说“两边同除 ds ”），就得到方向导数

$$\frac{\partial f}{\partial n} = \frac{df}{ds} = \frac{\partial f}{\partial x} n_x + \frac{\partial f}{\partial y} n_y \quad (5)$$

如果使用平面的正交归一基^[102] $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 写成矢量点乘^[91]的形式，就是

$$\frac{df}{dn} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial f}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} \right) \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (6)$$

定义二维直角坐标系中的 **Del** 算符为

$$\nabla = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} \quad (7)$$

其作用在函数上表示

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} + \frac{\partial f}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} \quad (8)$$

则方向导数可以写成相当简洁的形式，即

$$\frac{\partial f}{\partial n} = \nabla f \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (9)$$

多元函数的方向导数

通过和以上类似的分析，可以得出 N 元函数 $f(\mathbf{r}) = f(x_1, x_2 \dots x_N)$ 在单位方向矢量 $\hat{\mathbf{n}} = (n_{x1}, n_{x2} \dots n_{xN})$ 的方向上的微分关系为

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 \dots = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} n_{x1} + \frac{\partial f}{\partial x_2} n_{x2} \dots \right) ds \quad (10)$$

方向导数为

$$\frac{\partial f}{\partial n} = \frac{df}{ds} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \hat{\mathbf{x}}_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \hat{\mathbf{x}}_2 \dots \frac{\partial f}{\partial x_N} \hat{\mathbf{x}}_N \right) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \nabla f \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (11)$$

形式与式 9 相同。这里定义了 N 维直角坐标系的 **Del 算符** 为

$$\nabla = \hat{\mathbf{x}}_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \hat{\mathbf{x}}_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \dots \hat{\mathbf{x}}_n \frac{\partial}{\partial x_N} \quad (12)$$

矢量场

预备知识 球坐标系的定义^[8], 矢量的求导法则^[113]

对空间中指定范围的每一点 P 赋予一个矢量 \mathbf{v} , 就在该空间中形成了一个矢量场. 例如, 电荷附近的任意一点都存在一个电场矢量, 这就构成了一个矢量场. 管道中任意一点的水流都存在一个速度矢量, 他们也构成一个矢量场.

矢量场在不同的参考系中有不同的表示方法. 在空间直角坐标系中, 矢量场可以用矢量的三个分量关于 x, y, z 三个坐标的函数表示. 点 $P(x, y, z)$ 处的矢量分量为

$$\begin{cases} v_x(x, y, z) = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}} \\ v_y(x, y, z) = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{y}} \\ v_z(x, y, z) = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{z}} \end{cases} \quad (1)$$

也可以作为单位正交基^[102] 的线性组合写成一个整体

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{x}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{y}}) \hat{\mathbf{y}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{z}}) \hat{\mathbf{z}} \\ &= v_x(x, y, z) \hat{\mathbf{x}} + v_y(x, y, z) \hat{\mathbf{y}} + v_z(x, y, z) \hat{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (2)$$

在球坐标系^[8] 中, 也可以把每个点的矢量根据该点处的三个单位矢量 $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\theta}$, $\hat{\phi}$ 分解为三个分量. 基底的线性组合为

$$\mathbf{v} = v_r(r, \theta, \phi) \hat{\mathbf{r}} + v_\theta(r, \theta, \phi) \hat{\theta} + v_\phi(r, \theta, \phi) \hat{\phi} \quad (3)$$

需要特别注意, $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}, \hat{\phi}$ 也是关于 (r, θ, ϕ) 的函数, 所以对 \mathbf{v} 求导 (或偏导) 时必须根据矢量的求导法则^[113] 进行.

应用举例 力场^[161]

拓展阅读 梯度^[122], 散度, 旋度

极坐标中单位矢量的偏导

预备知识 极坐标系^[6], 矢量的偏导^[113]

与直角坐标系不同的是, 极坐标系中的 $\hat{\mathbf{r}}$ 与 $\hat{\theta}$ 都是坐标的函数, 即 $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}(r, \theta)$, $\hat{\theta} = \hat{\theta}(r, \theta)$, 它们对坐标的偏导如下

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} = \hat{\theta} \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{\mathbf{r}} \end{cases} \quad (1)$$

这是容易理解的, 若一个单位矢量绕着它的起点逆时针转动, 那么它的终点的速度的方向必然是它本身逆时针旋转 90 度的方向, 而大小等于矢量模长乘以角速度.

证明

如果令极轴方向的单位矢量为 $\hat{\mathbf{x}}$, 令其逆时针旋转 $\pi/2$ 的矢量为 $\hat{\mathbf{y}}$, 则

$$\hat{\mathbf{r}} = \cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{y}} \quad (2)$$

$$\hat{\theta} = \cos(\theta + \pi/2) \hat{\mathbf{x}} + \sin(\theta + \pi/2) \hat{\mathbf{y}} = -\sin \theta \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \hat{\mathbf{y}} \quad (3)$$

所以

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} = -\sin \theta \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \hat{\mathbf{y}} = \hat{\theta} \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\cos \theta \hat{\mathbf{x}} - \sin \theta \hat{\mathbf{y}} = -\hat{\mathbf{r}} \end{cases} \quad (4)$$

事实上, 由于 $\hat{\mathbf{r}}$ 与 $\hat{\theta}$ 都只是 θ 的函数, 也可以把偏导符号改成导数符号

$$\begin{cases} \frac{d \hat{\theta}}{d \theta} = -\hat{\mathbf{r}} \\ \frac{d \hat{\mathbf{r}}}{d \theta} = \hat{\theta} \end{cases} \quad (5)$$

拓展阅读 极坐标的矢量求导^[120], 正交曲线坐标系

极坐标中的矢量偏导

预备知识 极坐标系中单位矢量的偏导^[119]

在极坐标中必须注意的是, $\hat{\mathbf{r}}$ 与 $\hat{\theta}$ 都是坐标的函数, 所以一个矢量在求导时, 并不一定是分别对其分量求导. 例如, 平面矢量场在极坐标下可以表示为

$$\mathbf{v}(r, \theta) = f(r, \theta) \hat{\mathbf{r}} + g(r, \theta) \hat{\theta} \quad (1)$$

则的两个偏导数为

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} (f \hat{\mathbf{r}} + g \hat{\theta}) = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + f \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial r} + \frac{\partial g}{\partial r} \hat{\theta} + g \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \theta} (f \hat{\mathbf{r}} + g \hat{\theta}) = \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{\mathbf{r}} + f \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \hat{\theta} + g \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} \quad (3)$$

根据极坐标系中单位矢量的偏导^[119] 中的结论

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} = \hat{\theta} \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{\mathbf{r}} \end{cases} \quad (4)$$

所以式 2 和式 3 可以化为

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{\partial g}{\partial r} \hat{\theta} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \theta} &= \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{\mathbf{r}} + f \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \hat{\theta} + g \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \theta} \hat{\mathbf{r}} + f \hat{\theta} + \frac{\partial g}{\partial \theta} \hat{\theta} - g \hat{\mathbf{r}} \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial \theta} - g \right) \hat{\mathbf{r}} + \left(f + \frac{\partial g}{\partial \theta} \right) \hat{\theta} \end{aligned} \quad (6)$$

线积分

预备知识 功 功率^[159], 定积分^[57]

在“功 功率^[159]”中, 我们大致了解了线积分 $\int_{C_{ab}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}$ 的意义. 下面讨论如何在直角坐标系中具体计算线积分. 为书写方便, 以下省略积分路径 C_{ab} .

将被积曲线的参数方程可以表示为² $x(t), y(t), z(t)$, 则曲线上任意一点都唯一对应一个 t 值. 则根据微分关系, 当 t 增加 dt 时, 曲线上的一小段微位移矢量 $d\mathbf{r} = (dx, dy, dz)$ 中

$$dx = x'(t) dt \quad dy = y'(t) dt \quad dz = z'(t) dt \quad (1)$$

这样, 对曲线上任意一点 (对应参数 t), \mathbf{F} 可表示成 t 的矢量函数 $\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}[x(t), y(t), z(t)]$. \mathbf{F} 的三个分量³ 则表示为关于 t 的单变量标量函数

$$F_{x_i}(t) = F_{x_i}[x(t), y(t), z(t)] \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2)$$

下面将三维空间的线积分转换为三个一元定积分

$$\begin{aligned} \int \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{r}_i \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n F_x(\mathbf{r}_i) \Delta x_i + \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n F_y(\mathbf{r}_i) \Delta y_i + \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n F_z(\mathbf{r}_i) \Delta z_i \\ &= \int F_x(\mathbf{r}) dx + \int F_y(\mathbf{r}) dy + \int F_z(\mathbf{r}) dz \end{aligned} \quad (3)$$

设积分路径 C_{ab} 的起点对应 $t = a$, 终点对应 $t = b$. 结合式 1, 上面每一项积分可以表示为

$$\int F_{x_i}(\mathbf{r}) dx = \int_a^b F_{x_i}[x(t), y(t), z(t)] x'_i(t) dt \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4)$$

计算这三个关于 t 的定积分再相加, 就可以得出线积分结果.

²注意这里的 t 不一定代表时间, 可以是任意参数, 甚至可以是 x, y, z 中的一个.

³为了书写简洁, 这里定义 $x_1 \equiv x, x_2 \equiv y, x_3 \equiv z$.

例 1 计算力场对质点的做功

令力场为 $\mathbf{F} = \alpha r \hat{\mathbf{r}}$, 一质点从原点出发, 沿轨迹 $(x - a)^2 + y^2 = a^2$ 的上半部分移动到 $(a, 0)$, 求力对质点做的功. 若起点终点不变, 轨迹改为延 x 轴, 结果又如何?

我们先来建立运动轨迹的参数方程. 由于运动是一个圆, 我们可以使用圆的参数方程. 把角度作为参数 $t, t \in [0, \pi]$.

$$\begin{cases} x(t) = a(1 - \cos t) \\ y(t) = a \sin t \end{cases} \quad \begin{cases} x'(t) = a \sin t \\ y'(t) = a \cos t \end{cases} \quad (5)$$

把力场在直角坐标系中表示为 $\mathbf{F}(x, y) = \alpha(x \hat{\mathbf{x}} + y \hat{\mathbf{y}})$, 两个分量分别为 $F_x = \alpha x, F_y = \alpha y$. 由式 4 ($i = 1, 2$), 力场对质点做功等于两个定积分之和

$$W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \int_0^\pi \alpha a(1 - \cos t) \cdot a \sin t dt + \int_0^\pi \alpha a \sin t \cdot a \cos t dt \quad (6)$$

注意到第一个积分中的第二项恰好是第二个积分的相反数, 所以上式变为

$$\int_0^\pi a^2 \sin t dt = \frac{\alpha a^2}{2} \quad (7)$$

现在来计算延 x 轴的直线轨迹运动的情况. 由于轨迹上处处都有 $y = 0, F_y = 0$, 积分只有 F_x 一项. 另外 x 本身就可以作为轨道参数, 即 $x(t) = t, y(t) = 0, x \in [0, a]$. 代入式 4 得做功为

$$W = \int_0^a \alpha x dx = \frac{\alpha a^2}{2} \quad (8)$$

在上例中, 我们发现对于给定的矢量场, 即使路径不同, 当起点和终点相同时, 线积分的结果也相同 (虽然我们只计算了两条路径, 但这个结论是正确的). 具有这样性质的矢量场叫做**保守场**, 并总存在一个势能函数.

拓展阅读 梯度 梯度定理 [\[122\]](#)

梯度 梯度定理

预备知识 方向导数^[115]

在方向导数^[115]中，我们推出方向导数为

$$\frac{\partial f}{\partial n} = \nabla f \cdot \hat{n} \quad (1)$$

其中 ∇f 就叫标量函数 f 的梯度⁴. 要注意当且仅当 Del 算符 ∇ 作用在标量函数（即因变量是一个数而不是矢量）上时，可以称其为梯度算符. 这里的 f 叫做势函数. 对于 N 维直角坐标系中的 N 元函数 $f(x_1, x_2 \dots x_N)$ ，其梯度是一个矢量函数

$$\nabla f = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} \hat{x}_i \quad (2)$$

其中所有的 \hat{x}_i 组成直角坐标系的正交归一基^[102]，现在来看全微分^[83]关系

$$df = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i \quad (3)$$

若定义微位移矢量为

$$dr = \sum_{i=1}^N dx_i \hat{x}_i \quad (4)$$

式 3 可用势函数的梯度和微位移矢量的点乘表示

$$df = \nabla f \cdot dr \quad (5)$$

由点乘的几何定义^[91]可知，从某点出发，若微位移 dr 的大小不变，那么当其方向与梯度方向相同时函数增量 df 最大；二者方向垂直时，函数增量为零；二者夹角为 θ 时，函数增量等于最大值乘以 $\cos \theta$. 所以梯度矢量的方向是函数 f 增加最快的方向，梯度的大小等于该方向的方向导数. 注意式 5 和式 1 的关系可以类比一元函数的导数^[28]和微分^[43]的关系，当函数可微时，二者等效.

现在我们也可以把全微分近似（“全微分^[83]”式 6）记为矢量的形式

$$\Delta f \approx \nabla f \cdot \Delta r \quad (6)$$

⁴这里假设 f 在某区域内处处光滑，即所有一阶偏导数处处连续. 这个性质也叫可微.

用梯度计算曲线（面）的法向量

先以 xy 平面的曲线为例，任意曲线可以用函数 $f(x, y)$ 的等值线来表示，即 $f(x, y) = C$ (C 为常数)。若从曲线上的某点出发，沿曲线的切线方向取一个微位移 $\mathrm{d}\mathbf{r} = \mathrm{d}x \hat{\mathbf{x}} + \mathrm{d}y \hat{\mathbf{y}}$ ，由于 $(x + \mathrm{d}x, y + \mathrm{d}y)$ 仍然在等值线上，函数增量 $\mathrm{d}f = 0$ 。代入式 5 得

$$\nabla f \cdot \mathrm{d}\mathbf{r} = 0 \quad (7)$$

即 $f(x, y)$ 的梯度与 $\mathrm{d}\mathbf{r}$ 垂直。所以 $\nabla f(x, y)$ 必定是 (x, y) 点所在等值线的法向量，且指向函数值 C 更大的等值线（因为函数值在梯度方向增加最快）。

极坐标、柱坐标和球坐标中的梯度算符

预备知识 极坐标系^[6]，柱坐标系^[7]，球坐标系^[8]

我们先写出极坐标中函数 $f(r, \theta)$ 的全微分为

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial r} \mathrm{d}r + \frac{\partial f}{\partial \theta} \mathrm{d}\theta \quad (8)$$

再写出极坐标中的微位移为

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = \mathrm{d}r \hat{\mathbf{r}} + r \mathrm{d}\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} \quad (9)$$

所以为了满足梯度的定义式 5，我们可以把式 8 第二项的 $\partial f / \partial \theta$ 除以 r ，第二个因子 $\mathrm{d}\theta$ 乘以 r ，分别作为梯度和微位移的两个分量。

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial r} \mathrm{d}r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} r \mathrm{d}\theta \quad (10)$$

对比式 5，式 9 和式 10 可以得出极坐标中的梯度算符为

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (11)$$

同理，柱坐标中的微位移与函数 $f(r, \theta, z)$ 的全微分可以分别表示为

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = \mathrm{d}r \hat{\mathbf{r}} + r \mathrm{d}\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} + \mathrm{d}z \hat{\mathbf{z}} \quad (12)$$

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial r} \mathrm{d}r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} r \mathrm{d}\theta + \frac{\partial f}{\partial z} \mathrm{d}z \quad (13)$$

所以柱坐标中的梯度算符为

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \quad (14)$$

再来看球坐标，球坐标中的微位移与 $f(r, \theta, \phi)$ 的全微分可以分别表示为

梯度定理

预备知识 线积分^[121], 牛顿-莱布尼兹公式^[60]

梯度定理: 一个标量函数的梯度延任何路径从起点 \mathbf{r}_i 到终点 \mathbf{r}_f (角标 i 表示 initial, f 表示 final) 线积分的结果等于该函数在末位置的函数值减去初位置的函数值. 可以用下式表示

$$\int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_f} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_f) - f(\mathbf{r}_i) \quad (15)$$

梯度定理可以看做是牛顿-莱布尼兹公式^[60]

$$\int_a^b f'(x) dx = f(b) - f(a) \quad (16)$$

的拓展, 即把一元函数拓展为多元函数, 把导函数拓展为梯度函数 (在一维情况下, 式 15 变为式 16). 所以前者的证明也可以类比后者的证明.

梯度定理的证明

我们先把式 8 路径分为许多首尾相接的小段曲线, 则整段曲线的线积分等于所有小曲线的线积分之和. 假设曲线处处光滑, 如果每段小曲线都足够短, 就可以把他们近似看做线段, 且梯度值在上面近似为常矢量. 令第 i 小段的起点和终点分别为 $\mathbf{r}_{i,0}, \mathbf{r}_{i,1}$, 则第 i 段的线积分可近似为

$$\int_{\mathbf{r}_{i,0}}^{\mathbf{r}_{i,1}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \approx \nabla f(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{r}_i \quad (17)$$

再利用全微分近似 (式 6), 上式等于

$$\int_{\mathbf{r}_{i,0}}^{\mathbf{r}_{i,1}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \approx f(\mathbf{r}_{i,1}) - f(\mathbf{r}_{i,0}) \quad (18)$$

将所有小段的线积分求和得到总的线积分得 (注意 $\mathbf{r}_{i,1} = \mathbf{r}_{i+1,0}$)

$$\begin{aligned} \int_C \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} &= \sum_{i=1}^n \int_{\mathbf{r}_{i,0}}^{\mathbf{r}_{i,1}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \\ &\approx \sum_{i=1}^n [f(\mathbf{r}_{i,1}) - f(\mathbf{r}_{i,0})] = f(\mathbf{r}_f) - f(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (19)$$

最后取极限 $n \rightarrow \infty$, 可使上式精确成立. 证毕.

由梯度求势函数

我们通常把上面的标量函数 $f(\mathbf{r})$ 叫做势函数，其地位相当于牛顿-莱布尼兹公式中的原函数。在这个类比中，既然“对原函数求导”对应“对势函数求梯度”，那么不定积分对应的“通过梯度函数求势函数”又该如何实现呢？

以二维的情况为例，我们可以先指定势函数在某点 $\mathbf{r}_0(x_0, y_0)$ 的值，然后根据式 8，要求势函数任意一点 $\mathbf{r}(x, y)$ 的值，只需从 \mathbf{r}_0 点出发由任意路径线积分到点 \mathbf{r} 即可得到势函数 $f(\mathbf{r})$ 。

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_0) + \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (20)$$

计算该线积分一般选取一种简单的路径：即先延从 $\mathbf{r}_0(x_0, y_0)$ 到 $\mathbf{r}_1(x, y_0)$ 的水平线段，再延从 $\mathbf{r}_1(x, y_0)$ 到 $\mathbf{r}(x, y)$ 的竖直线段（当然也可以取中间点为 (x_0, y) ）。若把 ∇f 的两个分量 $\partial f / \partial x, \partial f / \partial y$ 简写为 $f_x(x, y), f_y(x, y)$ ，分关于 x 和 y 的不定积分记为 $F_x(x, y), F_y(x, y)$ ，延两个线段的线积分^[121]（分别把 x 和 y 作为线积分的参数）分别为

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}_1} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{x_0}^x f_x(x, y_0) dx + 0 = F_x(x, y_0) - F_x(x_0, y_0) \quad (21)$$

$$\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{y_0}^y f_y(x, y) dy + 0 = F_y(x, y) - F_y(x, y_0) \quad (22)$$

代回式 20 得势函数为

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(x_0, y_0) + F_x(x, y_0) - F_x(x_0, y_0) + F_y(x, y) - F_y(x, y_0) \\ &= F_y(x, y) - F_y(x, y_0) + F_x(x, y_0) + C \end{aligned} \quad (23)$$

其中 C 为待定常数。

应用举例 势能^[161]

第五章

计算物理

计算物理导航

在当今时代，数值计算已经成为理科生不可或缺的技能。利用计算机程序计算理论模型，处理实验数据，绘制各种图表都是学习和研究中都扮演非常重要的角色。虽然一些简单的计算用计算器就可以完成，但许多时候我们需要数以万计的计算量，用计算器就显得不实际了。

计算机语言

计算机的指令等信息在其数字电路中是以二进制 0 和 1（对应低电压和高电压）传播的，然而这样的语言显然不适合人类阅读和编写。为了让计算机按照指定的规则进行运算，我们可以用某种计算机语言（由英文单词，符号和数字组成）写下代码，计算机会把这种代码转换为二进制指令进行相应的运算。

科学计算中，目前比较流行的高级语言有 Matlab, Python, Mathematica 等¹。这些语言除了可以进行传统的数值计算外，还有符号计算的功能，例如可以对解析表达式进行不定积分和求导等运算。一般来说，Mathematica 主要用于符号计算，Matlab 和 Python 主要用于数值计算。

本章的数值计算以讲解算法（Algorithm）为主，例程使用 Matlab 代码，且尽量使用简单的语法，这样即使读者使用的编程语言不是 Matlab，也能轻易地改写出相应的代码。本章使用的所有 Matlab 语法都会在词条“Matlab 语法基础”中介绍，不要求读者有任何编程基础。Matlab 软件的使用见

本章的符号计算使用 Mathematica 软件和 Wolfram Alpha 网站²。见“Mathematica 基础”。符号计算主要用于计算解析问题（如复杂的不定积分）或者获得高精度的数值结果（例如计算 π 的一万位）。其使用频率远没有数值计算多。

¹ 高级语言可以理解为自动化程度较高的语言，优点是编程和调试等较简单，易学易用，缺点是效率较低。比上述语言更低级的语言有 Fortran, C++, C 等，更适合做高性能数值计算。一些大计算量的物理问题可能运行一次需要数小时乃至数星期的时间，这时运行效率是首要考虑因素，而编程和调试的难度反而相对次要。

² Wolfram Alpha 相当于 Mathematica 的简单网页版，优势在于无需安装软件，用有网络浏览器的设备（包括手机和平板）可随时访问。网址为 <https://www.wolframalpha.com/>

微分方程数值解

微分方程在物理中无处不在，力学中最基本的牛顿第二定律就是一个常微分方程。虽然我们都希望能得到方程的精确解析解，然而往往只有最简单的问题才存在。对于没有精确解析解的问题，我们要么加入一些近似条件得到近似的解析解，要么求助于数值计算，也可以是二者结合³。本章中我们会学习如何计算常微分方程（组）的数值解。先用一阶微分近似的方法介绍一般的思路，再介绍更精确的高斯法和四阶龙格-库塔法。

³对于一些复杂的问题（尤其在量子力学中）有时即使用数值计算也不能在合理的时间内解出微分方程，这时就要先使用近似化简问题。

Matlab 编程基础

Matlab (Matrix Laboratory) 的中文名叫矩阵实验室，是一款著名的科学计算软件，也指这个软件中使用的编程语言。这里仅介绍最基本的 Matlab 功能和语法，且仅介绍本书使用到的功能。如果只需要了解本书的算法而不想使用 Matlab，可略过界面相关的介绍。

界面介绍

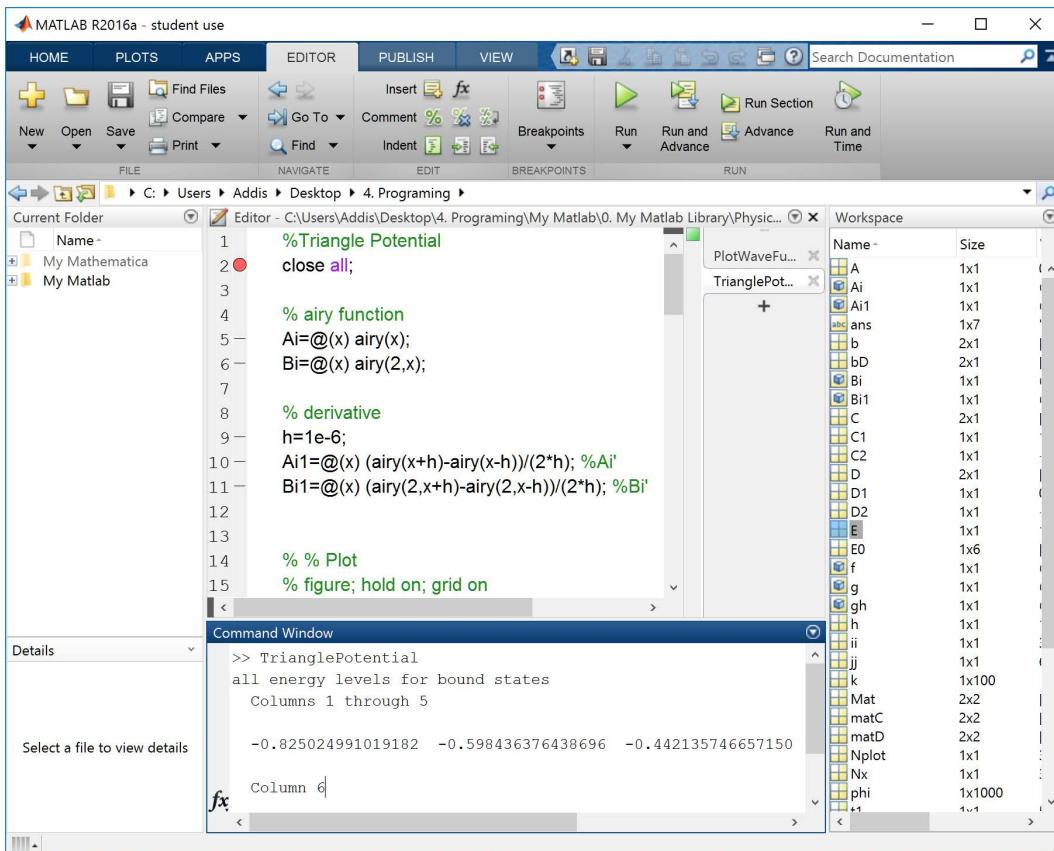


图 1: Matlab 的 IDE 界面

Matlab 的编程界面（图 1）属于集成开发环境（IDE/Integrated Development Environment），简而言之就是一切与 Matlab 编程有关的工作都可以在该界面

完成⁴. 以下介绍界面中常用的窗口. 要选择显示的窗口, 可在 Home 菜单中点击 Layout 按钮, 并在 Show 下面勾选需要的窗口.

Editor 用于编辑代码, 同时具有自动检测语法错误, 代码调试等功能. Matlab 的代码文件分为脚本文件和函数文件两种形式, 后缀名都为 m, 用图 1 中 Editor 菜单栏的 Save 按钮可保存代码文件. Matlab 作为一种解释语言 (**Interpreted Language**) 可以直接在 Editor 中运行源代码, 无需传统的编译过程. 为了让 Matlab 能运行代码文件, 需要把文件所在的目录⁵添加到 Matlab 的搜索路径下.

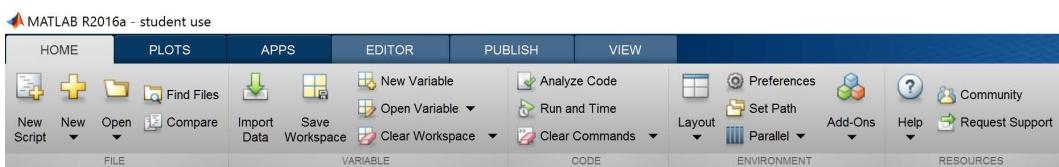


图 2: Home 菜单

如图 2, Home 菜单中的 Set Path 按钮可以设置 Matlab 的搜索路径. 点开后用 Add Folder 按钮可以添加单个文件夹 (不包含子文件夹), 用 Add with Subfolders 添加文件夹 (包含子文件夹). 用 Remove 删除已添加的路径, 用 Default 还原初始设置, 用 Save 保存修改, 用 Close 关闭窗口. 若要运行程序, 回到 Editor 菜单点击 Run 按钮即可.

Command Window 主要用于输入临时指令或者调试程序, 可输入除了函数定义外的任意指令. Command Window 只能按输入顺序执行, 不方便修改和编辑, 如果指令较长或有多个指令, 应该使用 Editor. 在 Command Window 中按回车执行输入的指令, 按上箭头可重复已输入的指令.

Workspace 用于查看 Matlab 当前的所有变量的列表. Matlab 的所有变量都可以理解为矩阵, 单个值可理解为 1×1 的矩阵. 列表中 Name 是变量名, Size 是矩阵维度, Value 是变量值, 右上角的下拉菜单中的 Choose Columns 中还可设置显示更多属性, 例如 Bytes 是占用字节数, Class 是变量类型, Min 是最小值, Max 是最大值, Mean 是平均值, Median 是中位数, Std 是标准差等. 双击 Workspace 中的变量可显示变量值.

⁴界面语言默认与操作系统语言相同, 本书使用英文界面.

⁵在英文界面下 Matlab 不能识别中文目录, 建议用英文命名文件夹.

计算器

下面我们仅用 Command Window 来熟悉 Matlab 的基本语法. 我们先看如何把 Matlab 当做普通的科学计算器使用.

```
>> 1.2/3.4 + (5.6+7.8)*9 -1
ans = 119.9529
>> 1/exp(1)
ans = 0.3679
>> exp(-1i*pi)+1
ans = 0
```

常用的运算符号有

+, -, *, /, ^ (指数)

常用的数学函数有

`sqrt` (开方), `exp`, `sin`, `cos`, `tan`, `cot`, `asin`, `acos`, `atan`, `acot`, `real` (实部), `imag` (虚部), `conj` (共轭)

等 (三角函数前面加 `a` 代表其反函数). 运算的优先顺序与数学上的习惯一样. 注意这些函数的自变量都可以是复数. 为了区分虚数单位 `i` 和变量 `i`, 好习惯是在 `i` 前面加数字 (上面的第三条命令).

`mod(N,n)` 是求余运算, 计算 `N` 被 `n` 整除后的余数. 注意这个函数有两个变量, 用逗号隔开. 要注意在 Matlab 中, 这种有输入和输出的命令都是广义的 **函数 (function)**, 不仅是数学函数.

用大写 `E` 或小写 `e` 表示科学计数法 (不允许有空格), 如 2.997×10^8 表示为 `2.997e8` 或 `2.997e+8`. 用小写 `pi` 表示圆周率, 用 `exp(1)` 表示自然对数底, 用 `1+2i` 或 `1+2j` 等表示复数, 注意 `i` 和 `j` 前面不能有空格.

如果需要多位小数, 可使用 `format long` 命令使结果显示为双精度 (约 16 位有效数字), 用 `format short` 命令恢复默认格式.

```
>> format long; pi
ans = 3.141592653589793
>> exp(1)
ans = 2.718281828459046
```

变量与矩阵

变量 (variable) 可用于传递数据. 变量名可以用含有多个字母, 数字和下划线, 注意变量名区分大小写, 且首字符只能是字母. 用等号对变量赋值, 变量必须在等号左边, 等号右边的运算结果会储存在变量中, 直到再次被赋值.

```
>> a = 1.2/3.4 + (5.6+7.8)*9 -1
a = 119.9529
>> b = atan(a + 1)
b = 1.5625
```

如果新的变量第一次被赋值, 它会自动出现在 Workspace 窗口中. 注意 Workspace 中的一个特殊的变量 `ans`, 如果命令的输出结果没有赋值给变量, 就会自动赋值给 `ans`. 注意一般不要对 `ans` 赋值.

另外, 如果在命令后面加分号 (semicolon) “ ; ”, 则命令执行后不输出结果. 也可以用分号把多个命令写到一行. 在以后用 Editor 编写程序时, 每个命令后面都需要加分号, 用 `display` 函数在 Command Window 显示结果.

```
>> 1 + 1; a = ans^2
a = 4
```

用 `clear` 命令清空 Workspace 中的所有变量, 用 `clear <var1>,<var2> ...` 清除指定的变量 (`<var1>`, `<var2>` 是变量名). 用 `clc` 清空 Command Window (上箭头仍然可以查看历史命令).

本书只涉及到 3 种变量类型 (**class**) : 双精度 (**double**), 字符 (**char**) 和逻辑 (**logical**).

双精度变量用于储存数值, 有效数字约为 16 位 (如果是复数, 实部和虚部各 16 位), 取值范围约为 10^{-308} 到 10^{308} . 如无变量类型声明, 所有命令中出现的常数及储存数值的变量都为 `double`.

Matlab 中的所有变量都可以理解为矩阵, 单值变量 (标量, `scalar`) 可以理解为 1×1 的矩阵, 只有一行或一列的矩阵叫做行矩阵 (**row vector**) 和列矩阵 (**column vector**). 一些简单的矩阵操作如下

```
>> a = [1,2,3]
a = 1 2 3
```

用方括号创建矩阵，用逗号分隔每行的矩阵元，行矢量中逗号可省略

```
>> a = [1 2 3]
a = 1 2 3
```

用分号分隔行

```
>> b = [1;2;3]
b =
1
2
3
>> c = [1 2 3; 2 3 4; 3 4 5]
c =
1 2 3
2 3 4
3 4 5
```

方括号还可以用来合并矩阵（注意矩阵尺寸必须合适）

```
>> d = [a;a]
d =
1 2 3
1 2 3
>> e = [a a]
e =
1 2 3 1 2 3
```

用 size 函数获取矩阵尺寸，用 numel 函数获取矩阵元个数

```
>> size(d)
ans = 2 3
>> size(d,1)
ans = 2
>> numel(d)
ans = 6
```

用 zeros 函数生成全零矩阵

```
>> zeros(2,3)
```

```
ans =
0 0 0
0 0 0
```

用 zeros([2,3]) 和 zeros(size(d)) 结果也相同. 用 ones 可以生成全 1 矩阵, 也可以乘以任意常数

```
>> ones(2,3)*5
ans =
5 5 5
5 5 5
```

用 eye(N) 生成 $N \times N$ 的单位矩阵, 用 rand(M,N) 生成随机矩阵, 矩阵元从 0 到 1 均匀分布. 用 M:step:N 生成等差数列 (行矢量), 例如

```
>> 1:2:10
ans = 1 3 5 7 9
>> 0:pi/3:pi*2
ans = 0 1.0472 2.0944 3.1416 4.1888 5.2360 6.2832
>> 10:-2:1
ans = 10 8 6 4 2
```

用 linspace(x1,x2,Nx) 生成指定首项尾项和项数的等差数列 (行矢量)

```
>> linspace(0,pi,4)
ans = 0 1.0472 1.2566 2.0944 3.1416
```

下面介绍矩阵运算. 同规格的尺寸可以进行 + 和 - 运算, 矩阵和标量也可以; 矩阵乘法 * 既可以把常数与矩阵相乘, 也可以进行数学上的矩阵乘法; 矩阵的幂 “^” 相当于矩阵与自己多次相乘; “/” 可以把矩阵除以一个常数.

```
>> a = [1 2; 3 4]; b = [1 -1; 2 -2];
>> a + b
ans =
2 1
5 2
>> a * b
ans =
5 -5
11 -11
```

若要两个尺寸相同, 可进行逐个元素运算, 如

```
>> a .* b
ans =
    1   -2
    6   -8
>> a.^2
ans =
    1   4
    9   16
>> a ./ b
ans =
    1.0000  -2.0000
    1.5000  -2.0000
```

单引号“'”可以使实数矩阵转置，或使复矩阵取厄米共轭。若需要对复矩阵转置，用“.'”即可。

```
>> c = a + 1i*b
c =
    1.0000 + 1.0000i  2.0000 - 1.0000i
    3.0000 + 2.0000i  4.0000 - 2.0000i
>> c'
ans =
    1.0000 - 1.0000i  3.0000 - 2.0000i
    2.0000 + 1.0000i  4.0000 + 2.0000i
>> c.'
ans =
    1.0000 + 1.0000i  3.0000 + 2.0000i
    2.0000 - 1.0000i  4.0000 - 2.0000i
```

Matlab自带的数学函数一般支持矩阵自变量，结果是该函数对每个矩阵元分别运算

```
>> cos(0:pi/4:pi)
ans =
    1.0000  0.7071  0.0000  -0.7071  -1.0000
```

用矢量运算可以使代码简短易懂，且提高计算效率。

字符串型变量一般用于控制行输出结果或对生成的图片进行标注。把N个字符放在一对单引号内，可生成 $1 \times N$ 的字符类型数组。

```
>> str1 = '这是一个字符串'; str2 = 'this is a string'
>> [str1, ',', str2]
ans =
    这是一个字符串, this is a string
>> numel(str)
ans = 24
```

把双精度变类型变为字符串用 `num2str` 函数（注意“2”的读音与“to”相同，“num”代表“number”，“str”代表字符串“string”），通常用于与其他字符串矩阵合并，如

```
>> number = 3; str = ['The number is ', num2str(number), '.']
str =
    The number is 3.
```

若要在字符串中加入英文单引号，可用两个英文单引号表示。

逻辑变量只能具有 0 或 1 两个值，分别代表假（`false`）和真（`true`）。最常用的地方是判断语句 `if` 的后面以及获取矩阵元。逻辑算符有

`>`, `>=` (大于等于), `<`, `<=`, `==` (等于)

可用于比较双精度数组，返回逻辑型数组

```
>> L = 1 + 1 > 3
L = 0
```

逻辑“与”，“或”，“非”算符分别为（仅用于逻辑标量）`&&`, `||`, `~`。例如

```
>> 1 > 0 && 2 > 1
ans = 1
>> 1 > 0 || 2 < 1
ans = 1 >> (1 > 0)
```

只有两边都为真时，与运算才能为真。至少有一边为真，或运算就为真。非运算把真假互换，注意必须要加括号。

矩阵索引用于表示矩阵部分矩阵元，例如

```
>> a = [1 2 3; 4 5 6; 7 8 9];
ans =
    1 2 3
```

```

4 5 6
7 8 9
>> a(1,2)
ans = 2
>> a(2:3,1)
ans =
4
7
>> a(2:3,1:2)
ans =
4 5
7 8
>> a([2,3],[1,2])
ans =
4 5
7 8
>> a(:,2)
ans =
2
5
8
>> a(1:end-1,2:3)
ans =
2 3
5 6

```

其中 `end` 表示某维度的最大索引（仅在索引中有效）。以上的格式可以归结为“在小括号中用逗号把行矢量隔开”。注意索引不仅可以用来取值，还可以放在等号左边赋值。

```

>> b = a; b(1:3) = a(2:4)
b =
4 2 3
7 5 6
2 8 9

```

要求左边的矩阵元个数等于右边。唯一的例外是当右边为标量

```
b(1:3) = 0
```

```
b =  
0 2 3  
0 5 6  
0 8 9
```

我们还可以用单个索引

```
>> a(2:5)  
ans = 4 7 2 5  
>> a(7:end)  
ans = 3 6 9
```

注意单个索引的顺序是先增加第一个维度（行标），再增加第二个维度（列标）。

我们还可以用相同大小逻辑数组索引

```
>> mark = logical([1 0 0; 0 0 1; 1 0 0]); a(mark)  
ans =  
1  
7  
6
```

逻辑索引常见的例子如

```
>> a(a-3 <= 1)  
ans =  
1  
4  
2  
3
```

注意逻辑索引中不能使用双精度类型代替逻辑类型。

脚本文件

在讲解更复杂的程序结构前，我们先来看脚本文件。脚本（script）文件是包含若干个指令的文件，文件后缀名为 m。脚本文件可以单独执行，也在其他文件或 Command Window 中被调用（记得设置搜索路径）。后者相当于把被调用脚本的代码直接插入到调用指令处，调用指令就是脚本文件的文件名。脚本中的每条命令后面应该加分号以隐藏输出结果，若需要输出，用 disp 函数。

该函数的自变量可以是字符串或矩阵.

在脚本文件中，可以在行首或命令后用百分号 % 进行注释（comment）. 注释是程序的说明，使程序更易读，在执行程序时会被忽略（图 1）.

```
>> disp('good'); a = 3; disp(['a = ',num2str(a)])  
good  
a = 3
```

注意即使使用了分号，disp 仍然会显示结果.

判断结构

现在来看一段代码（脚本文件）

```
1 a = rand(1,1); b = 0.5;  
2 if a > b  
3     disp('a is larger');  
4 else  
5     disp('b is larger');  
6 end
```

不难猜测出这里的 if 用于判断，如果条件满足，则只执行 if 和 else 之间的指令。如果条件不满足，则只执行 else 到 end 的指令。以上程序随机生成从 0 到 1 的数，如果随机数大则输出第一段文字，否则输出第二段文字。

循环结构

用 for 表示循环

```
1 for ii = 1:3  
2     disp(['ii^2 = ' num2str(ii^2)]);  
3 end
```

运行结果为

```
ii^2 = 1  
ii^2 = 4  
ii^2 = 9
```

容易看出这段代码被执行了 3 次，循环变量 `ii` 按顺序取 `1:3` 中的一个矩阵元。注意选取 `ii` 作为变量名是为了与虚数单位区分，也可以选择其他变量名。再来看一个稍复杂的循环

```
1 Nx = 5;
2 x = zeros(1, Nx);
3 x(1) = 2;
4 for ii = 2:numel(x)
5     x(ii) = x(ii-1)^2;
6 end
7 disp(['x = ' num2str(x)])
```

在循环开始前 `x(1)` 被赋值为 2，在循环中，第 `ii` 个矩阵元依次被赋值为第 `ii-1` 个矩阵元的平方。运行结果为

```
x = 2 4 16 256 65536
```

注意在循环前用 `zero` 对矩阵进行了预赋值（**preallocation**）。预赋值不是必须的，但如果不行预赋值，每次循环矩阵的尺寸都要改变，会导致程序运行变慢。另外注意循环中不允许给循环变量赋值。

函数文件

我们已经学了一些函数，现在来看如何自定义函数。自定义函数需要一个单独的**函数文件**。的第一个命令必须是 `function`，用于定义主函数。文件名必须与主函数同名。文件中其他函数都是子函数。主函数可以调用子函数，子函数可以调用同文件中的其他子函数，但不能调用主函数，主函数和子函数都可以调用 Matlab 的内部函数或搜索路径下其他函数文件中的主函数。若函数文件在搜索路径下，其他 `m` 文件或 Command Window 中可以直接调用它的主函数。注意函数文件中的子函数不能从文件外被调用。函数的 `workspace` 是独立的，即<定义函数的指令>在执行的过程中，不能获取除<变量>外的变量，除非定义了全局变量（见 `global`）。注意函数只能通过函数文件定义，不能在脚本或控制行中定义。

函数句柄 (function handle)

函数句柄是一种特殊的变量类型，可用于定义一个临时的函数，也可传递到其他函数中。首先，对于已经存在的函数（包括函数文件定义的），可直接在函数名前面加 @ 生成函数句柄

```
>> f = @sin
>> f(pi/2)
ans = 1;
```

若函数由若干个运算组合而成，或包含若干其他变量，要在 @ 后面指定函数句柄的变量

```
>> A = 3; w = 5; phi = pi/2;
>> f = @(x) A*sin(w*x+phi) + (2*x./pi).^2;
>> f([0,pi/2])
ans =
    3.0000  1.0000;
f = @(x,phi) A*sin(w*x+phi) + (2*x./pi).^2;
>> f([0,pi/2],pi/2)
ans =
    3.0000  1.0000;
```

注意这里用了逐个元素算符，使函数支持矩阵输入。

自定义函数 (function)

格式为

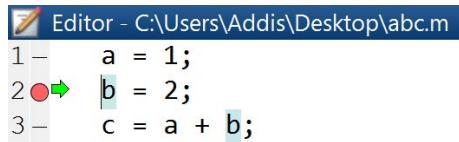
```
[<输出 1>,<输出 2>,...] = function <函数名>(<变量 1>,<变量 2>...)
<定义函数的指令>
end
```

其中 < 函数名 > 是字母，数字和下划线的组合，例如 MyFun_123，第一个字符不能是数字或下划线。若函数无变量，则小括号可省略。若函数无输出，则等号及方括号可省略。

函数的调用格式为

```
[<输出 1>,<输出 2>,...] = <函数名>(<变量 1>,<变量 2>...)
```

程序调试



The screenshot shows a MATLAB editor window titled "Editor - C:\Users\Addis\Desktop\abc.m". The code contains three lines:

```
1 - a = 1;
2 - b = 2;
3 - c = a + b;
```

Line 2 has a red circular breakpoint icon on its left margin. The variable "b" is highlighted in blue.

图 3: 在行首设置 Breakpoint

若要调试程序，可选择一行代码并单击该行前面的横线，这时会出现红色圆点 Breakpoint（图 3），程序运行到 Breakpoint 会暂停。

此时要查看变量情况，可通过 Workspace 查看各个变量的情况，也可用光标悬停在某个变量上。还可以用 Command Window 改变某些变量的值，或画图等。在这种调试状态下，也可以通过 Edit 菜单中的一些按钮控制接下来程序如何运行（图 4）。其中“Continue”（快捷键 F5）是继续运行直到下一个

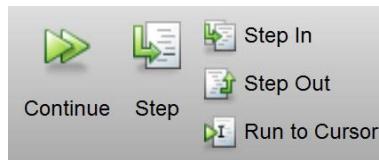
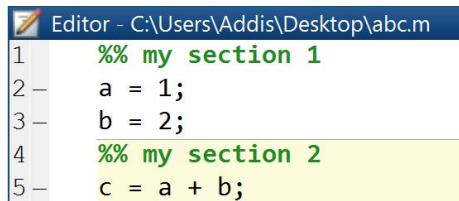


图 4: Step 菜单

Breakpoint 或结束。“Step”（F10）是运行到下一行，“Step In”（F11）是进入子程序并暂停，“Step Out”是运行完当前子程序并回到子程序被调用的地方。“Run to Cursor”是运行到光标所在处。

分节

在行首用两个百分号 “%%” 可以对代码进行分节（图 5）。这样做一是可以使代码结构更清晰，二是可以单独选择某一节运行（Edit 菜单中的“Run Section”按钮）。



```
Editor - C:\Users\Addis\Desktop\abc.m
1  %% my section 1
2 - a = 1;
3 - b = 2;
4  %% my section 2
5 - c = a + b;
```

图 5: 代码分节

工具箱 (Toolbox)

在购买和安装 Matlab 软件时, 可以选择各种各样的工具箱, 常用的工具箱有曲线拟合 (Curve Fitting, 从离散的数据点得到一条曲线), 图像处理 (Image Processing, 图像变换, 增强, 降噪, 二值化等), 图像获取 (Image Acquisition, 从相机获取图像), Matlab 编译器 (MATLAB Compiler, 编译代码, 提高运行速度). 注意使用了工具箱功能的代码在没有工具箱的 Matlab 软件上将无法运行.

Matlab Online

具有 Matlab 的基本功能, 和类似于软件的界面, 需要购买了正版 Matlab 的 Matlab 账号登录 (学生账号也可以). 若账号购买了工具箱 (Toolbox), 也可以使用对应的工具箱. 本书官网提供免费的 Matlab 账号供读者试用和体验 Matlab Online, 网址见本书封面或前言.

弹簧振子受迫运动的简单数值计算

预备知识 弹簧振子的受迫运动^[??], 微分近似^[43], Matlab 编程基础^[130]

以下以弹簧振子的受迫运动为例, 介绍一种解 n 阶微分方程的简单方法, 以便了解数值解微分方程的基本思想. 但是这种方法误差较大, 需要大量计算才能获得较精确的数值解. 在实际运用中已有更复杂更成熟的算法 (参考 MATLAB 常微分方程 (组) 数值解简介^[??]) .

在弹簧振子受迫运动^[??] 中, 列出的二阶微分方程为

$$m\ddot{y} = \alpha\dot{y} - ky + f(t) \quad (1)$$

若已知初值条件 (可代入任意具体数值) $\dot{y}(0) = v_0$, $y(0) = y_0$, 且已知驱动力 $f(t)$, 此时可以把初值条件代入式 1 求出 $t = 0$ 时的加速度.

$$\ddot{y}(0) = [-\alpha\dot{y}(0) - ky(0) + f(0)]/m \quad (2)$$

接下来的一小段微小的时间 Δt 内 (Δt 称为步长, 步长越小误差越小), 根据微分近似, 可以算出 $t = \Delta t$ 时刻的状态.

$$y(\Delta t) = y(0) + \Delta y \approx y(0) + \dot{y}(0)\Delta t \quad (3)$$

$$\dot{y}(\Delta t) = \dot{y}(0) + \Delta \dot{y} \approx \dot{y}(0) + \ddot{y}(0)\Delta t \quad (4)$$

微分近似在这里的物理意义是在 Δt 内速度和加速度都近似为常数. 把 $y(\Delta t)$ 和 $\dot{y}(\Delta t)$ 再次代入式 1

$$\ddot{y}(\Delta t) = [-\alpha\dot{y}(\Delta t) - ky(\Delta t) + f(\Delta t)]/m \quad (5)$$

再次使用微分近似有

$$y(2\Delta t) = y(\Delta t) + \Delta y \approx y(\Delta t) + \dot{y}(\Delta t)\Delta t \quad (6)$$

$$\dot{y}(2\Delta t) = \dot{y}(\Delta t) + \Delta \dot{y} \approx \dot{y}(\Delta t) + \ddot{y}(\Delta t)\Delta t \quad (7)$$

重复以上各步骤, 就可以继续得到 $y(3\Delta t)$, $y(4\Delta t)$ 等的近似值. 在 $y-t$ 图中把这些散点连接起来, 就得到了 $y(t)$ 的函数图.

例程 SHOFN.m

```
1 % ===== 设置参数 =====
2 m = 0.1; % 质量
3 k = 1; % 劲度系数
4 a = 0.03; % 阻尼系数
5 T = 20; % 停止时间
6 Nstep = 10000; % 步数
7 A = 2; w = 3; % f(t)=A*sin(w*t);
8 % =====
9
10 dt = T/Nstep; % 计算步长
11 y2 = zeros(step,1); y1 = y2; y = y2; % 矩阵预赋值
12 y(1) = 0; y1(1) = 0; % 初值, y1 是 y 的一阶导数
13
14 % ===== 迭代循环 =====
15 for ii = 2:step
16     y2(ii) = (-a*y1(ii)-k*y(ii)+2*sin(w*(ii*dt)))/m; %
17         % 代入微分方程求出 y''.
18     y(ii) = y(ii-1) + y1(ii-1)*dt; % y 的微分近似
19     y1(ii) = y1(ii-1) + y2(ii-1)*dt; % y' 的微分近似
20 end
21
22 % ===== 画图 =====
23 t=(0:step-1)*dt;
plot(t,y);
```

运行结果如图 1，可见开始时驱动力不断给弹簧振子补充能量，振幅变大。当补充的功率等于消耗的功率时，弹簧做稳定振动。

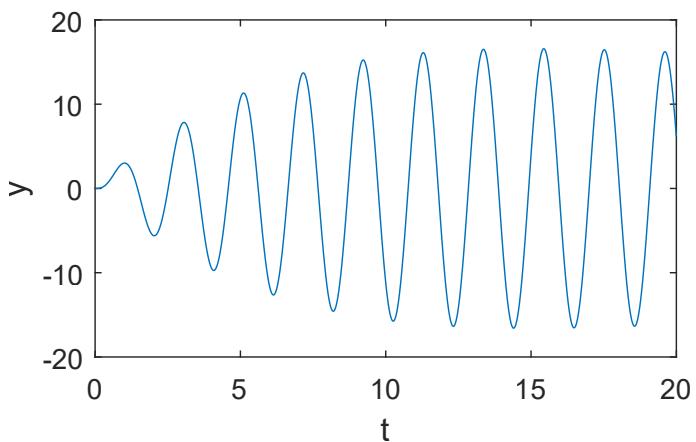


图 1: 运行结果

第二部分

力学

第一章

质点

位置矢量 位移

预备知识 矢量

位置矢量（位矢）就是从坐标原点指向某一点的矢量，通常记为 \mathbf{r} . 当定义了一个坐标系，那么坐标系中一点的位置就可以用位矢表示.

有时候表示一个关于位置的函数，通常将位矢 \mathbf{r} 作为自变量. 例如一个物体内密度关于位置的分布可以表示为 $\rho(\mathbf{r})$. 在直角坐标系中，就相当于 $\rho(x, y, z)$ ，在球坐标系中就相当于 $\rho(r, \theta, \phi)$ 这么做的好处是书写简洁，而且不需要指定坐标系的种类.

在物体运动过程中，可以把物体的位矢看做时间的矢量函数 $\mathbf{r}(t)$ ，则位移 $\Delta\mathbf{r}$ 是一段时间 $[t_1, t_2]$ 内物体初末位矢的矢量差

$$\Delta\mathbf{r} = \mathbf{r}(t_2) - \mathbf{r}(t_1) \quad (1)$$

注意位移只与一段时间内物体的初末位置有关，与路径无关.

预备知识 全微分^[83]，矢量的微分

例 1 证明 $dR = \hat{\mathbf{R}} \cdot d\mathbf{R}$

这个证明的几何意义是，位矢模长的微小变化等于位矢的微小变化在位矢正方向的投影.

这里以平面直角坐标系中的位矢为例证明. 令位矢 \mathbf{R} 的坐标为 (x, y) ，模长为 $R = \sqrt{x^2 + y^2}$ ，模长的全微分为

$$dR = \frac{\partial R}{\partial x} dx + \frac{\partial R}{\partial y} dy = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} dx + \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} dy \quad (2)$$

考虑到 $x/\sqrt{x^2 + y^2}$ 和 $y/\sqrt{x^2 + y^2}$ 分别为 $\hat{\mathbf{R}} = \mathbf{R}/R$ 的两个分量， dx 和 dy 分别为 $d\mathbf{R}$ 的两个分量，根据点乘的定义^[91] 上式变为

$$dR = \hat{\mathbf{R}} \cdot d\mathbf{R} \quad (3)$$

拓展阅读 速度和加速度（矢量）[\[153\]](#)

速度 加速度（一维）

预备知识 位移[\[150\]](#)，基本初等函数的导数[\[36\]](#)，复合函数求导[\[44\]](#)，牛顿—莱布尼兹公式[\[60\]](#)

速度和加速度都是矢量，但如果我们考虑质点的一维运动（沿直线运动），那么我们可以指定一个正方向并沿运动方向建立坐标轴。这样一来，我们就可以把一维情况下的位移、速度、加速度这些矢量用一个带正负号的标量来表示，正号代表指向正方向，负号代表指向负方向，标量的绝对值就等于矢量的模长。所以下我们用坐标 x 来表示一维位移，实数 v 和 a 来表示一维速度和加速度。

物理学中，速度和加速度通常指瞬时值。在一维运动中，瞬时速度的定义为一段极短时间 Δt 内质点的位移[\[150\]](#) Δx 除以这段时间，瞬时加速度的定义为一段极短时间 Δt 内质点的速度变化 Δv 除以这段时间，而这些恰好是导数[\[28\]](#) 的定义。用极限符号和导数来表示，就是

$$v(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} = \frac{dx(t)}{dt} \quad (1)$$

$$a(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t} = \frac{dv(t)}{dt} \quad (2)$$

根据高阶导数的定义，加速度就是位矢的二阶导数

$$a(t) = \frac{d^2x(t)}{dt^2} \quad (3)$$

例 1 匀加速运动

已知匀加速运动的位移为 $x(t) = x_0 + v_0 t + at^2/2$ ，注意到这是一个幂函数，求导得到速度为 $v(t) = v_0 + at$ ，再次求导（二阶导数）得到加速度为 $a(t) = a$ 。可见这是一个匀加速运动。

例 2 简谐振动

已知简谐振动的位移函数为 $x(t) = A \cos(\omega t)$, 运用复合函数求导得速度为 $v(t) = -A\omega \sin(\omega t)$, 加速度为 $a(t) = -A\omega^2 \cos(\omega t)$.

由速度或加速度求位移

既然一维速度是位置的导数 (即 $x(t)$ 是速度的原函数) 由牛顿-莱布尼兹公式得速度在一段时间的定积分等于初末位置之差, 即

$$x(t_2) - x(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} v(t) dt \quad (4)$$

所以若已知某时刻质点的位置 $x(t_0) = x_0$, 和速度函数 $v(t)$, 就可以求得任意时刻的位置 (为了区分积分变量和积分上限, 我们把积分变量改成 t')

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t v(t') dt' \quad (5)$$

例 3 匀速直线运动

若一维运动的质点速度始终为 v_0 , 由式 5 得

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t v_0 dt = x_0 + v_0 t \quad (6)$$

与式 4 和式 5 同理, 一维速度和加速度之间也有类似关系

$$v(t_2) - v(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} a(t) dt \quad (7)$$

$$v(t) = v_0 + \int_{t_0}^t a(t') dt' \quad (8)$$

例 4 匀加速直线运动

若质点在 t_0 时的位置为 x_0 , 速度为 v_0 , 且加速度始终等于常数 a_0 , 求任意时刻的速度和加速度 $x(t)$.

我们首先由式 8 得到速度函数为

$$v(t) = v_0 + \int_{t_0}^t a_0 dt' = v_0 + a_0 t \quad (9)$$

然后再次积分得到位置函数

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t (v_0 + a_0 t') dt' = x_0 + v_0 t + a_0 t^2 / 2 \quad (10)$$

速度 加速度

预备知识 位置矢量^[150], 速度 加速度（一维）^[151], 矢量的导数^[113], 矢量积分

在大学物理中, “位移”, “速度” 和 “加速度” 都是矢量, 既包括了大小, 也包括方向. 如果没有特殊说明, 他们一般是指“瞬时速度” 和 “瞬时加速度”.

速度的定义

考察一个质点在运动过程中在某时刻经过某一点的速度, 就取质点在这一点附近的一小段位移 $\Delta \mathbf{r}$, 以及物体完成这段位移需要的时间 Δt . 那么当 Δt 无穷小时, 若 $\Delta \mathbf{r}/\Delta t$ 存在极限, 则这个极限就是速度矢量 \mathbf{v} . 写成极限的形式, 就是

$$\mathbf{v} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{r}}{\Delta t} \quad (1)$$

速度与位矢的关系

质点在运动时, 其位矢 \mathbf{r} 是时间 t 的函数, 质点在 t_1 时刻的位矢为 $\mathbf{r}(t_1)$, 经过时间 Δt , 位矢为 $\mathbf{r}(t_1 + \Delta t)$, 所以物体在 Δt 时间内的位移为

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{r}(t_1 + \Delta t) - \mathbf{r}(t_1) \quad (2)$$

式 2 代入式 1, 得

$$\mathbf{v}(t_1) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{r}(t_1 + \Delta t) - \mathbf{r}(t_1)}{\Delta t} \quad (3)$$

根据矢量求导^[113] 的定义, 这就是位矢对时间的导数, 即

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad (4)$$

应用举例 匀速圆周运动的速度（求导法）^[155]

加速度的定义

通常情况下，质点运动轨迹上的每一点都会对应一个确定的速度矢量¹，类比速度的定义，加速的定义为

$$\mathbf{a}(t_1) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{v}(t_1 + \Delta t) - \mathbf{v}(t_1)}{\Delta t} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (5)$$

结合速度的定义，加速度为

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \right) = \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \quad (6)$$

所以，加速度是速度对时间的导数，或者位矢对时间的二阶导数。

应用举例 匀速圆周运动的速加速度（求导法^[28]）

由速度或加速度计算位矢

如果已知速度关于时间的函数 $\mathbf{v}(t)$ ，以及初始时间 t_0 和位置 \mathbf{r}_0 ，该如何得到位移一时间函数 $\mathbf{r}(t)$ 呢？类比一维的情况^[151]，我们也可以通过矢量函数的定积分^[??]（见^{??}）来求出速度一时间函数进而求出位移一时间函数

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \int_{t_0}^t \mathbf{a}(t) dt \quad (7)$$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \int_{t_0}^t \mathbf{v}(t) dt \quad (8)$$

应用举例 匀加速运动^[??]

匀速圆周运动的速度（几何法）

¹注意上面的速度在定义时虽然取了两点，但是取极限以后，速度和位置是一一对应的，也就和时间一一对应，而不是两个位置和时间对应一个速度。

预备知识 小角正弦值极限^[24], 速度的定义^[153]

设一个点 A 做半径为 R 的圆周运动, 恒定的角速度为 ω , 那么经过一段微小时间 Δt 以后, 点 A 转过的角度为 $\Delta\theta = \omega\Delta t$. 粗略地说, 当 ω 不算太大时, $\Delta\theta$ 也是一个微小量. 这样, 根据小角正弦值极限^[24], 当 Δt 趋近于 0 时, 物体在 Δt 内走过的位移长度(线段的长度)趋近于弧的长度, 即 $|\Delta s|$ 趋近于 $R\omega\Delta t$.

根据速度的定义

$$\mathbf{v} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{s}}{\Delta t} \quad (1)$$

速度的大小为

$$v = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\Delta s|}{\Delta t} = \frac{R\omega\Delta t}{\Delta t} = R\omega \quad (2)$$

速度的方向显然与过 A 点的圆的切线重合.

匀速圆周运动的速度 (求导法)

预备知识 矢量的导数^[113]

如图, 在平面直角坐标系(单位矢量分别为 \hat{x} , \hat{y})中, 令一个绕原点做逆时针匀速圆周运动的质点的位矢为 \mathbf{r} , 圆周运动的半径为 R , 角速度为 ω (逆时针为正). $t = 0$ 时刻与 x 轴夹角为 0. 那么任意时刻将位矢 \mathbf{r} 沿着 x 与 y 轴方向分解, 则

$$\mathbf{r} = R(\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t) \quad (1)$$

其中 \hat{x} 是 x 轴正方向的单位矢量, \hat{y} 是 y 轴正方向的单位矢量. 这样, \mathbf{r} 就成了时间 t 的函数, 可直接求导. 根据速度的定义, $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ 即

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \frac{d}{dt} (\hat{x}R \cos \omega t + \hat{y}R \sin \omega t) \\ &= \hat{x}R \frac{d \cos \omega t}{dt} + \hat{y}R \frac{d \sin \omega t}{dt} \\ &= -\hat{x}R\omega \sin \omega t + \hat{y}R\omega \cos \omega t \\ &= R\omega (-\hat{x} \sin \omega t + \hat{y} \cos \omega t) \end{aligned} \quad (2)$$

对比式 1 和式 2, 比较位矢 \mathbf{r} 和速度矢量 \mathbf{v} , 可以发现速度的大小 $|\mathbf{v}| = R\omega = |\mathbf{r}|\omega$, 多了一个 ω 因子. \mathbf{v} 与 $\hat{\mathbf{x}}$ 轴的夹角比 \mathbf{r} 与 $\hat{\mathbf{x}}$ 轴的夹角大了, 即逆时针转了 90° .

匀速圆周运动的加速度（几何法）

预备知识 匀速圆周运动的速度（几何法）[\[154\]](#), 加速度（矢量）[\[153\]](#)

在圆周运动中, 位矢 \mathbf{r} 是时间的函数. 对时间求导后, 我们得到速度矢量关于时间的函数. 对速度也进行同样的操作, 就不难得到圆周运动的加速度[\[153\]](#).

$$\mathbf{a} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{v}}{\Delta t} \quad (1)$$

现在我们用几何的方法来求该极限. 根据矢量减法的定义, 计算 $\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1$ 要先把 \mathbf{v}_1 和 \mathbf{v}_2 的起点放在一起 (例如都放在原点), 再从 \mathbf{v}_1 的终点指向 \mathbf{v}_2 的终点得到 $\Delta \mathbf{v}$ (图 1).

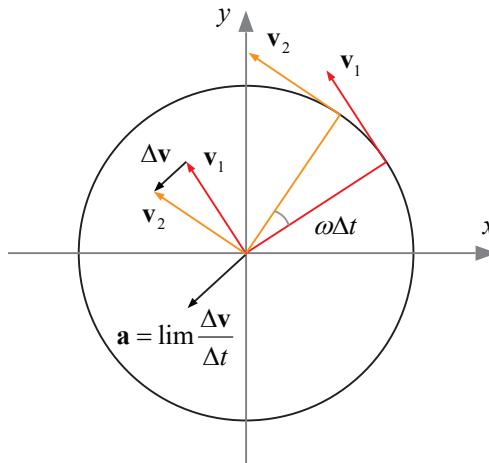


图 1: 把速度矢量移到原点再相减

我们已知匀速圆周运动的速度大小为 $|\mathbf{v}| = R\omega$, 根据“微小正弦极限[\[24\]](#)”中的结论, 把 $\Delta \mathbf{v}$ 的长度用弧长近似, 得

$$|\Delta \mathbf{v}| = |\mathbf{v}| \Delta \theta = (R\omega) \omega \Delta t \quad (2)$$

所以质点的加速度大小为

$$|\mathbf{a}| = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{(R\omega) \omega \Delta t}{\Delta t} = R\omega^2 \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta t}{\Delta t} = R\omega^2 \quad (3)$$

由图可得加速度的方向是速度方向逆时针偏转 $\pi/2$. 又由于速度方向是位移方向逆时针偏转 $\pi/2$, 所以匀速圆周运动的加速度的方向与位矢的方向相反.

结合模长和方向, 令 \mathbf{r} 为位矢, 就得到加速度的矢量形式

$$\mathbf{a} = -\omega^2 \mathbf{r} \quad (4)$$

匀速圆周运动的加速度（求导法）

预备知识 匀速圆周运动的速度（求导法）[\[155\]](#)

在匀速圆周运动的速度（求导法）[\[155\]](#) 中, 令圆周运动的运动方程为

$$\mathbf{r} = R(\hat{\mathbf{x}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega t) \quad (1)$$

继而求出速度矢量关于时间的函数是

$$\mathbf{v} = -\hat{\mathbf{x}}R\omega \sin \omega t + \hat{\mathbf{y}}R\omega \cos \omega t \quad (2)$$

根据加速度的定义 $\mathbf{a} = \mathbf{dv}/dt$, 即上式再对时间求导.

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \frac{d\mathbf{v}}{dt} \\ &= -\hat{\mathbf{x}}R\omega \frac{d}{dt} \sin \omega t + \hat{\mathbf{y}}R\omega \frac{d}{dt} \cos \omega t \\ &= -\hat{\mathbf{x}}R\omega^2 \cos \omega t - \hat{\mathbf{y}}R\omega^2 \sin \omega t \\ &= -\omega^2 \mathbf{r} \end{aligned} \quad (3)$$

牛顿运动定律 惯性系

预备知识 加速度^[153]

牛顿的三定律可表述如下, 为了避免讨论物体的质心及转动, 这里我们只讨论质点.

- **第一定律** 不受力或受合力为零的质点做匀速运动或静止.
- **第二定律** 质点所受合外力等于的质量乘以加速度.
- **第三定律** 两质点的相互作用力等大反向.

第一定律

牛顿第一定律的作用是定义**惯性系**: 惯性系存在, 且满足牛顿第一定律的参考系就是惯性系.

- **推论** 相对某惯性系静止或匀速运动且没有相对转动的参考系也是惯性系, 否则不是惯性系.

推论证明: 若已知 A 系为惯性系, B 系相对 A 系的平移速度为 \mathbf{v}_{AB} , 质点在两系中的瞬时速度分别记为 $\mathbf{v}_A, \mathbf{v}_B$, 则由“绝对速度 = 牵连速度 + 相对速度”得

$$\mathbf{v}_B = \mathbf{v}_A + \mathbf{v}_{AB} \quad (1)$$

若 \mathbf{v}_A 与 \mathbf{v}_{AB} 都是常矢量, 那么显然 \mathbf{v}_B 也是常矢量, 即 B 系为惯性系. 若两系之间有任何相对的加速度 (包括加速平移和转动), 那么 \mathbf{v}_{AB} 将随时间或位置变化, 也就不能保证 \mathbf{v}_B 一定是常矢量, 所以 B 系就不是惯性系.

第二定律

牛顿第二定律只能在惯性系中使用, 在非惯性系中需要用惯性力^[172]进行修正. 用矢量 \mathbf{F} 表示合力, 牛顿第二定律记为

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (2)$$

事实上, 牛顿本人对第二定律的表述使用了动量定理 (单个质点)^[166], 记质点的动量为 \mathbf{p} , 则

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (3)$$

在经典力学中，由于质量不发生变化，式 2 和式 3 是等效的，但令人惊讶的是，牛顿所用的形式在狭义相对论中仍然成立²，而式 2 却不成立。

第三定律

广义来说，牛顿第三定律就是动量守恒定律^[186]。牛顿第三定律在任何参考系中都适用，但是要注意两点。第一，在非惯性系中，由于惯性力作为一个数学上的修正，并不是真正的力，所以不存在反作用力。第二，在考虑电磁力时，由于电磁场可能具有动量，所以动量守恒定律要求所有物体与电磁场的动量之和守恒，而不仅仅是质点的总动量守恒。在考虑两带电粒子的相互作用力时，若假设粒子的运动速度较慢，则磁场可以忽略，电磁场动量始终为零，此时两粒子的总动量守恒，相互作用力等大反向。

功 功率

预备知识 力场^[161]，矢量的点乘^[91]，定积分^[57]

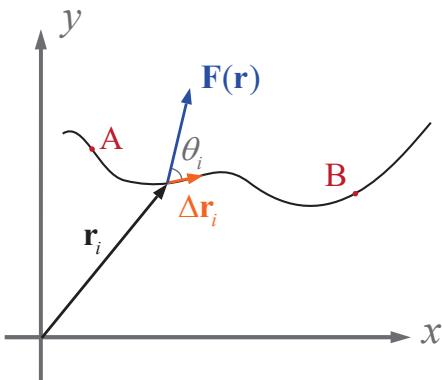


图 1：在一小段位移中，把变力看做恒力

如图 1，当质点沿着曲线运动时，有一个力作用在其上，当质点的位置为 \mathbf{r} 时，力为 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 。下面求质点从点 A 运动到点 B 的过程中，力对质点的做功。

²在狭义相对论中，动量的定义有所不同。

把从 A 到 B 这段曲线看成由许多小位移 $\Delta\mathbf{r}_1, \Delta\mathbf{r}_2 \dots \Delta\mathbf{r}_n$ 组成，对其中第 i 个进行分析。由于 $\Delta\mathbf{r}_i$ 很短，质点经过 $\Delta\mathbf{r}_i$ 的过程中位矢 \mathbf{r} 几乎不变，记为常矢量 \mathbf{r}_i 。在这小段中， $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 也可以近似看成是恒力 $\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)$ 。

现在把 $\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)$ 分解成垂直于 $\Delta\mathbf{r}_i$ 和平行于 $\Delta\mathbf{r}_i$ 的两个正交分量，其中垂直分量不做功，平行分量的大小为 $|\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)| \cos \theta_i$ ，该分量做功大小为

$$\Delta W_i = |\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)| |\Delta\mathbf{r}_i| \cos \theta_i \quad (1)$$

上式可以表示成矢量点乘^[91]的形式

$$\Delta W_i = \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta\mathbf{r}_i \quad (2)$$

把上式对所有的 i 求和，就得到了做功的近似表达式

$$W_{ab} = \sum_{i=1}^n \Delta W_i \approx \sum_{i=1}^n \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta\mathbf{r}_i \quad (3)$$

事实上，当曲线分割的越细，即 n 越大时，上式就越精确地成立。类比定积分^[57]中的介绍，令 $n \rightarrow \infty$ ，把求和符号换成积分符号，把表示增量的 Δ 换成微分符号 d ，则不等号可以变为等号。

$$W_{ab} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta\mathbf{r}_i = \int_{C_{ab}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (4)$$

不同于一元函数的积分，这一类特殊的积分叫做线积分，详见“线积分^[121]”。

力的功率

功率（瞬时）的定义为做功的变化率，即

$$P = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta W}{\Delta t} = \frac{dW}{dt} \quad (5)$$

根据式 2，力的功率为

$$P = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta\mathbf{r}_i}{\Delta t_i} = \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \quad (6)$$

动能 动能定理（单个质点）

预备知识 功 功率^[159], 牛顿第二定律^[157]

令质点的质量为 m , 速度为 \mathbf{v} , 则质点的动能定义为

$$E_k = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = \frac{1}{2}mv^2 \quad (1)$$

质点的动能定理是, 一段时间内质点动能的变化等于合外力对质点做的功. 从变化率(即时间导数)的角度来看, 动能定理也可以表述为质点的动能变化率等于合外力对质点的功率.

推导

力对质点做功的功率^[159]为

$$P = \frac{dW}{dt} = \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \quad (2)$$

再来看动能的变化率

$$\frac{d}{dt}E_k = \frac{1}{2}m\frac{d}{dt}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \quad (3)$$

由矢量点乘的求导^[113]式 7, $d(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})/dt = 2\mathbf{v} \cdot d\mathbf{v}/dt = 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{a}$, 上式变为

$$\frac{d}{dt}E_k = m\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \quad (4)$$

最后一步使用了牛顿第二定律. 注意式 2 与式 4 相等, 所以动能变化率等于合外力的功率.

力场 势能

预备知识 位置矢量^[150], 功^[159], 牛顿-莱布尼兹公式^[60]

力场

高中物理中我们已经学过一些场的概念, 即质点受场的力取决于质点在场中的位置. 例如地球表面局部的引力场可以近似看做一个恒力场(称为重力场), 即在一定区域内, 质点总受向下的, 大小恒为 mg 的重力(矢量式

$\mathbf{F} = m\mathbf{g}$). 又例如水平面上一根原长忽略不计的弹簧，一端固定在原点，另一端连接质点，那么质点受力总指向原点，大小等于劲度系数和位矢模长的之积 kr . 如果用矢量的方法表示，就是 $\mathbf{F} = -k\mathbf{r}$.

总结到一般情况，**力场**可以用场对质点施加的力（矢量）关于质点位置（即位矢^[150]）的矢量函数表示. 力场是一种**矢量场**^[118].

例 1 引力场

球坐标原点处质量为 M 的质点在周围造成的引力场为

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -G \frac{M}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (1)$$

若位矢用 \mathbf{r} 来表示 ($\mathbf{r} = r \hat{\mathbf{r}}$), 则

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -G \frac{M}{r^3} \mathbf{r} \quad (2)$$

现在变换到直角坐标系中，有

$$\begin{cases} \mathbf{r} = x \hat{\mathbf{x}} + y \hat{\mathbf{y}} + z \hat{\mathbf{z}} \\ r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \end{cases} \quad (3)$$

代入上式，展开得

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{GMx}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \hat{\mathbf{x}} - \frac{GMy}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \hat{\mathbf{y}} - \frac{GMz}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \hat{\mathbf{z}} \quad (4)$$

显然球坐标系中的引力场表达式比直角坐标系中的要简洁得多. 由此可见，对不同的矢量场选择适当的坐标系往往可以简化问题.

若质点从场的一点移动到另一点的过程中，力场对质点做的功^[159]只与初末位置有关，而与质点移动的路径无关，那么这个力场就是一个**保守场**. 这时我们可以给该质点定义一个**势能函数**，势能函数是一个关于位矢的标量函数，一般记为 $V(\mathbf{r})$ ，具有能量量纲. 当质点从一点以任意路径移动到另一点时，场对质点做的功等于质点初位置的势能减末位置的势能，即

$$\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = V(\mathbf{r}_1) - V(\mathbf{r}_2) \quad (5)$$

一维势能函数

现在先假设质点只能沿一条直线运动，且力也始终与直线平行。显然质点从一点到另一点的路径只可能有一条，所以对于任何一维力场都是保守场。若给直线定义一个正方向，单位矢量为 $\hat{\mathbf{x}}$ ，任何一维力场可以记为

$$\mathbf{F}(x) = F(x)\hat{\mathbf{x}} \quad (6)$$

质点的位置矢量可记为 $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}}$ 。由于 $\hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{x}} = 1$ ，质点从 $x = a$ 移动到 $x = b$ 过程中场做的功为

$$\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_a^b F(x) dx \quad (7)$$

根据势能的定义，对任意的 a 和 b ，上式应该等于 $V(a) - V(b)$ 。根据牛顿莱布尼兹公式^[60]，势能函数恰好就是 $F(x)$ 的负原函数乘以，所以 $F(x)$ 是 $V(x)$ 负导函数。

$$V = - \int F(x) dx \quad F(x) = - \frac{dV(x)}{dx} \quad (8)$$

需要注意的是，由于原函数有无穷多个（由不定积分中任意常数的取值决定），所以势能函数也存在无穷多个，且都相差一个常数。为了确定势能函数，我们需要指定场中某一点的势能值，如果令某点势能为零，那么这点就叫做零势点。

例 2 弹簧的势能

一个原长可忽略的轻弹簧劲度系数为 k ，一端固定在原点，另一端连接质点。质点只能沿 $\hat{\mathbf{x}}$ 方向运动，规定质点在原点时势能为 0，求弹簧的势能关于质点位置坐标 x 的函数。

由题意，式 6 中 $F(x) = -kx$ ，不定积分并取负值得到含有待定常数的势能函数

$$V(x) = - \int (-kx) dx = \frac{1}{2}kx^2 - C \quad (9)$$

为了确定待定常数，代入 $V(0) = 0$ ，解得 $C = 0$ 。所以所求势能为

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (10)$$

多维势能函数

预备知识 梯度定理^[122]

假设力场 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 是平面或三维空间中的保守场，对应势能为 $V(\mathbf{r})$ ，初始点为 \mathbf{r}_i ，终点为 \mathbf{r}_f 。对 $-V(\mathbf{r})$ 使用梯度定理^[122] 得

$$\int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_f} \nabla[-V(\mathbf{r})] \cdot d\mathbf{l} = V(\mathbf{r}_i) - V(\mathbf{r}_f) \quad (11)$$

我们把该式与式 5 比较，不难发现力场是势能函数的负梯度

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (12)$$

由梯度的定义，力场的各个分量分别为对应方向的负偏导数

$$F_x(\mathbf{r}) = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial x} \quad F_y(\mathbf{r}) = -\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial y} \quad \dots \quad (13)$$

即在保守场的某点中，力的方向是势能下降最快的方向，大小是该方向的负方向导数。

例 3 二维简谐振子

若已知二维的势能函数为 $V(x, y) = \frac{1}{2}k_1(x+y)^2 + \frac{1}{2}k_2(x-y)^2$ ，求力场。若已知场函数求势能函数，又该如何求？

把势能函数代入式 13 中，求偏导，得场为

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r}) &= -\frac{\partial V}{\partial x} \hat{\mathbf{x}} - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{\mathbf{y}} \\ &= -[(k_1 + k_2)x + (k_1 - k_2)y]\hat{\mathbf{x}} - [(k_1 - k_2)x + (k_1 + k_2)y]\hat{\mathbf{y}} \end{aligned} \quad (14)$$

现在我们根据“梯度定理^[122]”中的式 23 从场逆推势能。首先对力场的 x 分量和 y 分量分别关于 x 和 y 做不定积分得到任意两个原函数并记为 G_x 和 G_y 得

$$G_x(x, y) = -\frac{1}{2}(k_1 + k_2)x^2 - (k_1 - k_2)xy \quad (15)$$

$$G_y(x, y) = -(k_1 - k_2)xy - \frac{1}{2}(k_1 + k_2)y^2 \quad (16)$$

代入得（注意这里的场是势能函数的负梯度而不是梯度，另外注意下式中的常数项都并入 C 中）

$$\begin{aligned} V(x, y) &= -G_y(x, y) + G_y(x, y_0) - G_x(x, y_0) + C \\ &= \frac{1}{2}(k_1 + k_2)x^2 + (k_1 - k_2)xy + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)y^2 + C \\ &= \frac{1}{2}k_1(x + y)^2 + \frac{1}{2}k_2(x - y)^2 + C \end{aligned} \quad (17)$$

若规定零势点 $V(0, 0) = 0$ ，代入上式得 $C = 0$.

两质点间的势能

如果两质点 A 和 B 的位矢分别为 \mathbf{r}_A 和 \mathbf{r}_B ，相对位移为 $\mathbf{R} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$ ，两质点距离为 $R = |\mathbf{R}|$. 且 A 对 B 的作用力为 $\mathbf{F} = F(R)\hat{\mathbf{R}}$, B 对 A 的反作用力为 $-\mathbf{F}$. 现在考虑一个过程中力对两质点做的总功.

在一段微小时间 dt 内，两质点分别移动了 $d\mathbf{r}_A$ ，和 $d\mathbf{r}_B$ ，则相互作用力对二者做功为

$$dW = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}_B + (-\mathbf{F}) \cdot d\mathbf{r}_A = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{R} = F(R)\hat{\mathbf{R}} \cdot d\mathbf{R} = F(R)dR \quad (18)$$

（最后一步的证明见“位置矢量^[150]”中的例 1）定积分得

$$W = \int_{R_1}^{R_2} F(R) dR \quad (19)$$

现在我们借用一维势能的定义式 8 来定义势能函数为 $F(R)$ 的负原函数，则力在一段时间内对两质点做的总功就等于末势能减初势能

$$W = V(R_2) - V(R_1) \quad (20)$$

含时势能

以上的讨论中，我们默认力场的分布不随时间变化，所得势能显然也不随时间变化. 但在一些情况下，我们也可以定义随时间变化的势能.

例如例 1 中如果中心天体随时间变化，那么力场

把这种假想的位移叫做虚位移

这个偏导可以理解为

机械能守恒（单个质点）

预备知识 动能定理^[160], 势能^[161]

若质点只受不随时间变化的保守力作用³, 那么物体从在某段时间从 A 点移动到 B 点, 力场对物体做功能等于初末势能函数之差

$$W_{AB} = V(\mathbf{r}_A) - V(\mathbf{r}_B) \quad (1)$$

而根据动能定理, 力场对质点做功等于质点的末动能减初动能

$$W_{AB} = E_{kB} - E_{kA} = \frac{1}{2}mv_B^2 - \frac{1}{2}mv_A^2 \quad (2)$$

结合以上两式, 得

$$E_{kA} + V(\mathbf{r}_A) = E_{kB} + V(\mathbf{r}_B) \quad (3)$$

我们现在定义质点在某个时刻的动能加势能为机械能. 所以当

动量 动量定理（单个质点）

预备知识 牛顿第二定律^[157], 矢量的导数^[113]

令质点质量为 m , 速度为 \mathbf{v} , 定义其动量为

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \quad (1)$$

注意动量是矢量, 与速度(矢量)的方向相同, 且取决于坐标系.

现在把动量和速度都看做时间的函数. 等式两边求导, 速度对时间的导数等于加速度 \mathbf{a}

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a} \quad (2)$$

³即势能函数不随时间变化

根据牛顿第二定律, ma 等于质点所受合外力 \mathbf{F} (注意力和加速度也都是时间的函数), 所以

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} \quad (3)$$

这就是动量定理的微分形式, 即动量的变化率等合外力. 也可以写成微分形式

$$d\mathbf{p} = \mathbf{F} dt \quad (4)$$

即微小时间内的动量变化等于力乘以微小时间.

现在用定积分^[57] 中的微元思想考虑动量从时刻 t_1 到 t_2 的总变化, 我们可以把这段时间划分为 N 段微小时间, 第 i 段所在的时刻记为 t_i , 每小段时间内 \mathbf{F} 可认为是恒力 $\mathbf{F}(t_i)$

$$\mathbf{p}(t_2) - \mathbf{p}(t_1) = \sum_{i=1}^N \Delta \mathbf{p}_i = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}(t_i) \Delta t_i \quad (5)$$

当 $N \rightarrow \infty, \Delta t \rightarrow 0$ 时该式可以用定积分 (矢量函数) 表示⁴

$$\mathbf{p}(t_2) - \mathbf{p}(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{F}(t) dt \quad (6)$$

这是动量定理的积分形式. 特殊地, 对于恒力 \mathbf{F} , 右边的积分等于 $(t_2 - t_1)\mathbf{F}$.

角动量定理 角动量守恒 (单个质点)

预备知识 角动量^[192], 牛顿第二定律^[157], 力矩^[189]

一个质点的质量为 m , 某时刻速度为 \mathbf{v} . 则其动量为 $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. 在三维空间中指定一点 O 为参考点, O 点到质点的矢量为 \mathbf{r} . 根据定义, 该质点关于 O 点的角动量为 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. 这个质点在该时刻受到的力矩为 \mathbf{M} , 可以证明

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{M} \quad (1)$$

这就是 (单个质点的) 角动量定理.

⁴通常省略以上的推导而直接表达为“式 4 两边定积分得到式 6”

特殊地，若质点受到的力矩为零，则 $d/d\mathbf{L}/t = \mathbf{0}$ ，即角动量不随时间变化。这个现象叫做（单个质点的）角动量守恒。由力矩的定义， $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$ ，可見以下两种情况下力矩为零，角动量守恒。

1. 质点受合力 $\mathbf{F} = \mathbf{0}$ ，即质点静止或做匀速直线运动。
2. \mathbf{F} 与 \mathbf{r} 同向，即质点只受关于 O 点的有心力。

单个质点的角动量定理证明

质点的速度为 $\mathbf{v} = \frac{d}{dt}\mathbf{r}$ ，加速度为 $\mathbf{a} = d\mathbf{v}/dt$ ，叉乘的求导法则与标量乘法求导类似，牛顿第二定律为 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ ，两个同方向矢量叉乘为零，

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{L}}{dt} &= \frac{d(\mathbf{r} \times \mathbf{p})}{dt} = m \frac{d(\mathbf{r} \times \mathbf{v})}{dt} = m \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{v} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \\ &= m(\mathbf{v} \times \mathbf{v} + \mathbf{r} \times \mathbf{a}) = \mathbf{r} \times (m\mathbf{a}) \\ &= \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{M} \end{aligned} \tag{2}$$

简谐振子

预备知识 胡克定律, 牛顿第二定律^[157]

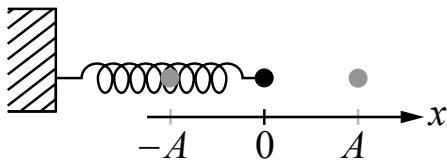


图 1: 简谐振子模型

如图 1, 质量为 m 的质点固定在弹性系数为 k 的弹簧的一端, 弹簧另一端固定。在 $t = 0$ 时, 若质点不在平衡位置, 或者有一个初速度, 则接下来会发生振动 (忽略弹簧的质量, 任何摩擦以及重力)。以质点拉伸弹簧的方向为 x 轴正方向, 质点的平衡位置为 $x = 0$ 。当质点在位置 x 时, 根据胡克定律, 受力为 $F = -kx$ 。根据牛顿第二定律^[157] $F = ma = m\ddot{x}$ (\ddot{x} 代表对时间的二阶导数)。两式消去 F , 得

$$m\ddot{x} = -kx \quad (1)$$

这是一个单变量函数与其二阶导数的关系式。我们把这样含有单变量函数及其导数或高阶导数的等式叫做常微分方程。由于上式中最高阶导数是二阶, 所以叫做二阶微分方程。要解该方程, 就是要寻找一个函数 $x(t)$, 使它的二阶导数与 $-x(t)$ 成正比, 比例系数为 k/m 。注意到 $\cos'' t = -\cos t$ 具有类似的性质⁵, 不妨继续猜测 $x = \cos(\omega t)$, 则 $\ddot{x} = -\omega^2 \cos \omega t$ 。所以只要令 $\omega = \sqrt{k/m}$ 即可满足方程。这说明, 弹簧的震动可以用余弦函数来描述。但是这只是方程的一个解。任意情况的振动可以表示为以下函数 (令 A 和 φ_0 为两个任意实数)

$$x = A \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (\omega = \sqrt{k/m}) \quad (2)$$

这叫做微分方程式 1 的通解 (系统的方法参考二阶常系数齐次微分方程的通解^[69]), 即无论常数 A, φ_0 取任意值, 微分方程总能得到满足。

⁵ $\sin t$ 也有同样的性质, 所以下讨论对 $\sin t$ 也成立

满足这种形式的运动叫做简谐运动(或简谐震动). 其中 A 为振幅, $\omega t + \varphi_0$ 为相位, φ_0 为初相位(即 $t = 0$ 时刻的相位). 但是如何决定 A 和 φ_0 呢? 根据上面给出的条件还不能判断. 由于有两个待定常数, 我们需要两个额外条件才能解出. 常见的情况是给出初始时刻 $t = 0$ 时质点的位置 $x(0)$ 和速度 $\dot{x}(0)$, 这就叫做初值条件.

例如给出 $x(0) = 0$, $\dot{x}(0) = v_0$, 把方程的通解代入, 得 $A \cos \varphi_0 = 0$, $-A\omega \sin \varphi_0 = v_0$, 解得 $\varphi_0 = \pi/2$, $A = -v_0/\omega$. 所以

$$x = -v_0 \omega \cos\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) = v_0 \omega \sin \omega t \quad (\omega = \sqrt{k/m}) \quad (3)$$

受阻简谐振子

预备知识 简谐振子^[169], 二阶常系数齐次微分方程的^[70]

结论

两个复数根 ($\alpha^2 - 4km < 0$, 最常讨论和应用的情况)

$$y = C_1 e^{rx} \cos(\omega x + C_2) \quad (1)$$

其中

$$r = -\frac{\alpha}{2m} \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\alpha^2}{4m^2}} \quad (2)$$

其中 $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ 为固有振动频率($\alpha = 0$ 时的振动频率)为, r 和 ω 满足

$$r^2 + \omega^2 = \omega_0^2 \quad (3)$$

推导

在弹簧振子的振动方程基础上, 若振子还受到一个与速度成正比的阻力 $f = -\alpha v$, 则振动方程如下 ($\alpha \neq 0$).

$$my'' = -\alpha y' - ky \quad (4)$$

之所以设为正比, 是因为所得方程是线性方程, 便于求解. 根据二阶常系数齐次微分方程^[70], 解特征方程 $mr^2 + \alpha r + k = 0$, 可得通解分为三种情况.

1. 有两个不同的实根 r_1, r_2 ($\alpha^2 - 4km > 0$), 方程的通解为

$$y = C_1 e^{r_1 x} + C_2 e^{r_2 x} \quad (5)$$

2. 有一个重根 r ($\alpha^2 - 4km = 0$), 方程的通解为

$$y = C_1 e^{rx} + C_2 r e^{rx} \quad (6)$$

3. 两个复数根 r_1, r_2 ($\alpha^2 - 4km < 0$, 最常讨论和应用的情况)

$$y = C_1 e^{rx} \cos(\omega x) + C_2 e^{rx} \sin(\omega x) \quad (7)$$

其中

$$r = -\frac{\alpha}{2m} \quad \omega = \frac{1}{2m} \sqrt{4mk - \alpha^2} = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\alpha^2}{4m^2}} \quad (8)$$

若令 (见简谐振子^[169] 的振动频率)

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad \gamma = \frac{\alpha}{2\sqrt{mk}} \quad (9)$$

则

$$r = -\omega_0 \gamma, \quad \omega = \omega_0 \sqrt{1 - \gamma^2} \quad (10)$$

满足 $r^2 + \omega^2 = \omega_0^2$

惯性力

预备知识 牛顿第二定律^[157], 矩阵^[104]

若一个质点 m 某时刻在惯性系 xyz 中的加速度为 \mathbf{a}_{xyz} , 在另一个非惯性系 abc 中的加速度为 \mathbf{a}_{abc} , 则可假设质点受到一个惯性力

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) \quad (1)$$

使得牛顿运动定律在非惯性系 abc 中仍然成立. 惯性力作为一个数学工具, 既没有施力物体, 也不是真实的力. 另外, 惯性力取决于参考系的选取甚至质点的运动, 真实的受力不依赖于参考系.

例 1 加速的电梯

在向上加速的电梯中, 电梯给人的支持力大于人的重力. 这在地面参考系(惯性系)中的解释是, 电梯给人的支持力除了要抵消人的重力, 还要提供额外的向上的力使人产生向上的加速度. 但是人从直觉上认为自己所处的是惯性系, 符合牛顿运动定律. 那么唯一合理的解释就是自己被施加了“额外的重力”. 为了使自己保持静止, 电梯不得不给人额外的支持力.

例 2 转弯的车

车向左转时人感觉到向右的“离心力”. 同样, 这一现象在地面参考系中解释, 是车为了使人具有向左的向心加速度, 给人一个向左的力, 同时人对车施加一个向右的反作用力. 然而, 车中的人直觉上认为自己所处的是惯性系, 符合牛顿运动定律, 那么唯一合理的解释就是自己受到了向右的“离心力”. 为了使人保持静止, 车必须给人一个向左的反作用力.

从这两个例子可以看出, 如果要使牛顿运动定律在非惯性系中也成立, 则需要假设一些力的存在, 即惯性力. 人的直觉总会假设自己的参考系是惯性系, 这就解释了为什么日常生活中我们常说离心力却不说向心力. 用离心力来描述现象并没有错, 这只是从更符合直觉的非惯性系的角度来分析而已.

平动非惯性系

假设某个非惯性系 abc 相对于惯性系 xyz 没有旋转只有平移，且 t 时刻的相对加速度为 $\mathbf{a}(t)$. 这样， abc 中的任何一个静止点相对于 xyz 系的加速度都是 $\mathbf{a}(t)$. 设 abc 系中有一质点 m ，相对于 abc 系的加速度为 $\mathbf{a}_{abc}(t)$ ，那么在惯性系中质点的加速度为 $\mathbf{a}_{xyz} = \mathbf{a}_{abc} + \mathbf{a}$ ，即绝对加速度⁶等于相对加速度加牵连加速度. 运用牛顿第二定律得质点真实的受力为（注意真实受力不随参考系变化！）

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}_{xyz} = m(\mathbf{a} + \mathbf{a}_{abc}) \quad (2)$$

非惯性系中的观察者假设自己的参考系中牛顿定律仍然成立，并假设存在惯性力 \mathbf{f} ，对于某个质点有

$$\mathbf{F} + \mathbf{f} = m\mathbf{a}_{abc} \quad (3)$$

所以

$$\mathbf{f} = m\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{F} = -m\mathbf{a} \quad (4)$$

这说明，平动非惯性系中任何一个物体受到的惯性力大小与质量和非惯性系加速度的乘积成正比，方向与相对加速度方向相反.

在例 1 中，电梯的参考系就是一个平动的非惯性系. 如果人站在一个秤上，弹簧秤的示数将等于人的体重加上惯性力 ma （电梯向上加速时 a 取正值）. 这用惯性力来解释，就是静止的人受到与电梯加速度方向相反的惯性力，大小等于 ma （注意在电梯参考系中人没有加速度，所以是受力平衡的）.

非平动参考系

非平动参考系相对于惯性系除了平移运动还可能做旋转运动. 这时并不能类比上面直接得到 $\mathbf{f} = -m\mathbf{a}$ 的结论，即使这里把加速度变为位置和时间的函数（对于非平动参考系，静止点相对于惯性系的加速度显然也取决于位置）. 这是因为，对非平动参考系中，并不满足绝对加速度等于相对加速度加牵连加速度，即并不满足 $\mathbf{a}_{xyz} = \mathbf{a}_{abc} + \mathbf{a}$ （见加速度叠加）. 对任何非惯性系都成立的普适结论只有

$$\mathbf{f} = m\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{F} = m\mathbf{a}_{abc} - m\mathbf{a}_{xyz} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) \quad (5)$$

⁶这里把绝对加速度定义为任意惯性系中的测得质点的加速度. 由于不同惯性系之间的相对加速度为零，绝对加速度与惯性系的选择无关.

即，在最一般的情况下，惯性力等于质量乘以两参考系中加速度之差。

计算惯性力的坐标法(适用于任何非惯性系)

1. 求出所选惯性系和非惯性系之间的坐标变换和逆变换关系

$$\begin{cases} x = f_1(a, b, c, t) \\ y = f_2(a, b, c, t) \\ z = f_3(a, b, c, t) \end{cases} \quad \begin{cases} a = g_1(x, y, z, t) \\ b = g_2(x, y, z, t) \\ c = g_3(x, y, z, t) \end{cases} \quad (6)$$

2. 对 x, y, z 求时间的二阶全导数^[87]，得出惯性系中质点的加速度(用 a, b, c, t 表示)。

$$\begin{cases} \ddot{x} = \frac{d^2}{dt^2} f_1(a, b, c, t) \\ \ddot{y} = \frac{d^2}{dt^2} f_2(a, b, c, t) \\ \ddot{z} = \frac{d^2}{dt^2} f_3(a, b, c, t) \end{cases} \quad (7)$$

3. 把 xyz 系中的加速度矢量⁷ $(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z})^T$ 用 g_1, g_2, g_3 逆变换到 abc 系中表示，

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \\ \ddot{z} \end{pmatrix}_{abc} = \begin{pmatrix} g_1(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z}, t) \\ g_2(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z}, t) \\ g_3(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z}, t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} g_1(0, 0, 0, t) \\ g_2(0, 0, 0, t) \\ g_3(0, 0, 0, t) \end{pmatrix} \quad (8)$$

4. 质点受到的惯性力为

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) = m \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \\ \ddot{c} \end{pmatrix} - m \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \\ \ddot{z} \end{pmatrix}_{abc} \quad (9)$$

注意第三步中的坐标变换是必须的，因为 $(\ddot{a}, \ddot{b}, \ddot{c})^T$ 是 abc 系中的矢量坐标， $(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z})^T$ 是 xyz 系中的矢量坐标，直接相减没有任何物理意义。必须把 $(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z})^T$ 变换到 abc 系中表示，或者把 $(\ddot{a}, \ddot{b}, \ddot{c})^T$ 变换到 xyz 系中表示才可相减。由于惯性力是非惯性系中的假想力，所以一般把所有矢量用非惯性系中的坐标表示。

⁷上标 T 表示矩阵转置，将行矢量变为列矢量

离心力

预备知识 匀速圆周运动的加速度^{[156][157]}, 惯性力^[172]

令参考系 abc 和 xyz 的 c 轴和 z 轴式中重合. 其中 xyz 是惯性系, abc 以恒定的角速度 ω 绕 z 轴逆时针转动. 求 abc 系中一个质量为 m 的静止质点所受的惯性力 (离心力).

令质点的坐标 (a, b, c) 离 c 轴的距离为 $r = \sqrt{b^2 + c^2}$, 对应的径向矢量为 $\mathbf{r} = (a, b, 0)^T$. 在 xyz 系中, 质点做匀速圆周运动, 相对于 xyz 系的加速度 (绝对加速度) (用 abc 系的坐标表示) 为

$$\mathbf{a}_{xyz} = -\omega^2 \mathbf{r} = -\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

质点相对于 abc 系静止, 相对加速度为零

$$\mathbf{a}_{abc} = \mathbf{0} \quad (2)$$

所以由惯性力^[172] 中的结论, 惯性力为

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) = m\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

注意离心力向外, 与直觉相符.

注意这个结论只适用于质点相对于 abc 系静止的情况, 若有相对运动, 则惯性力除了离心力, 还会有一项科里奥利力^[176].

科里奥利力

预备知识 惯性力^[172], 离心力^[175], 平面旋转矩阵, 矢量的叉乘^[93]

结论

科里奥利力（Coriolis Force）是匀速旋转的参考系中的由相对速度产生的惯性力.

$$\mathbf{F}_{cori} = 2m\mathbf{v}_{abc} \times \boldsymbol{\omega} \quad (1)$$

其中 \mathbf{v}_{abc} 是质点相对于旋转系的瞬时速度, $\boldsymbol{\omega}$ 是旋转系的恒定角速度矢量. 在匀速转动参考系（属于非惯性系）中，若质点保持相对静止，则惯性力只有离心力. 然而当质点与转动参考系有相对速度时，惯性力中还会增加一个与速度垂直的力，这就是科里奥利力. 地理中的地转偏向力就是科里奥利力，可用上式计算. 其中是地球的自转角速度.

推导

这里的主要思路是按照惯性力^[172] 中的坐标法. 设空间中存在一个惯性系 xyz 和一个非惯性系 abc 相对于 xyz 绕 z 轴以角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 逆时针匀速旋转（右手定则）. 由于 z 轴和 c 轴始终重合 ($z = c$), 只需要考虑 x, y 坐标和 a, b 坐标之间的关系即可.

令平面旋转矩阵为

$$\mathbf{R}(\theta) \equiv \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2)$$

其意义是把坐标逆时针旋转角 θ . 则其逆矩阵等于转置矩阵

$$\mathbf{R}(-\theta) = \mathbf{R}(\theta)^T = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3)$$

意义是顺时针旋转 θ 角. 所以两坐标系之间的坐标变换为

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\omega t)^T \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (4)$$

为了得到质点在惯性系中的加速度，对上式的 $(x, y)^T$ 求二阶全导数得⁸

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} = \ddot{\mathbf{R}}(\omega t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 2\dot{\mathbf{R}}(\omega t) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} + \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix} \quad (5)$$

其中⁹

$$\dot{\mathbf{R}}(\omega t) = \omega \begin{pmatrix} \cos(\omega t + \pi/2) & -\sin(\omega t + \pi/2) \\ \sin(\omega t + \pi/2) & \cos(\omega t + \pi/2) \end{pmatrix} = \omega \mathbf{R}(\omega t + \pi/2) \quad (6)$$

$$\ddot{\mathbf{R}}(\omega t) = -\omega^2 \mathbf{R}(\omega t) \quad (7)$$

代入式 5 得

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} = -\omega^2 \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 2\omega \mathbf{R}(\omega t + \pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} + \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix} \quad (8)$$

上式中的每一项都是 xyz 参考系中的坐标。所有坐标顺时针旋转 ωt ，得到 abc 参考系中的坐标。首先由旋转矩阵的几何意义得 $\mathbf{R}(\theta_1)\mathbf{R}(\theta_2) = \mathbf{R}(\theta_1 + \theta_2)$

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix}_{abc} = \mathbf{R}(-\omega t) \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} = -\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 2\omega \mathbf{R}(\pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix} \quad (9)$$

所以旋转参考系中的总惯性力（式 9 [172]）为（用 abc 系中的坐标表示）

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) = \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix}_{abc} = m\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - 2m\omega \mathbf{R}(\pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} \quad (10)$$

其中第一项是已知的离心力^[175]

$$m\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = m\omega^2 \mathbf{r} \quad (11)$$

我们将第二项定义为科里奥利力。由叉乘的几何意义^[93]，科里奥利力可以用叉乘记为

$$-2m\omega \mathbf{R}(\pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = 2m\mathbf{v}_{abc} \times \boldsymbol{\omega} \quad (12)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}$ 是 abc 系旋转的角速度矢量， \mathbf{v}_{abc} 是质点相对于 abc 系的速度。最后，矢量形式的式 10 为

$$\mathbf{f} = m\omega^2 \mathbf{r} + 2m\mathbf{v}_{abc} \times \boldsymbol{\omega} \quad (13)$$

⁸本词条中，某个量上方加一点表示对时间的一阶导数，两点表示对时间的二阶导数。

⁹式 6 和式 7 相当于用矩阵推导了圆周运动的速度和加速度公式^{[154][156]}。

地球表面的科里奥利力

预备知识 科里奥利力^[176]

令延地轴向北的单位矢量为 \hat{z} , 质点所在经线与赤道交点的单位矢量为 \hat{x} , 则 $\hat{y} = \hat{z} \times \hat{x}$. 若质点运动的方向与所在经线的夹角为 ϕ (顺时针为正), 运动平面的法向量与赤道平面的夹角为 θ (若把地球近似看做球形, 则 θ 是质点所在纬度¹⁰). 这样, 运动平面内正北方向的单位矢量为 $\hat{z}' = -\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{z}$, 正东方向的单位矢量为 \hat{y} , 正上方为 $\hat{x}' = \hat{y} \times \hat{z}' = \sin \theta \hat{z} + \cos \theta \hat{x}$, 速度方向的单位矢量为

$$\hat{v} = \sin \phi \hat{y} + \cos \phi \hat{z}' = -\cos \phi \sin \theta \hat{x} + \sin \phi \hat{y} + \cos \phi \cos \theta \hat{z} \quad (1)$$

现在可以计算科里奥利力

$$\mathbf{F}_{col} = 2mv\omega \hat{v} \times \hat{z} = 2mv\omega (\cos \phi \sin \theta \hat{y} + \sin \phi \hat{x}) \quad (2)$$

其向北, 向东, 向上的分量分别为

$$\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{z}' = -2mv\omega \sin \theta \sin \phi \quad \mathbf{F}_{col} \cdot \hat{y} = 2mv\omega \sin \theta \cos \phi \quad (3)$$

$$\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{x}' = 2mv\omega \sin \phi \cos \theta \quad (4)$$

可以证明水平分力可以表示为

$$\mathbf{F}_{col}^{\parallel} = (\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{y})\hat{y} + (\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{z}')\hat{z}' = 2m\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}' \quad (5)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}' = \omega \sin \theta \hat{x}'$. 可见科氏力的水平分量始终与速度垂直, 且在地球的两极 ($\theta = pi/2$) 处取最大值 $2mv\omega$, 在赤道处为 0.

要特别注意的是, 地球表面的非惯性力除了科里奥利力外还有离心力, 但离心力一般被地球的椭球形弥补, 可以不计.

¹⁰但严格来说地球由于受离心力, 赤道宽, 两极窄.

例 1

假设 30 吨重的高铁车厢在北纬 30 度以 300km/h 的速度行驶，其水平方向的科氏力大小为

$$\begin{aligned} F_{col} &= 2 \times 30,000\text{kg} \times (300,000\text{m}/3600\text{s}) \times \frac{2\pi}{24h \times 3600s} \times \sin \frac{\pi}{6} \quad (6) \\ &= 60.32\text{N} \end{aligned}$$

第二章

质点系与刚体

质心 质心系

预备知识 体积分

质心的定义

对质点系，令第 i 个质点质量为 m_i ，位置为 \mathbf{r}_i ，总质量为 $M = \sum_i m_i$ ，则该质点系的质心定义为

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{M} \sum_i m_i \mathbf{r}_i \quad (1)$$

对连续质量分布，令密度关于位置的函数为 $\rho(\mathbf{r})$ ，总质量为密度的体积分

$$M = \int \rho(\mathbf{r}) dV \quad (2)$$

质心定义为

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{M} \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) dV \quad (3)$$

以下的讨论都对质点系进行，连续质量分布可看做由许多体积微元组成，也可看做质点系。

质心的唯一性

既然质心的定义取决于参考系（因为 \mathbf{r}_i 取决于参考系），那么不同参考系中计算出的质心是否是空间中的同一点呢？我们只需要证明，在 A 坐标系中得到的质心 \mathbf{r}_{Ac} 与 B 坐标系中得到的质心 \mathbf{r}_{Bc} 满足关系

$$\mathbf{r}_{Ac} = \mathbf{r}_{AB} + \mathbf{r}_{Bc} \quad (4)$$

首先根据定义

$$\mathbf{r}_{Ac} = \frac{1}{M} \sum_i m_i \mathbf{r}_{Ai} \quad \mathbf{r}_{Bc} = \frac{1}{M} \sum_i m_i \mathbf{r}_{Bi} \quad (5)$$

由位矢的坐标系变换， $\mathbf{r}_{Ai} = \mathbf{r}_{AB} + \mathbf{r}_{Bi}$ ，所以

$$\mathbf{r}_{Ac} = \frac{1}{M} \sum_i m_i (\mathbf{r}_{AB} + \mathbf{r}_{Bi}) = \mathbf{r}_{AB} + \frac{1}{M} \sum_i m_i \mathbf{r}_{Bi} = \mathbf{r}_{AB} + \mathbf{r}_{Bc} \quad (6)$$

质心系

定义质点系的质心系为原点固定在质心上且没有转动的参考系（平动参考系）。根据质心的唯一性（式 4），在质心系中计算质心（式 1）仍然落在原点，即

$$\sum_i m_i \mathbf{r}_{ci} = \mathbf{0} \quad (7)$$

其中 \mathbf{r}_{ci} 是质心系中质点 i 的位矢。

注意质心系并不一定是惯性系，只有当合外力为零质心做匀速直线运动，质心系才是惯性系。在非惯性系中，每个质点受惯性力。

质心系中总动量

把式 7 两边对时间求导，得

$$\sum_i m_i \mathbf{v}_{ci} = \mathbf{0} \quad (8)$$

注意到等式左边恰好为质心系中质点系的总动量，所以我们得到质心系的一个重要特点，质心系中总动量为零。

二体系统

预备知识 质心 质心系^[181]

我们现在考虑两个仅受相互作用的质点 A 和 B , 它们的质量分别为 m_A 和 m_B . 由于不受系统外力, 在任何惯性系中他们的质心都会做匀速直线运动.

现在定义他们的相对位矢 (也叫相对坐标) 为点 A 指向点 B 的矢量

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A \quad (1)$$

且定义相对速度和相对加速度分别为 \mathbf{R} 的导数 $\dot{\mathbf{R}}$ 和二阶导数 $\ddot{\mathbf{R}}$. 在质心系中观察, 由于质心始终处于原点, 两质点的位矢 \mathbf{r}_A 和 \mathbf{r}_B 满足

$$m_A \mathbf{r}_A + m_B \mathbf{r}_B = \mathbf{0} \quad (2)$$

联立式 1 和式 2 可以发现在质心系中 $\mathbf{R}, \mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B$ 间始终存在一一对应的关系, 所以不受外力的二体系统只有三个自由度

$$\mathbf{r}_A = \frac{m_B}{m_A + m_B} \mathbf{R} \quad \mathbf{r}_B = \frac{m_A}{m_A + m_B} \mathbf{R} \quad (3)$$

运动方程

现在令质点 A 对 B 的作用力为 \mathbf{F} (与 \mathbf{R} 同向), 则由牛顿第三定律, B 对 A 有反作用力 $-\mathbf{F}$. 两质点加速度分别为 (牛顿第二定律) $\mathbf{a}_A = -\mathbf{F}/m_A$, $\mathbf{a}_B = \mathbf{F}/m_B$. 所以相对加速度为

$$\ddot{\mathbf{R}} = \ddot{\mathbf{r}}_B - \ddot{\mathbf{r}}_A = \frac{m_A + m_B}{m_A m_B} \mathbf{F} \quad (4)$$

若定义两质点的约化质量为

$$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (5)$$

且将上式两边同乘约化质量, 我们得到相对位矢的牛顿第二定律

$$\mathbf{F} = \mu \ddot{\mathbf{R}} \quad (6)$$

也就是说, 在质心系中使用相对位矢, 二体系统的运动规律就相当于单个质量为 μ , 位矢为 \mathbf{R} 的质点的运动规律, 我们姑且将其称为等效质点. 而 A 对 B 的作用力可以看成原点对等效质点的有心力.

机械能守恒

再来看系统的动能. 使用式 3 把系统在质心系中的总动能用相对位矢表示得

$$E_k = \frac{1}{2}(m_A \dot{\mathbf{r}}_A^2 + m_B \dot{\mathbf{r}}_B^2) = \frac{1}{2} \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \dot{\mathbf{R}}^2 = \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{R}}^2 \quad (7)$$

这恰好是等效质点动能.

若两质点间的相互作用力的大小只是二者距离 $R = |\mathbf{R}|$ 的函数, 我们可以用一个标量函数 $F(R)$ 来表示力与距离的关系, 即

$$\mathbf{F}(\mathbf{R}) = F(R) \hat{\mathbf{R}} \quad (8)$$

注意 $F(R) > 0$ 时两质点存在斥力, $F(R) < 0$ 时存在引力.

根据“势能^[161]”中的式 20, 我们可以定义势能函数 $V(R)$ 为 $F(R)$ 的一个负原函数. 现在写出二体系统在质心系中的机械能为

$$E = \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{R}}^2 + V(R) \quad (9)$$

由于系统不受外力, 机械能守恒.

质点系的动量

预备知识 质心系^[181]

质点系的总动量为

$$\mathbf{P} = \sum_i m_i \mathbf{v}_i = \sum_i m_i (\mathbf{v}_c + \mathbf{v}_{ci}) = M\mathbf{v}_c + \sum_i m_i \mathbf{v}_{ci} \quad (1)$$

其中 M 为质点系的总质量. 注意到质心系中的动量为零, $\sum_i m_i \mathbf{v}_{ci} = \mathbf{0}$

$$\mathbf{P} = M\mathbf{v}_c \quad (2)$$

所以质点系的动量等于质心的动量, 即总质量乘以质心的速度.

动量定理 动量守恒

预备知识 动量和动量定理（单个质点）

结论

系统总动量的变化率等于合外力，所以合外力为零时系统总动量守恒。

推导

任何系统都可以看做质点系，质点系中第 i 个质点可能受到来自该质点系的其他质点的力（**系统内力**） \mathbf{F}_i^{in} 以及来自系统外的力（**系统外力**） \mathbf{F}_i^{out} 。由单个质点的动量定理，

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p}_i = \mathbf{F}_i^{in} + \mathbf{F}_i^{out} \quad (1)$$

总动量的变化率为

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_i \frac{d}{dt}\mathbf{p}_i = \sum_i \mathbf{F}_i^{in} + \sum_i \mathbf{F}_i^{out} \quad (2)$$

右边的两项求和分别叫做系统的**和内力**与**合外力**。其中**和内力**又可以分解为不同的第 j 个质点对第 i 个质点的作用力

$$\sum_i \mathbf{F}_i^{in} = \sum_{i,j}^{i \neq j} \mathbf{F}_{j \rightarrow i} \quad (3)$$

任意两个质点 k 和 l 对该求和的贡献是一对相互作用力 $\mathbf{F}_{k \rightarrow l} + \mathbf{F}_{l \rightarrow k}$ ，而根据牛顿第三定律，相互作用力之和为零。所以上式求和为零，即**系统的和内力**为零。于是我们得到**系统的动量定理**

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_i \mathbf{F}_i^{out} \quad (4)$$

质点系的动能 柯尼西定理

预备知识 质点系，质点系中的动量

柯尼西定理

某参考系中质点系的动能等于该参考系中其的质心的动能加上质心系中质点系的动能，即

$$E_k = \frac{1}{2}Mv_c^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2 \quad (1)$$

其中 M 是所有质点的质量和， v_c 是质心系相对于当前参考系的运动速度， m_i 是第 i 个质点的质量， v_i 是第 i 个质点在质心系中的速度。

例如，在计算一个一边平移一边旋转的均匀圆盘，可以先计算它绕轴旋转时的动能，加上它不旋转只平动时的动能，就是它的总动能。

证明

在当前参考系中，第 i 个质点的运动速度为

$$\mathbf{v}_{0i} = \mathbf{v}_c + \mathbf{v}_i \quad (2)$$

于是有

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_{0i}^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_i m_i (\mathbf{v}_c + \mathbf{v}_i)^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_{0i}^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 + \sum_i m_i \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_{0i} \end{aligned} \quad (3)$$

现在只需证明 $\sum_i m_i \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_{0i} = 0$ 即可。考虑到

$$\sum_i m_i \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_{0i} = \mathbf{v}_c \sum_i m_i \mathbf{v}_{0i} \quad (4)$$

而质心系中的质点系动量为零, 所以

$$\sum_i m_i \mathbf{v}_{0i} = \mathbf{0} \quad (5)$$

证毕.

力矩

预备知识 矢量的叉乘^[93]

平面力矩

如果只考虑一个厚度不计的片状物体在平面上的运动和受力，受力点为 \mathbf{r} ，力为 \mathbf{F} ，那么对于一个给定的参考点（除非明确指出，一般取坐标原点），就可以计算物体受到的力矩。

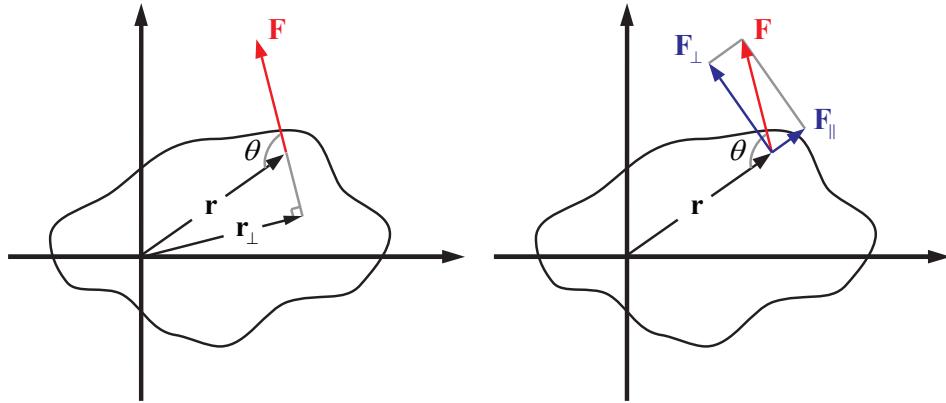


图 1: 力矩的两种几何理解

根据初中所学的方法，应该先作出“力臂” \mathbf{r}_\perp 与力的方向垂直（图 1 左）。力矩的大小（用 M 表示）为

$$M = |\mathbf{r}_\perp| |\mathbf{F}| = |\mathbf{r}| |\mathbf{F}| \sin \theta \quad (1)$$

其中 θ 是 \mathbf{r} 与 \mathbf{F} 的夹角 ($\theta < \pi$)。从另一种角度来看，也可以把力 \mathbf{F} 正交分解为平行于 \mathbf{r} 的分量和垂直于 \mathbf{r} 的分量（图 1 右）。其中平行分量不产生力矩，垂直分量产生的力矩为

$$M = |\mathbf{r}| |\mathbf{F}_\perp| = |\mathbf{r}| |\mathbf{F}| \sin \theta \quad (2)$$

为了区分力矩的两个不同的方向（逆时针和顺时针），通常有两种做法：一是用正负号加以区分，例如规定逆时针的力矩为正，顺时针为负。这种定义把力

矩假定为一种标量. 另一种是根据叉乘的定义^[93]，规定力矩为矢量，且

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} \quad (3)$$

显然，由这种定义，力矩大小还是 $M = |\mathbf{r}| |\mathbf{F}| \sin \theta$ ，但是逆时针力矩的方向垂直纸面指向读者，顺时针则相反.

空间力矩

若物体受的若干个受力，且受力点不在一个平面内，或者力方向不在同一平面内，则应该在三维空间内考虑力矩，这时力矩只能是矢量，且仍然定义为式 3. 总力矩等于每个力所产生的力矩的矢量叠加.

力矩的坐标系变换

一般来说，由于受力点的位置矢量 \mathbf{r} 与坐标系的选取有关，现在来看力矩在不同坐标系之间的变换.

在坐标系 A 中，第 i 个受力点的位置矢量为 \mathbf{r}_{Ai} ，物体的合力矩为

$$\mathbf{M}_A = \sum_i \mathbf{r}_{Ai} \times \mathbf{F}_i = \mathbf{0} \quad (4)$$

在另一坐标系 B 中， B 原点指向 A 原点的矢量为 \mathbf{r}_{BA} ，合力矩为

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_B &= \sum_i (\mathbf{r}_{Ai} + \mathbf{r}_{BA}) \times \mathbf{F}_i = \sum_i \mathbf{r}_{Ai} \times \mathbf{F}_i + \sum_i \mathbf{r}_{BA} \times \mathbf{F}_i \\ &= \mathbf{M}_A + \mathbf{r}_{BA} \times \sum_i \mathbf{F}_i \end{aligned} \quad (5)$$

其中最后两步使用了叉乘的分配律^[93]. 由结论可以看出，变换坐标系，力矩需要加上原坐标系相对新坐标系的位移叉乘物体的合力. 由此也可以得出，若物体的合力为零，则力矩与参考系无关.

拓展阅读 角动量定理角动量守恒（单个质点）^[167]

刚体的静力平衡

预备知识 动量定理^[186]，角动量定理^[194]

结论

在任意参考系中，若刚体所受的合力，合力矩都为零，则刚体质心不动或匀速运动，且刚体没有转动或绕质心做匀速转动。

推导

把刚体看做由许多质点组成，合外力为零时刚体动量守恒，而动量等于质心动量^[185] $\mathbf{p}_c = M_c \mathbf{v}_c$ ，所以质心做匀速运动。

合力矩为零时，质点系角动量守恒^[194]，而角动量等于质心的角动量 $\mathbf{L}_c = \mathbf{r}_c \times \mathbf{p}_c$ 加质心系中的角动量（式 5^[192]），而质心匀速运动或不动时质心角动量不变，所以质心系中刚体的角动量也不变，所以刚体绕质心做匀速转动或不转动。

角动量

预备知识 动量的定义, 矢量的叉乘^[93]

单质点的角动量

一个质点的质量为 m , 某时刻速度为 \mathbf{v} , 则其动量为 $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. 在三维空间中建立惯性系^[157], 原点为 O , O 点到质点的位置矢量为 \mathbf{r} . 定义该质点关于 O 点的角动量为

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (1)$$

由叉乘的几何定义^[93] 可知, 当速度与位矢平行时角动量为 $\mathbf{0}$, 垂直时角动量模长为距离和动量模长的积 $L = rp$.

角动量叠加

角动量是矢量, 若把系统看做质点系, 则总角动量等于所有质点的角动量矢量叠加.

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}_i = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \quad (2)$$

角动量的坐标系变换

可类比力矩的坐标系变换 (式 5), 坐标系 A 中总角动量为

$$\mathbf{L}_A = \sum_i \mathbf{r}_{Ai} \times \mathbf{p}_i \quad (3)$$

变换到坐标系 B 中, 总角动量为

$$\mathbf{L}_B = \sum_i (\mathbf{r}_{BA} + \mathbf{r}_{Ai}) \times \mathbf{p}_i = \mathbf{r}_{BA} \times \sum_i \mathbf{p}_i + \mathbf{L}_A \quad (4)$$

角动量的分解

质心系中的角动量为

$$\mathbf{L}_0 = \sum_i \mathbf{r}_{ci} \times \mathbf{p}_i \quad (5)$$

定义质心角动量为“质心处具有系统总质量 M 的质点的角动量”(类比质心动量的定义)

$$\mathbf{L}_c = \mathbf{r}_c \times (M\mathbf{v}_c) = \mathbf{r}_c \times \mathbf{p}_c \quad (6)$$

现在我们变换到任意坐标系中, 令总角动量为 \mathbf{L} , 由式 4 得

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}_c \times \sum_i \mathbf{p}_i + \mathbf{L}_0 \quad (7)$$

由于系统总动量 $\sum_i \mathbf{p}_i$ 等于质心动量 \mathbf{p}_c , 右边第一项等于质心角动量式 6. 最后得到

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_c + \mathbf{L}_0 \quad (8)$$

所以任何坐标系中, 系统的总角动量等于质心角动量加质心系中的角动量.

角动量定理 角动量守恒

预备知识 角动量定理 角动量守恒（单个质点）[\[167\]](#)，牛顿第三定律[\[157\]](#)

角动量定理可以表示为

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{M} \quad (1)$$

即系统的角动量对时间的变化率等于所受外力的合力矩。系统可以包括任意选定的物体，系统外物体对系统内物体的力叫做外力，系统内物体的相互作用力叫做内力。

推导

推导可类比动量定理[\[186\]](#)。我们已经知道单个质点的角动量，而任何物体都可以划分成若干足够小的微元，每个微元可以看成一个质点。令第 i 个质点的角动量为 \mathbf{L}_i ，力矩为 \mathbf{M}_i ，单个质点的角动量定理[\[167\]](#) 为

$$\frac{d\mathbf{L}_i}{dt} = \mathbf{M}_i = \mathbf{M}_i^{in} + \mathbf{M}_i^{out} \quad (2)$$

其中 \mathbf{M}_i^{in} 和 \mathbf{M}_i^{out} 为质点 i 受到的系统内其他质点的力矩和来自系统外的力矩。将该式对所有 i 求和，得到总角动量 \mathbf{L} 变化率

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \sum_i \frac{d\mathbf{L}_i}{dt} = \sum_i \mathbf{M}_i^{in} + \sum_i \mathbf{M}_i^{out} \quad (3)$$

现在我们只需证明质点系的合内力矩为零即可

$$\sum_i \mathbf{M}_i^{in} = \sum_i \mathbf{r}_i \times \sum_j^{j \neq i} \mathbf{F}_{j \rightarrow i} = \sum_{i,j}^{i \neq j} \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{j \rightarrow i} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{F}_{j \rightarrow i}$ 是质点 j 对质点 i 的力。现在只考虑任意两个质点 k 和 l ，在求和中的贡献为

$$\mathbf{r}_k \times \mathbf{F}_{l \rightarrow k} + \mathbf{r}_l \times \mathbf{F}_{k \rightarrow l} \equiv \mathbf{M}_{l \rightarrow k} + \mathbf{M}_{k \rightarrow l} \quad (5)$$

即 k 对 l 的力矩加 l 对 k 的力矩（两质点的和内力矩）。所以若能证明任意两质点的和内力矩为零，则质点系的合内力矩为零。

我们先来看几何证明。如图 1，根据定义，力矩的大小等于力的模长乘以力臂的长度^[189]，而一对相互作用力的大小相同，又由于二者共线，力臂也重合，所以两个力矩大小相等。但是两个力矩的方向一个是顺时针（指向纸内），一个是逆时针（指向纸外），所以两力矩互相抵消，相加为零。

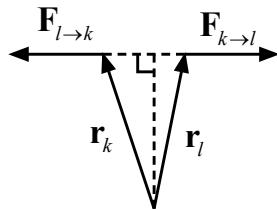


图 1：两质点的相互作用力对总力矩贡献为零

再看代数的方法：我们先沿着两质点的连线写出相互作用力 $\mathbf{F}_{l \rightarrow k} = \alpha(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)$, $\mathbf{F}_{k \rightarrow l} = \alpha(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k)$, 直接计算总角动量得

$$\mathbf{r}_k \times \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l) + \mathbf{r}_l \times \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k) \quad (6)$$

刚体的转动 转动惯量

预备知识 角动量定理^[194]

设刚体绕光滑轴转动。这里令轴的方向为 z ，假设轴光滑，则轴对刚体可施加 x, y 两个方向的力矩，却不能施加 z 方向的力矩（或者说任何 z 方向的力矩都被轴的反力矩抵消）。所以根据角动量定理，角动量的 z 分量守恒。

对于单个质点， $L_z = (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\mathbf{z}}$ 。首先把质点的位矢在水平方向和竖直方向分解， $\mathbf{r} = \mathbf{r}_z + \mathbf{r}_{\perp}$ 。由于 \mathbf{p} 一直沿水平方向，根据叉乘的几何定义， $\mathbf{r}_z \times \mathbf{p}$ 也是沿水平方向，只有 $\mathbf{r}_{\perp} \times \mathbf{p}$ 沿 z 方向。另外，在圆周运动中，半径始终与速度垂直，所以 \mathbf{r}_{\perp} 始终与 \mathbf{p} 垂直。得出结论

$$L_z = |\mathbf{r}_{\perp}| |\mathbf{p}| = mr_{\perp}v = mr_{\perp}^2\omega \quad (1)$$

若把刚体分成无数小块，每小块的质量分别为 m_i ，离轴的距离 $r_{\perp i} = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ ，则刚体的角动量 z 分量为

$$L_z = \omega \sum_i m_i r_{\perp i}^2 \quad (2)$$

用积分写成

$$L_z = \omega \int r_{\perp}^2 dm = \omega \int r_{\perp}^2 \rho dV \quad (3)$$

定义刚体的绕轴转动惯量为

$$I = \int r_{\perp}^2 dm \quad (4)$$

则刚体沿轴方向的角动量为

$$L_z = I\omega \quad (5)$$

常见几何体的转动惯量

预备知识 转动惯量

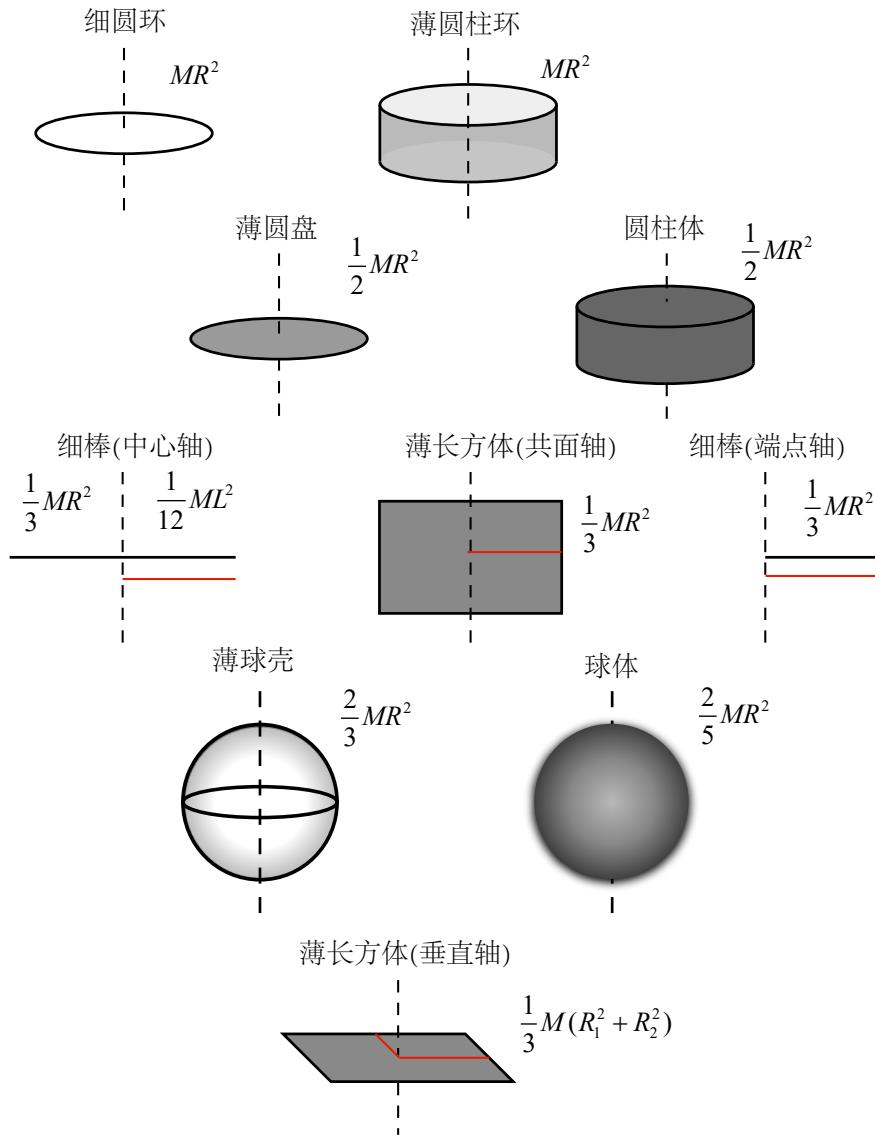


图 1: 常见几何体的转动惯量, 虚线为转轴, 物体质量 M 均匀分布, R 为几何体的半径或红线标注的长度.

细圆环 薄圆柱环

细圆环和薄圆柱环的所有质量与转轴的距离都为 R , 可以看成许多质点的叠加, 每个质点转惯量为 $m_i R^2$, 所以

$$I = \sum_i m_i R^2 = MR^2 \quad (1)$$

细棒 (端点轴)

细棒的线密度为 $\lambda = M/L$, 如果划分成长度为 dr 的小段, 第 i 段距离转轴 r_i

细棒 (中心轴) 薄长方体 (共面轴)

细棒 (中心轴) 可以看做两个等质量的细棒 (端点轴), 质量分都为 M_1 , 每个具有转动惯量 $M_1 R^2/3$, 总转动惯量为 $2M_1 R^2/3 = MR^2/3$. 由此可以看出, 若一个物体可以拆分成转动惯量相同的若干部分, 那么转动惯量公式不变. 薄长方体 (共面轴) 可以看成许多许多细棒 (中心轴) 组成, 所以转动惯量的系数仍然为 $1/3$. 注意一些教材中使用细棒的总长度 $L = 2R$, 则转动惯量为 $ML^2/12$.

薄圆盘 圆柱

薄圆盘可以看做许多宽度为 dr 的细圆环组成¹, 质量面密度为 $\sigma = M/\pi R^2$, 第 i 个圆环的半径为 r_i , 面积为 $2\pi r_i dr$, 总转动惯量为

$$I = \sum_i r_i^2 dm_i = \sum_i r_i^2 \cdot \sigma \cdot 2\pi r_i dr = 2\pi\sigma \sum_i r_i^3 dr = 2\pi\sigma \int_0^R r^3 dr \quad (2)$$

也可以在极坐标中直接根据定义写出积分

$$I = \int r^2 \sigma ds = \int_0^{2\pi} \int_0^R \sigma r^2 \cdot r dr d\theta = 2\pi\sigma \int_0^R r^3 dr = \frac{1}{2}\sigma\pi R^2 R^2 = \frac{1}{2}MR^2 \quad (3)$$

圆柱可看做许多相同的薄圆盘组成, 转动惯量系数相同.

¹然而不能看做由许多过圆心的细棒组成, 因为这样面密度就是不均匀的. 另外注意每个细环的转动惯量并不相同 (因为半径各不相同), 所以不能直接用圆环的转动惯量公式.

薄球壳

球壳可以看做许多细圆环组成, 质量面密度为 $\sigma = M/4\pi R^2$, 球坐标中, 令第 i 个圆环对应的极角为 θ , 宽度为 $R d\theta$, 面积为 $ds_i = 2\pi R \sin \theta_i \cdot R d\theta$, 半径为 $r_i = R \sin \theta_i$, 总转动惯量为

$$\begin{aligned} I &= \sum_i r_i^2 dm_i = \sum_i R^2 \sin^2 \theta_i \cdot \sigma \cdot 2\pi R \sin \theta_i \cdot R d\theta \\ &= 2\pi \sigma R^4 \sum_i \sin^3 \theta_i d\theta = 2\pi \sigma R^4 \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \end{aligned} \quad (4)$$

也可以在球坐标中直接写出球面积分

$$\begin{aligned} I &= \int r^2 \sigma ds = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (R \sin \theta)^2 \cdot \sigma \cdot R^2 \sin \theta d\theta d\phi = 2\pi \sigma R^4 \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \\ &= 2\pi \sigma R^4 \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \theta) d\cos \theta = \frac{2}{3} (\sigma 4\pi R^2) R^2 = \frac{2}{3} MR^2 \end{aligned} \quad (5)$$

其中对 θ 的积分使用了换元积分法.

球体

球体可以看做许多薄球壳组成, 体密度为 $\rho = M/(4\pi R^3/3)$, 令第 i 个球壳半径为 r_i , 厚度为 dr , 体积为 $4\pi r_i^2 dr$, 总转动惯量为

$$I = \sum_i \frac{2}{3} m_i r_i^2 = \frac{2}{3} \sum_i \rho V_i r_i^2 = \frac{2M}{R^3} \sum_i r_i^4 dr = \frac{2M}{R^3} \int_0^{+\infty} r^4 dr \quad (6)$$

也可以在球坐标中直接体积分

$$\begin{aligned} I &= \int (r \sin \theta)^2 dm = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R (r \sin \theta)^2 \sigma r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \\ &= \frac{3M}{2R^3} \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \int_0^R r^4 dr = \frac{2M}{R^3} \int_0^R r^4 dr = \frac{2}{5} MR^2 \end{aligned} \quad (7)$$

其中对 θ 的积分使用了换元积分法.

薄长方体 (垂直轴)

由“薄长方体 (共面轴)”可知两个共面方向的转动惯量分别为 $MR_1^2/3$ 和 $MR_2^2/3$, 使用平行轴定理可得关于垂直轴的转动惯量为二者之和

$$I = \frac{1}{3} (MR_1^2 + MR_2^2) \quad (8)$$

刚体的运动方程

预备知识 动量定理^[186], 角动量定理^[194]

结论

任意惯性系中, 若刚体质量为 M , 质心为 \mathbf{r}_c , 刚体受若干个力 \mathbf{F}_i , 作用点分别为 \mathbf{r}_i , 若刚体只延一个固定的方向转动 (如刚体的二维运动), 且该方向关于质心的转动惯量为 I , 则质心运动方程和绕质心转动的方程分别为

$$M\mathbf{a}_c = \sum_i \mathbf{F}_i \quad (1)$$

$$I\boldsymbol{\alpha} = \sum_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{F}_i \quad (2)$$

其中 \mathbf{a}_c 是质心的加速度, $\boldsymbol{\alpha}$ 是绕质心转动的角加速度. 这是说, 我们可以把刚体的运动分解成质心的移动和相对质心的转动, 并用合力计算前者, 用关于质心的合力矩计算后者.

推导

我们把刚体看做质点系来证明, 在任意惯性系中, 由动量定理, 刚体总动量, 即质心动量 \mathbf{p}_c 的变化率为

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_c = M\mathbf{a}_c = \sum_i \mathbf{F}_i \quad (3)$$

现在我们用角动量定理证明式 2. 由于质心与刚体的相对位置不变, 质心系中刚体必须绕质心转动, 且角动量为 $\mathbf{L}_c = I\boldsymbol{\omega}$, 角动量变化率为²

$$\frac{d\mathbf{L}_c}{dt} = I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = I\boldsymbol{\alpha} \quad (4)$$

²注意第一步成立的条件是 I 不变, 而一般情况下 I 与刚体的转轴有关, 所以只能假设刚体延同一方向转动. 唯一的例外是物体的转动惯量与方向无关的情况, 例如球体. 刚体的变向转动较为复杂, 不做讨论.

要特别注意的是，除非合力为零，质心系并不是惯性系，所以使用角动量定理要考虑刚体的惯性力。但幸运的是质心系中惯性力 $-m_i \mathbf{a}_c$ 产生的合力矩为零

$$\sum_i \mathbf{r}_{ci} \times (-m_i \mathbf{a}_c) = \mathbf{a}_c \times \sum_i m_i \mathbf{r}_{ci} = \mathbf{0} \quad (5)$$

现在我们可以继续角动量定理^[194] 得

$$I\boldsymbol{\alpha} = \sum_i \mathbf{r}_{ci} \times \mathbf{F}_i \quad (6)$$

由于质心系相对于任何惯性系没有相对转动，所以在任意惯性系中刚体的角加速度仍然为 $\boldsymbol{\alpha}$ 。但受力点的位矢变为 $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_c + \mathbf{r}_{ci}$ ，即

$$I\boldsymbol{\alpha} = \sum_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{F}_i \quad (7)$$

思考题：一根质量为 M 长为 L 的均匀细棒延 y 方向静止放置在水平面 xy ，从 $t = 0$ 时起在其上端施加一个 x 方向的恒力，描述细棒如何运动。如果木棒与地面的摩擦系数为 μ ，答案又如何？

浮力

等效法

我们先用一个简单易懂的方式解释浮力

散度法

第三章

振动与波动

平面波的复数表示

预备知识 振动的复数形式

用复数表示波函数，往往可以化简书写和计算，所以许多教材都使用复数表示波动或振动。复变函数在物理学中的一个最广泛的应用就是通过欧拉公式把三角函数写成指数函数的形式。

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad (1)$$

在经典力学和电磁学中，我们默认用复变函数的实部表示某个波动的物理量。所以波函数 $A \cos(kx - \omega t)$ 可以表示为

$$A e^{i(kx - \omega t)} \quad (2)$$

注意虚部无物理意义。又例如向 \mathbf{k} 方向传播的平面波 $A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ 可表示为

$$A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (3)$$

用指数函数表示波动的一个优势在于可以用两个指数函数相乘将其相位叠加。例如

$$A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \phi_0)} = A e^{i\phi_0} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t} \quad (4)$$

可以定义复振幅 $\tilde{A} = A e^{i\phi_0}$ 用于同时表示振幅和初相位。另外 $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ 只是空间坐标的函数，不妨叫空间因子， $e^{-i\omega t}$ 叫时间因子。要注意的是， $e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$ 和 $e^{i(-\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \omega t)}$ 的实部一样，表示同样的波函数，但习惯上总把时间因子写为 $e^{-i\omega t}$ 的形式。

第四章

天体运动与中心力场

万有引力 引力势能

预备知识 极坐标系的定^[6], 力场 势能^[161], 牛顿运动定律^[157]

万有引力

若两个质点质量分别为 m_1 和 m_2 , 位置矢量分别为 \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 , 则 1 对 2 的万有引力 (gravitational force) 为

$$\mathbf{F}_{12} = -\frac{Gm_1m_2}{r_{12}^2}\hat{\mathbf{r}}_{12} = -\frac{Gm_1m_2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|^3}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \quad (1)$$

其中 $r_{12} = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ 是两点间的距离, $\hat{\mathbf{r}}_{12} = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)/|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ 是从 1 指向 2 的单位矢量. 由该式, 2 对 1 的万有引力为 $\mathbf{F}_{21} = -\mathbf{F}_{12}$, 符合牛顿第三定律.

万有引力势能

在寻找万有引力的势能以前, 我们先来证明所有具有 $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = F(r)\hat{\mathbf{r}}$ 形式的力场都是保守场^[161]. 质点延一段轨迹 \mathcal{L} 从 \mathbf{r}_1 移动到 \mathbf{r}_2 时, 力场对质点做功^[159] 可以用线积分^[121] 表示 (以 r 作为参数)

$$W = \int_{\mathcal{L}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{r_1}^{r_2} F(r) dr \quad (2)$$

其中第二步是因为

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = F(r)\hat{\mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r} = F(r)\hat{\mathbf{r}} \cdot (dr\hat{\mathbf{r}} + r d\theta \hat{\theta}) = F(r) \cdot dr \quad (3)$$

显然线积分的结果至于初末位置 (与原点的距离) 有关, 而与路径 \mathcal{L} 的选择无关, $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 是保守力场.

现在我们来寻找引力对应的势能. 假设质量为 M 的质点固定在坐标原点, 考察质量为 m 的质点位置矢量为 \mathbf{r} . 由于场对物体做功等于初势能减末势能^[161] 令质点沿着引力场从 \mathbf{r}_1 延任意曲线移动到 \mathbf{r}_2 , 我们有

$$V(\mathbf{r}_1) - V(\mathbf{r}_2) = \int_{r_1}^{r_2} F(r) dr = -GMm \int_{r_1}^{r_2} \frac{1}{r^2} dr = -GMm \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) \quad (4)$$

可见任意位置的势能函数可以取

$$V(\mathbf{r}) = V(r) = -\frac{GMm}{r} \quad (5)$$

根据势能的定义也可以给 $V(\mathbf{r})$ 加上任意常数，但习惯上我们令无穷远处势能为 0，而上式恰好满足这点。拓展到任意具有 $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = F(r)\hat{\mathbf{r}}$ 形式的力场，其势能可以用不定积分得到

$$V = - \int F(r) dr \quad (6)$$

这与一维的情况相同。

我们也可以反过来通过引力势能求出引力场。使用球坐标的梯度算符得

$$\mathbf{F} = \nabla V = GMm \left(\hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \frac{1}{r} = -\frac{GMm}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (7)$$

也可以使用直角坐标的梯度

$$\mathbf{F} = \nabla V = GMm \left(\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (8)$$

以 x 分量为例

$$\frac{\partial}{\partial x} (x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2} = -x(x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} = -\frac{x}{r^3} \quad (9)$$

另外两个分量类似可得 $-y/r^3$ 和 $-z/r^3$ ，代入式 8 得

$$\mathbf{F} = \nabla V = -\frac{GMm}{r^3} (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}) = -\frac{GMm}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} = -\frac{GMm}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (10)$$

开普勒问题

预备知识 万有引力，椭圆的三种等效定义^[13]，开普勒定律，能量守恒，角动量守恒（单个质点）^[167]

结论

若已知中心天体和行星的质量，假设中心天体不动，能量和角动量可以唯一地确定运行轨道。当能量小于零时运行轨道为椭圆 ($e < 1$)

$$E = -\frac{GMm}{2a} \quad L = bm\sqrt{\frac{GM}{a}} \quad (1)$$

能量等于零时轨道为抛物线 ($e = 1$)，焦距与角动量的关系为 (p 为焦距)

$$L = m\sqrt{2GMp} \quad (2)$$

能量大于零时轨道为双曲线 ($e > 1$).

$$E = \frac{GMm}{2a} \quad L = b\sqrt{2E/m} \quad (3)$$

根据圆锥曲线的性质，对椭圆有 $a^2 = b^2 + c^2$ ，双曲线有 $c^2 = a^2 + b^2$ 现在我们假设已知轨道是椭圆，抛物线和双曲线的一种（开普勒第一定律的证明^[212]），证明以上关系

椭圆轨道

令椭圆轨道距离焦点的最近和最远距离分别为 r_1 和 r_2 ，总能量（动能加势能）守恒

$$\frac{1}{2}mv_1^2 - \frac{GMm}{r_1} = \frac{1}{2}mv_2^2 - \frac{GMm}{r_2} \quad (4)$$

总角动量守恒

$$mv_1r_1 = mv_2r_2 \quad (5)$$

把式 5 中的 v_2 代入式 4，可得

$$v_1^2 = \frac{2GM}{r_1 + r_2} \frac{r_2}{r_1} \quad (6)$$

再代入式4的左边，并使用 $r_1 + r_2 = 2a$ 得到总能量 $E = -GMm/2a$. 把式6代入式5的左边，并使用 $r_1 r_2 = (a+c)(a-c) = b^2$ 得总角动量 $L = bm\sqrt{GM/a}$.

双曲线

注意双曲线轨道只可能是双曲线离中心天体所在焦点较近的一支，另一支这里没有物理意义（当引力变为斥力，只能取双曲线的另一支）

总能量守恒

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{1}{2}mv_1^2 - \frac{GMm}{r_1} \quad (7)$$

总角动量守恒

$$mv_0 b = mv_1 r_1 \quad (8)$$

抛物线

抛物线轨道离焦点的最近距离为焦距 p ,

反开普勒问题

预备知识 双曲线的三种等效定义^[15], 天体运动^[208]

考虑电荷为 q , 质量为 m 的轻质点从无穷远处以 v_i 入射到电荷为 Q (同种电荷) 的重质点 (假设始终静止). 轻质点的运动轨迹为双曲线的一支, 重质点的位置为离轨道较远的焦点 (证明见下文).

定义碰撞参量为双曲线的渐近线到焦点的距离, 若轻质点一直做匀速直线运动, 则碰撞参量就是两质点的最近距离. 由双曲线的性质, 碰撞参量等于双曲线的参数 b .

现在推导轨道参数 a, b 与能量 E 和角动量 L 的关系. 轨道离焦点的最近距离为

$$r_0 = a + c \quad (1)$$

对应的速度为 v_0 , 由能量守恒得

$$\frac{1}{2}mv_i^2 = \frac{1}{2}mv_0^2 + \frac{kQq}{r_0} \quad (2)$$

由角动量守恒得

$$mv_i b = mv_0 r_0 \quad (3)$$

双曲线的三个参数满足

$$a^2 + b^2 = c^2 \quad (4)$$

联立式 1 到式 4 解得

$$E = \frac{kQq}{2a} \quad L = b\sqrt{\frac{2E}{m}} = b\sqrt{\frac{kQq}{ma}} \quad (5)$$

注意若把平方反比力的系数 kQq 换成 GMm , 上式的结论与行星的双曲线轨道一致.

轨道方程推导

罗瑟福散射

预备知识 反开普勒问题^[210], 散射^[210]

看做经典散射, 微分截面等于

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b \, db \, d\phi}{\sin \theta \, d\theta \, d\phi} = \frac{b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} \quad (1)$$

由双曲线性质, 偏射角满足

$$\cot \frac{\theta}{2} = \frac{b}{a} \quad (2)$$

由反开普勒问题 $E = kQq/2a$, 消去 a 得

$$b = \frac{kQq}{2E} \cot \frac{\theta}{2} \quad (3)$$

求导代入微分截面得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{kQq}{4E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (4)$$

开普勒第一定律的证明

预备知识 圆锥曲线的极坐标方程^[11], 极坐标加速度, 牛顿第二定律, 微分方程简介, 二阶常系数非齐次微分方程的通解^[70]

数学模型

由于太阳质量远大于其他行星, 近似认为太阳不动. 由于太阳和行星相对于行星轨道来说大小可以忽略, 把他们当做质点(另见球体的平方反比力). 以太阳为原点建立平面极坐标系, 行星在该平面上运动, 且仅受万有引力一个外力. 现证明行星的运动轨迹是椭圆, 且焦点在原点.

结论

行星轨道是以中心天体为焦点的任意圆锥曲线¹. 极坐标中, 圆锥曲线的方程^[11]为

$$r = \frac{p}{1 - e \cdot \cos \theta} \quad (1)$$

令太阳(中心天体)在坐标原点, 则行星沿该轨道运行.

证明

极坐标中径向和角向的加速度公式分别为

$$a_r = \frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 \quad (2)$$

$$a_\theta = \frac{1}{r} \frac{d}{dt} \left(r^2 \frac{d\theta}{dt} \right) \quad (3)$$

根据牛顿第二定律和万有引力定律, 由于行星只受到沿径向的万有引力, 则有

$$ma_r = -G \frac{Mm}{r^2} \quad (4)$$

¹所以行星轨道不一定是椭圆, 也可以是抛物线或者双曲线, 但是抛物线或双曲线轨道是从无穷远来到无穷远去的轨道, 不会绕太阳旋转. 所以开普勒定律作为行星运动的经验公式, 只描述了椭圆.

$$ma_\theta = 0 \quad (5)$$

在式 4 和式 5 中同除 m , 代入式 2 和式 3 得

$$\frac{d^2r}{dt^2} - r \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = -\frac{GM}{r^2} \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt} \left(r^2 \frac{d\theta}{dt} \right) = 0 \quad (7)$$

现在用式 6, 式 7 消去 t . 式 7 括号内部不随时间变化, 令其等于常数 h

$$r^2 \frac{d\theta}{dt} = h \quad (8)$$

其中 h 为任意常数. 我们想得到 r 关于 θ 的微分方程, 就要把所有的时间导数消去. 首先可以把 r 看做复合函数 $r(\theta(t))$ 用链式法则把式 6 的第一项用 $d\theta/dt$ 表示

$$\begin{aligned} \frac{d^2r}{dt^2} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{dr}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} \right) = \frac{d}{d\theta} \left(\frac{dr}{d\theta} \right) \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{dr}{d\theta} \frac{d^2\theta}{dt^2} \\ &= \frac{d^2r}{d\theta^2} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{dr}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{d\theta}{dt} \right) \frac{d\theta}{dt} \end{aligned} \quad (9)$$

然后把式 8 两边同除 r^2 并代入式 6 消去所有时间导数, 得到 r 关于 θ 的微分方程

$$\frac{d^2r}{d\theta^2} \left(\frac{h}{r^2} \right)^2 + \frac{dr}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{h}{r^2} \right) \frac{h}{r^2} - r \left(\frac{h}{r^2} \right)^2 = -\frac{GM}{r^2} \quad (10)$$

化简得

$$\frac{h^2}{r^4} \left[\frac{d^2r}{d\theta^2} + r^2 \frac{dr}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{1}{r^2} \right) - r \right] = -\frac{GM}{r^2} \quad (11)$$

这就是 r 关于 θ 的微分方程

将式 1 代入, 可验证式 1 是该方程的解. 当然, 在事先不知道轨道方程的情况下, 也可以直接解该方程. 令

$$u \equiv \frac{1}{r} \quad (12)$$

代入式 11, 得到 u 关于 θ 的微分方程

$$h^2 \left(\frac{d^2u}{d\theta^2} + u \right) = GM \quad (13)$$

这就是比耐公式，是一个二阶常系数非齐次微分方程，通解^[70] 为

$$u = \frac{1}{p} [1 - e \cos(\theta + \varphi)] \quad (14)$$

其中

$$p = \frac{h^2}{GM} \quad (15)$$

e, φ, h 为任意常数。写成关于 r 的函数，得到圆锥曲线

$$r = \frac{p}{1 - e \cos \theta} \quad (16)$$

证毕。

拓展阅读 比耐公式^[217]

开普勒第二定律的证明

预备知识 角动量定理 角动量守恒（单个质点）[\[167\]](#)

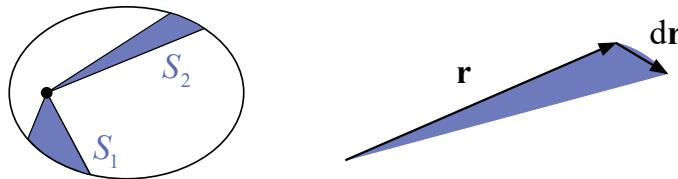


图 1: 左: 相同时长扫过的面积 右: 微小时间 dt 扫过的面积

令行星的位矢为 \mathbf{r} , 在很小一段时间 dt 内移动了 $d\mathbf{r}$, 于是扫过的面积就是以 \mathbf{r} 和 $d\mathbf{r}$ 为两条边的三角形的面积 $dS = 1/2 |\mathbf{r}| \cdot |d\mathbf{r}| \sin \theta$, 其中 θ 为两条矢量的夹角. 若把面积看成矢量, 方向垂直于三角形所在的平面, 则根据叉乘的定义有 $d\mathbf{S} = \mathbf{r} \times d\mathbf{r}/2$. 两边除以 dt , 得扫过面积的速率为

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (1)$$

由单个质点的角动量守恒[\[167\]](#), 行星角动量不变. $\mathbf{r} \times (m\mathbf{v}) = \mathbf{L}$ (常矢量, 垂直运动平面) 所以 $d\mathbf{S}/dt = \mathbf{L}/2m$ 也是常矢量. 写成标量形式, 即

$$\frac{dS}{dt} = \frac{L}{2m} \quad (2)$$

所以从任意时刻 t_0 开始, 在一段时间 Δt 内行星扫过的面积为

$$\Delta S = \frac{L}{2m} \Delta t \quad (3)$$

只和时间间隔有关, 而与起始位置无关.

开普勒第三定律的证明

方法一：

预备知识 开普勒第一定律证明；开普勒第二定律证明

在开普勒第一定律证明中，得出行星轨道的极坐标方程为

$$r = \frac{p}{1 - e \cdot \cos \theta} \quad (1)$$

其中 $p = h^2/GM$, h 是行星的角动量与质量之比, G 是引力常数, M 是中心天体的质量. e 是圆锥曲线的离心率, 当 $0 \leq e < 1$ 时, 轨道是椭圆, 取等号时, 轨道是圆的.

椭圆的半长轴为

$$a = \frac{1}{2} (r(0) + r(\pi)) = \frac{1}{1 - e^2} \frac{h^2}{GM} \quad (2)$$

椭圆的半短轴为

$$b = a\sqrt{1 - e^2} = \frac{1}{\sqrt{1 - e^2}} \frac{h^2}{GM} \quad (3)$$

椭圆的面积为

$$S = \pi ab = \frac{\pi}{\sqrt{(1 - e^2)^3}} \frac{h^4}{(GM)^2} \quad (4)$$

由开普勒第二定律证明中的结论, 单位时间扫过的面积为

$$\frac{dS}{dt} = \frac{L}{2m} = \frac{h}{2} \quad (5)$$

其中 L 是角动量, m 是行星的质量.

所以行星的周期为

$$T = S \sqrt{\frac{dS}{dt}} = \sqrt{\frac{2\pi}{(1 - e^2)^3}} \frac{h^3}{(GM)^2} \quad (6)$$

所以由式 2 与式 6 得 $T^2/a^3 = 4\pi^2/GM$ 是一个常数, 但注意这个常数与中心天体的质量有关, 所以不同中心天体的比例常数不同.

这个比例系数不用记忆, 需要用时, 只需用高中的知识计算天体圆周运动时的特例即可. 在注意圆作为特殊的椭圆, 其半长轴就是半径.

比耐公式

预备知识 开普勒第一定律证明[\[212\]](#)

若质量为 m 的质点受有心力 $f(r)$ (规定引力为负, 斥力为正) 时, 若运动轨道用极坐标方程表示为 $r(\theta)$. 且令 $u(\theta) = 1/r(\theta)$, 且把 $f(r)$ 中的 r 替换成 u , 令其为 $f(r) = f(1/u) = F(u)$. 则有以下微分方程.

$$h^2 u^2 \left(\frac{d^2 u}{d\theta^2} + u \right) = -\frac{F(u)}{m} \quad (1)$$

这方程叫做**比耐公式 (Binet Equation)**. 其中 $h = r^2 d\theta/dt$ 是质点对力心的角动量比质量, 对一个质点的一条轨道来说, 是一个常数.

推导

在开普勒第一定律证明中, 式(14)列出了 u (行星到中心天体的距离的倒数) 与 θ (行星围绕中心天体转过的角度) 的微分方程.

$$h^2 u^2 \left(\frac{d^2 u}{d\theta^2} + u \right) = GMu^2 \quad (2)$$

注意等号右边是行星受到中心天体的万有引力. 一个质点受到有心力 $F(u)$, 只有两个可能的方向, 现规定向外为正, 向内为负. 所以式2变为

$$h^2 u^2 \left(\frac{d^2 u}{d\theta^2} + u \right) = -\frac{F(u)}{m} \quad (3)$$

事实上, 当 $F(u)$ 是其他函数时, 例如大小与 r 成正比 (橡皮绳), 经过同样的推导, 也可以得到式3. 所以式3描述了一个质点受到有心力时的运动情况, 通过解这个方程, 就可以求出质点的运动轨迹.

第五章

理论力学

拉格朗日方程

预备知识 牛顿第二定律^[157], 偏导数, 矢量偏导, 点乘的求导法则

若系统的状态可以由几个独立的广义坐标 (**generalized coordinates**) $q_i(t)$ ($i = 1, 2 \dots$) 和时间 t 的函数描述, 则广义坐标关于时间的函数可通过拉格朗日方程 (**Lagrange equation**) ¹解出.

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2 \dots) \quad (1)$$

其中 L 是系统的拉格朗日量 (**lagrangian**), 等于系统动能减势能.

$$L(q_1, q_2 \dots, \dot{q}_1, \dot{q}_2 \dots, t) = T - V \quad (2)$$

拉格朗日力学与牛顿力学完全等效, 其优势在于, 第一, 只需写出拉格朗日量, 就可由简单求导得到完整的动力学微分方程而无需进行受力分析. 第二, 方程的形式不随广义坐标的选取而改变. 第三, 无需解方程即可以得到一些守恒量.

例 1 单个质点

若把一个质点作为系统, 其直角坐标 x, y, z 就可以看做一组广义坐标, 把他们看做时间的函数 $x(t), y(t), z(t)$, 则三个函数完整地描述了每个时刻质点的位置. 三个函数对时间的导数 (即速度的三个分量) 记为 $\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}$, 则质点的动能为 $T = m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)/2$. 令质点的势能为 $V(x, y, z, t)$, 拉格朗日量为

$$L(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, t) = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(x, y, z, t) \quad (3)$$

现在列出 x 坐标的拉格朗日方程, 把上式对 \dot{x} 求偏导 ($y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, t$ 看做常数, 对 \dot{x} 求导), 再对时间求导得

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\ddot{x} \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\ddot{x} \quad (4)$$

¹也叫欧拉-拉格朗日方程 (**Euler-Lagrange Equation**)

再把拉格朗日量对 x 求偏导得

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (5)$$

以上两式代入拉格朗日方程，使用 x 方向分力与势能的关系 $F_x = -\partial V / \partial x$ ，得到 x 分量上的牛顿第二定律

$$m\ddot{x} = F_x \quad (6)$$

y 和 z 坐标的拉格朗日方程也可以得到对应的牛顿第二定律。三个分量的牛顿第二定律结合初始时刻的位置和速度就可以解出函数 $x(t), y(t), z(t)$.

例 2 中心力场问题

仍然以一个质点作为系统，假设质点在一个平面内运动，使用极坐标 r, θ 为广义坐标，假设势能只是 r 的函数 $V(r)$ ，极坐标系中质点的速度为

$$\mathbf{v} = \dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\dot{\theta}\hat{\theta} \quad (7)$$

动能等于

$$T = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) \quad (8)$$

类似于例 1，两个广义坐标对应的拉格朗日方程分别为

$$m\ddot{r} = mr\dot{\theta}^2 - \frac{\partial V}{\partial r} \quad (9)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2\dot{\theta}) = 0 \quad (10)$$

这是一个常微分方程组，直接求解较为复杂。但注意第二条方程等号右边为零，可以先对两边不定积分得

$$mr^2\dot{\theta} = L \quad (11)$$

其中 L 为任意常数。根据角动量的定义^[192]，结合式 7 不难发现 L 就是质点的角动量，所以式 10 就是角动量守恒。

守恒量通常可以简化问题，若已知初始条件 $r(0), \theta(0), \dot{r}(0), \dot{\theta}(0)$ ，可先算出角动量 L ，再把式 11 代入式 9 消去 $\dot{\theta}$ 得到关于 r 的单变量微分方程，进而解出 $r(t), \theta(t)$ 。

在该例中出现了一个守恒量（**conserved quantity**），原因是式 10 右边为零，即 θ 对应的拉格朗日方程右边为零

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = 0 \quad (12)$$

即拉格朗日量与 θ 无关（或者表述成“不含 θ ”）。总结到更一般的情况，就是

若拉格朗日量与某个广义坐标无关，则拉格朗日量对该坐标的偏导数是一个守恒量。

例 3 耦合弹簧振子

如图，三个弹性系数为 k 的弹簧（忽略质量）将两个质量为 m 的质点串联在两个固定点之间，令一个广义坐标为中间弹簧的伸长距离 x ，另一个广义坐标为两质点的质心与其平衡位置的距离 X ，则两质点相对平衡位置的位移分别为

$$x_1 = X - x/2 \quad x_2 = X + x/2 \quad (13)$$

动能为

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_2^2 = m \left(\dot{X}^2 + \frac{1}{4}\dot{x}^2 \right) \quad (14)$$

势能为

$$V = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 = k \left(X^2 + \frac{3}{4}x^2 \right) \quad (15)$$

可求得拉格朗日方程组为

$$m\ddot{x} = -3kx \quad m\ddot{X} = -kX \quad (16)$$

可见该问题中使用这种广义坐标的好处就是两个微分方程都只含有一个变量，易于求解。由“简谐振子^[169]”中的结论可得 $x(t)$ 和 $X(t)$ 的通解为

$$x(t) = x_0 \cos \left(\sqrt{\frac{3k}{m}}t + \phi_x \right) \quad X(t) = X_0 \cos \left(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \phi_X \right) \quad (17)$$

若用 x_1, x_2 坐标结合受力分析列出微分方程，则会得到两条各含两个变量的微分方程。在振动系统中，这种能使方程分离变量的广义坐标叫做**简正坐标**。

以上几个例子中，每个质点的坐标都是独立的，在没有约束时， D 维空间中的 N 质点有 $D \times N$ 个独立的广义坐标。在一些问题中，我们往往会遇到不

同形式的约束，例如当两个质点之间由轻棍连接时，约束方程为 $(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 = L^2$ 这是这两个质点的自由度就由 6 个变为 5 个。约束可以是时间的函数，例如细棍的长度可以是关于时间的长度 $L(t)$ 。这里我们只讨论完整约束，即可以表示成以下形式

$$f_i(q_1, q_2, \dots, q_N, t) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, M) \quad (18)$$

若给 N 个自由度的系统施加 $M < N$ 个完整约束，系统的自由度就变为 $N - M$ 个自由度，并可以用 $N - M$ 个广义坐标描述。

例 4 含时约束

一个无穷长的细杆被固定在原点的转轴上，并在水平面上以角速度 ω 转动。一个质点可以沿细杆无摩擦运动，求质点的运动方程。

首先给细杆定义一个正方向，并取质点的离原点的距离为 x 。质点速度为 $\mathbf{v} = \dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\omega\hat{\theta}$ ，势能为 0。系统的拉格朗日量为

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + x^2\omega^2) \quad (19)$$

代入拉格朗日方程，得到运动方程

$$\ddot{x} = \omega^2 x \quad (20)$$

该函数的通解为

$$x(t) = C_1 e^{\omega t} + C_2 e^{-\omega t} \quad (21)$$

由牛顿第二定律证明拉格朗日方程

注意以下所有的函数偏导都是把 $q_1, q_2 \dots q_N, \dot{q}_1, \dot{q}_2 \dots \dot{q}_N, t$ 作为变量，即对一个变量求导数而把其他变量看做常数。另外，势能 V 和位矢 \mathbf{r}_j 与 \dot{q}_i 无关，偏导为 0。

系统动能为

$$T = \frac{1}{2} \sum_j m_j \mathbf{v}_j^2 = \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \dot{\mathbf{r}}_j \quad (22)$$

由矢量点乘的求导法则

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_i} \quad (23)$$

其中质点 j 的速度可以用全导数^[87] 公式

$$\dot{\mathbf{r}}_j = \sum_k \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} \quad (24)$$

对 \dot{q}_i 求偏导，注意位矢与 \dot{q}_i 无关，所以求偏导时 $\partial r_j / \partial q_k$ 与 $\partial r_j / \partial t$ 可看做常数.

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (25)$$

代入式 23 并对时间求导得到拉格朗日方程的左边（注意 $\partial V / \partial \dot{q}_i = 0$ ）

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_j \ddot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} + \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (26)$$

拉格朗日方程的右边为

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{\partial T}{\partial q_i} - \frac{\partial V}{\partial q_i} \quad (27)$$

其中第一项为

$$\frac{\partial T}{\partial q_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial q_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{d \mathbf{r}_j}{dt} \quad (28)$$

第二项被定义为广义力

$$Q_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i} = \sum_j \left(-\frac{\partial V}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} - \frac{\partial V}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial q_i} - \frac{\partial V}{\partial z_j} \frac{\partial z_j}{\partial q_i} \right) = \sum_j \mathbf{F}_j^{(a)} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (29)$$

其中 $\mathbf{F}_j^{(a)} = -\nabla_j V$ 被称为非约束力. 所以要证明拉格朗日方程，即证明式 26 等于式 28 加式 29，首先需要证明

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{d \mathbf{r}_j}{dt} \quad (30)$$

也就是证明全导数和偏导数运算可对易. 使用全导数^[87] 的定义，以及混合偏导^[81] 的性质，有

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_i} \dot{q}_k + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{d \mathbf{r}_j}{dt} \quad (31)$$

然后我们需要证明

$$\sum_j \left(\mathbf{F}_j^{(a)} - m \ddot{\mathbf{r}}_j \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1 \dots N) \quad (32)$$

即可证明拉格朗日方程. 该式被称为达朗贝尔定理. 注意由于这里的 $\mathbf{F}_j^{(a)}$ 为质点 j 所受的非约束力而不是合力，所以求和项的小括号一般不为 0.

达朗贝尔定理证明

令第 j 个质点所受和力为 $\mathbf{F}_j = \mathbf{F}_j^{(a)} + \mathbf{F}_j^{(c)}$, 两项分别为非约束力和约束力. 由牛顿第二定律 $\mathbf{F}_j - m\ddot{\mathbf{r}}_j = 0$, 所以

$$\sum_j (\mathbf{F}_j^{(a)} + \mathbf{F}_j^{(c)} - m\ddot{\mathbf{r}}_j) \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1 \dots N) \quad (33)$$

现在我们只需证明

$$\sum_j \mathbf{F}_j^{(c)} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1 \dots N) \quad (34)$$

由于以上偏微分中时间保持不变, 约束力不做功, 该求和为零, 证毕.

哈密顿原理

预备知识 拉格朗日方程^[219]

若系统由 N 个独立的广义坐标 $q_1 \dots q_N$ 描述（以下把 $q_1 \dots q_N$ 记为 $\{q_i\}$ ），那么可以把 $\{q_i\}$ 看做是 N 维空间中的一点，这个空间叫做位形空间（configuration space）。系统变化的过程可以看做位形空间中的一点随时间变化而走出的轨迹。若该轨迹 $\{q_i(t)\}$ 已知，可定义 t_1 与 t_2 之间系作用量（action）为

$$S[\{q_i(t)\}] = \int_{t_1}^{t_2} L[q_i(t), \dot{q}_i(t), t] dt \quad (1)$$

哈密顿原理可表述为：若系统在 t_1 和 t_2 时刻的坐标分别为 $\{q_i(t_1)\}$ 和 $\{q_i(t_2)\}$ ，那么在这段时间内所有链接这两点的轨迹中，真实的轨迹可使作用量取极值。注意式 1 中的 S 事实上是 N 个函数的函数，函数的函数叫做泛函。类比一元函数的极值，泛函的极值是指当作为自变量的函数发生微小改变时泛函的因变量不变（或变化小于一阶无穷小）。哈密顿原理也被称为最小作用量原理²。

由哈密顿原理导出拉格朗日方程

假设满足哈密顿原理的轨迹为 $\{q'_i(t)\}$ ，为了让轨迹发生微小改变，现取一个变量 α 及任意 N 个函数 $\{\eta_i(t)\}$ ，令 $q_i(t, \alpha) = q'_i(t) + \alpha \eta_i(t)$ 。由于 α 变化的过程中仍然要保持初末时刻的 q_i 不变， $\eta_i(t)$ 必须满足 $\eta_i(t_1) = \eta_i(t_2) = 0$ 。现在拉格朗日量最终是 t 和 α 的函数，而作用量则完全是 α 的函数。

根据哈密顿原理，在 $\alpha = 0$ 处有 $dS/d\alpha = 0$ 。为书写方便，以下所有对 α 的（偏）导数都默认在 $\alpha = 0$ 时求得。注意 α 在时间积分中只是参数，可以置换求导和积分的顺序。

$$\frac{dS}{d\alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial}{\partial \alpha} L[q_i(t, \alpha), \dot{q}_i(t, \alpha), t] dt \quad (2)$$

²这只是习惯的叫法，极值可以是极小值，极大值或鞍点。

这里使用偏导是为了强调求导时保持 t 不变. 使用偏导的链式法则有

$$\begin{aligned}\frac{dS}{d\alpha} &= \sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \alpha} \right] dt \\ &= \sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial^2 q_i}{\partial \alpha \partial t} \right] dt\end{aligned}\quad (3)$$

由于 t 不变, 第三项为 0. 对第二项使用分部积分^[64] 得

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial^2 q_i}{\partial \alpha \partial t} dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} \right]_{t=t_1}^{t=t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \alpha} dt \quad (4)$$

其中 $\partial q_i / \partial \alpha = \eta_i$, 在 t_1, t_2 时刻都为 0, 第一项消失. 代入式 3 得

$$\sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] \eta_i(t) dt = 0 \quad (5)$$

由于 $\eta_i(t)$ 可以任取, 方括号内为零. 要证明这点只需取 $\eta_i(t) = \delta_{ij} \delta(t - t')$ 代入即可. 于是我们得到拉格朗日方程组

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (i = 1 \dots N) \quad (6)$$

第三部分

其他分册预览

第一章

数学

堆放排列组合

比热力学课本上简单得多的方法推导出这种排列组合来.

题目是这样的,

如果有 n 个不加区分的小球, 有 N 个有编号的盒子 ($N \geq n$), 那么把所有小球都放到盒子里有几种方法 (每个盒子能装的个数没有限制)?

现在把所有的情况根据非空盒子的个数分类. 非空盒子个数可能为 1 个 (n 个小球都在里面), 2 个, 一直到 n 个 (每个盒子只装 1 个). 如果用 i 个盒子装小球, 那么首先从 N 个盒子里面选择 i 个会有 C_N^i 种情况. 然后要考虑的是, 如果用已选的 i 个有编号盒子装 n 个小球, 又有几种情况. 用所谓的插空法得到共有 C_{n-1}^{i-1} 种情况. 所以一个 i 对应 $C_N^i C_{n-1}^{i-1}$ 种情况.

最后把所有不同 i 的情况数加在一起, 得出所有情况的总数为

$$\sum_{i=1}^n C_N^i C_{n-1}^{i-1} \quad (1)$$

又由于 $C_a^b = \frac{a!}{(a-b)!b!} = C_a^{a-b}$, 上式可变为

$$\sum_{i=1}^n C_N^i C_{n-1}^{n-i} \quad (2)$$

又由于 $\sum_i C_a^i C_b^{n-i} = C_{a+b}^n$ (i 取所有可能的整数使得 $i \leq a$, $n - i \leq b$) (见), 上式变为

$$\sum_{i=1}^n C_N^i C_{n-1}^{n-i} = C_{N+n-1}^n = \frac{(N+n-1)!}{n!(N-1)!} \quad (3)$$

这就是最后的答案.

雅可比行列式

若有坐标系变换

$$\begin{cases} x = x(u, v, w) \\ y = y(u, v, w) \\ z = z(u, v, w) \end{cases} \quad (1)$$

根据全微分关系

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial x / \partial u & \partial x / \partial v & \partial x / \partial w \\ \partial y / \partial u & \partial y / \partial v & \partial y / \partial w \\ \partial z / \partial u & \partial z / \partial v & \partial z / \partial w \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中 J 叫做雅可比矩阵.

考虑 uvw 坐标系中的一个体积元 $(u, v, w)(u + du, v + dv, w + dw)$, 一般情况下 (不需要是正交曲线坐标系), 体积元为平行六面体, 起点为 (u, v, w) 的三条棱对应的矢量分别为

$$\begin{pmatrix} dx_1 \\ dy_1 \\ dz_1 \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} du \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{11} \\ J_{21} \\ J_{31} \end{pmatrix} du \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} dx_2 \\ dy_2 \\ dz_2 \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} 0 \\ dv \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{12} \\ J_{22} \\ J_{32} \end{pmatrix} dv \quad (4)$$

$$\begin{pmatrix} dx_3 \\ dy_3 \\ dz_3 \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ dw \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{13} \\ J_{23} \\ J_{33} \end{pmatrix} dw \quad (5)$$

由于平行六面体的体积是同一起点三条矢量的混合积

$$dV = \begin{vmatrix} dx_1 & dy_1 & dz_1 \\ dx_2 & dy_2 & dz_2 \\ dx_3 & dy_3 & dz_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} dx_1 & dx_2 & dx_3 \\ dy_1 & dy_2 & dy_3 \\ dz_1 & dz_2 & dz_3 \end{vmatrix} = |J| du dv dw \quad (6)$$

其中 $|J|$ 叫做雅可比行列式.

Γ 函数

预备知识 定积分^[57]

结论

当 x 取实数且 $x > -1$ 时，可以定义连续的阶乘函数为

$$x! \equiv \Gamma(x+1) = \int_0^{+\infty} t^x e^{-t} dt \quad (1)$$

递推关系仍为

$$x! = x(x-1)! \quad (x > 0) \quad (2)$$

且 $(-1/2)! = \sqrt{\pi}$, $0! = 1$.

推导

首先定义 Γ (**Gamma**) 函数为

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt \quad (3)$$

当 $x \leq 0$ 时该积分在 $x = 0$ 处不收敛，以下仅讨论 x 为正实数的情况¹.

我们现在验证当 x 取正整数时，新定义的阶乘 $x! = \Gamma(x+1)$ 与原来的定义 $x! = x(x-1)..1$ 相同。首先

$$0! = \Gamma(1) = \int_0^{+\infty} e^{-t} dt = 0 - (-1) = 1 \quad (4)$$

使用分部积分法^[64]，令 t^x 为“求导项”， e^{-t} 为积分项，可得递推公式² (式 2)

$$\begin{aligned} x! = \Gamma(x+1) &= \int_0^{+\infty} t^x e^{-t} dt = -t^x e^{-t} \Big|_{t=0}^{t=+\infty} + \int_0^{+\infty} x t^{x-1} e^{-t} dt \\ &= x \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt = x \Gamma(x) = x(x-1)! \end{aligned} \quad (5)$$

¹事实上，自变量为负实数（非整数）时， Γ 函数有另一种定义，这里不讨论。

²该证明仅对 $x > 0$ 适用，这有这样才有 $0^x e^{-0} = 0$ ，使第三个等号成立。

由递推式 5 和初值式 4, 对任意正整数 n 有

$$n! = n(n-1)! = n(n-1)(n-2)! \dots = n(n-1) \dots 1 \quad (6)$$

再来看半整数的阶乘, 我们讨论范围内的最小半整数为 $-1/2$

$$\left(-\frac{1}{2}\right)! = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-x}}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\pi} \quad (7)$$

该积分的计算超出本书范围, 可使用 Wolfram Alpha 或 Mathematica 计算. 对任意大于零的半整数 $n/2$, 有

$$\frac{n}{2}! = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} - 1\right)! = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} - 1\right) \cdots \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right)! = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} - 1\right) \cdots \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (8)$$

高斯分布（正态分布）

预备知识 定积分^[57], 分布函数

结论

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (1)$$

其中 μ 是分布的平均值, σ 是标准差.

推导

高斯分布（Gaussian Distribution）又叫正态分布（Normal Distribution）, 具有如下形式

$$f(x) = A \exp[-\lambda(x-x_0)^2] \quad (2)$$

可见其主要特征就是指数函数中含有 Δx^2 项. 由对称性, 分布函数是关于 $x = x_0$ 的偶函数, 所以平均值显然为 $\mu = x_0$. 首先我们补充两个积分, 由换元积分法^[62] ($x = \sqrt{t}$) 以及 Γ 函数^[231] 的性质得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx = \int_0^{+\infty} t^{-1/2} e^{-t} dt = \left(-\frac{1}{2}\right)! = \sqrt{\pi} \quad (3)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-x^2) dx = \int_0^{+\infty} t^{1/2} e^{-t} dt = \frac{1}{2}! = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right)! = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (4)$$

根据分布函数的归一化条件, 结合式 3 得

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = A \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\lambda(x-x_0)^2] dx = A \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (5)$$

即 $A = \sqrt{\lambda/\pi}$. 再来计算高斯分布的方差, 结合式 4 得

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x-x_0)^2 A \exp[-\lambda(x-x_0)^2] dx = \frac{1}{2\lambda} \quad (6)$$

用式 5 和式 6 解得 $\lambda = 1/(2\sigma^2)$ 和 $A = 1/(\sigma\sqrt{2\pi})$, 代入式 2 可得高斯分布式 1.

散度 散度定理

预备知识 全微分, 矢量场, 体积分, 面积分, 流密度,

我们在矢量场中取一个闭合曲面 \mathcal{S} , 其内部空间记为 \mathcal{V} . 以向外为正方向, 矢量场 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 在闭合曲面的通量 Φ 可以用以下面积分表示, 积分范围默认为 \mathcal{S}

$$\Phi = \oint \mathbf{F} \cdot d\mathbf{a} \quad (1)$$

现在我们把该曲面以其内部一点 \mathbf{r} 为中心按比例不断缩小, 若通量与体积 V 的比值存在极限, 就把该极限叫做该点的散度 (divergence), 用 $\nabla \cdot$ 算符³ 记为 (下文将介绍)

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) \equiv \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\Phi}{V} \quad (2)$$

若场的分布连续且光滑, 则该极限处处存在且与曲面的形状无关⁴, 我们就得到了矢量场的散度场 (注意是标量场).

例 1 匀速水流

假设密度不变的水以匀速流动, 质量的流密度场 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ 为恒定场. 对于任何一个闭合曲面, 流入的流量 (负值) 和流出的流量 (正值) 相等, 总通量为零.

例 2 变速水流

在例 1 中, 流密度场随 x 坐标线性增加, $\mathbf{j} = (j_0 + \alpha x)\hat{x}$ (α 为常数), 那么取一个边长为 h 的立方体表面作为闭合曲面, 从左侧的流量为 $\Phi_L = -(j_0 + \alpha x_0)h^2$, 右侧的流量为 $\Phi_R = [j_0 + \alpha(x_0 + h)]h^2$, 其余四个面与 \mathbf{j} 平行, 没有流量. 闭合曲面的总流量为 $\Phi = \alpha h^3 = \alpha V$. 根据定义, 水流的散度处处为 α . 分析可发现该水流中单位体积单位时间必然会凭空产生质量为 α 的水 (虽然实际中不可能). 所以散度也叫源密度 (source density) .

³ 符号 ∇ 的名字为 nabla, 作为算符时读作 del, 一些教材也会在上方加矢量箭头, 原因见下文.

⁴ 本书不作证明

直角坐标系中的散度

若在直角坐标系中给出矢量场

$$\mathbf{F}(x, y, z) = F_x(x, y, z)\hat{\mathbf{x}} + F_y(x, y, z)\hat{\mathbf{y}} + F_z(x, y, z)\hat{\mathbf{z}} \quad (3)$$

令闭合曲面为立方体 $[x, y, z]-[x+h, y+h, z+h]$ 的表面. 先来考虑 x 方向两个正方形的通量 Φ_x , 在点 $\mathbf{r}(x, y, z)$ 附近对 $F_x(\mathbf{r})$ 使用全微分近似^[83] 得 (为简便书写, 以下的函数值和偏导都默认在 \mathbf{r} 处取值)

$$F_x(x+x', y+y', z+z') \approx F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}x' + \frac{\partial F_x}{\partial y}y' + \frac{\partial F_x}{\partial z}z' \quad (4)$$

由于只有 x 方向的场分量对 Φ_x 有贡献,

$$\begin{aligned} \Phi_x &\approx \int_0^h \int_0^h dy' dz' \times \\ &\left[\left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}h + \frac{\partial F_x}{\partial y}y' + \frac{\partial F_x}{\partial z}z' \right) - \left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}0 + \frac{\partial F_x}{\partial y}y' + \frac{\partial F_x}{\partial z}z' \right) \right] \\ &= \frac{\partial F_x}{\partial x}h \int_0^h \int_0^h dy' dz' = \frac{\partial F_x}{\partial x}h^3 = \frac{\partial F_x}{\partial x}V \end{aligned} \quad (5)$$

同理可以得到另外四个正方形的通量. 六个正方形的总通量为

$$\Phi \approx \left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) V \quad (6)$$

根据定义式 2, 可得直角坐标中的散度公式

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\Phi}{V} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \quad (7)$$

从形式上, 我们可以引入一个 ∇ 算符, 在直角坐标系中的形式为

$$\nabla = \hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \quad (8)$$

那么 $\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r})$ 从形式上可以看做矢量算符 ∇ 与某点场矢量 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 的“点乘”. 根据式 7, 显然散度是一个线性算符, 即多个矢量场的线性组合的散度等于它们分别求散度再线性组合

$$\nabla \cdot [C_1 \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) + C_2 \mathbf{F}_2(\mathbf{r}) + \dots] = C_1 \nabla \cdot \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) + C_2 \nabla \cdot \mathbf{F}_2(\mathbf{r}) + \dots \quad (9)$$

散度定理

现在来考虑一个有限大的闭合曲面并计算通量 Φ . 我们先把曲面内的空间划分成许多体积足够小的微元, 第 i 个的体积微元为 V_i , 通量为 $\Phi_i \approx \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) V_i$. 现在来证明所有小曲面的通量之和等于大曲面的通量.

图中所有微元的曲面可划分为两部分, 一是相邻两个小曲面的边界 (红色), 二是小曲面与大曲面重合的部分 (黑色). 前者产生的通量之和为零, 因为这些边界都是由正方向相反的两块小曲面重合而成, 他们产生的通量等大反向, 互相抵消. 后者产生的通量等于大曲面的通量, 这是因为每块黑色边界都是由正方向相同的小曲面和大曲面重合而成, 产生的通量等大同向. 所以总通量等于

$$\Phi = \sum_i \Phi_i \approx \sum_i \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) V_i \quad (10)$$

令微元趋近无穷小, 上面的求和变为定积分 (积分范围默认为 \mathcal{V})

$$\Phi = \int \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) dV \quad (11)$$

所以**散度定理**就是, 矢量场在任意闭合曲面的通量等于矢量场的散度在曲面所围空间的体积分.

柱坐标系中的拉普拉斯方程

预备知识 分离变量法简介，柱坐标的拉普拉斯算符

结论

柱坐标中的径向方程为贝赛尔方程

$$x \frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + (x^2 - m^2) y = 0 \quad (1)$$

其中 $x = lr$

分离变量法

柱坐标系中的拉普拉斯方程为

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0 \quad (2)$$

令 $u = R(r) \Phi(\theta) Z(z)$, 代入方程得

$$\frac{1}{rR} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = 0 \quad (3)$$

前两项只是 r 和 θ 的函数, 第三项只是 z 的函数, 所以他们分别为常数. 令

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = l^2 \quad (4)$$

$$\text{则前两项为 } \frac{1}{rR} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} = -l^2. \quad (5)$$

为了继续分离 r 和 θ , 两边乘以 r^2 , 则左边第二项只是关于 θ 的函数, 剩下的部分只是关于 r 的函数. 令

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\theta^2} = -m^2 \quad (6)$$

则剩下的部分为 m^2 , 即

$$r \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) + (l^2 r^2 - m^2) R = 0 \quad (7)$$

令 $x = lr$, $y(x) = R(r)$ 则

$$x \frac{d}{dx} \left(x \frac{dy}{dx} \right) + (x^2 - m^2) y = 0 \quad (8)$$

到此为止, 三个变量已经完全分离, 各自的微分方程为式 4, 式 6, 式 7.

$Z(z)$ 的通解为 $C_1 e^{l z} + C_2 e^{-l z}$, $\Phi(\theta)$ 的通解为 $e^{im\theta}$. 式 7 的解不能用有限的初等函数表示, 式 8 为贝赛尔方程的标准形式 (见贝赛尔方程).

需要注意的是, 贝赛尔函数的阶数 m 是角向方程 $\frac{1}{\Phi} d^2 \Phi / d\theta^2 = -m^2$ 的参数, 而不是径向方程的参数 1. 参数 1 被包含在自变量 x 中.

球坐标系中的梯度散度旋度及拉普拉斯算符

r 是极径, θ 是极角, ϕ 是方位角

梯度算符

$$\nabla u = \frac{\partial u}{\partial r} \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} \hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u}{\partial \phi} \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (1)$$

散度算符

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta v_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \quad (2)$$

旋度算符

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{v} = & \frac{1}{r \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta v_\phi) - \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r v_\phi) \right] \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ & + \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) - \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right] \hat{\boldsymbol{\phi}} \end{aligned} \quad (3)$$

拉普拉斯算符

$$\nabla^2 u = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} \right) \quad (4)$$

勒让德多项式的生成函数

勒让德多项式可以表示为以下函数对 r 的泰勒展开的系数

$$\frac{1}{\sqrt{1 + r^2 - 2rx}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x) r^l \quad (1)$$

根式 $1/\sqrt{1 + r^2 - 2rx}$ 叫做勒让德多项式的生成函数或母函数

球谐函数

预备知识 连带勒让德方程

在球坐标的拉普拉斯方程分离变量后,连带勒让德方程的解为 $g(\theta) = P_l^m(\cos \theta)$, 方向角函数的解 $h(\phi) = e^{im\phi}$. 为了方便起见, 定义 $Y_l^m = A \cdot P_l^m(\cos \theta) e^{im\theta}$, A 是归一化系数, 使得 $|Y_l^m(x)|^2$ 在单位球面上的面积分等于 1. 由该条件确定归一化系数 A (过程如下), 得到

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(m-1)!}{(m+1)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\theta} \quad (1)$$

在极坐标中, 半径为 R 的球的面元为 $R d\theta \cdot R \sin \theta d\phi = R^2 \sin \theta d\theta d\phi$, 积分为

$$1 = A^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi P_l^m(\cos \theta)^2 e^{im\theta} e^{-im\theta} \sin \theta d\theta d\phi \quad (2)$$

两个指数项相乘为 1, 且对 θ 进行换元 $u = \cos \theta$, 得

$$1 = A^2 \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 P_l^m(x)^2 dx d\phi = 2\pi A^2 \int_{-1}^1 P_l^m(x)^2 dx \quad (3)$$

由连带勒让德方程的归一化系数,

贝赛尔函数

柱贝赛尔方程为

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - \alpha^2)y = 0 \quad (1)$$

其中 α 叫做阶数。两个线性无关的解分别是第一类贝赛尔函数 $J_\alpha(x)$ 和第二类贝赛尔函数 $Y_\alpha(x)$ 。

该式的解，即第一类贝赛尔函数通常用大写的 $J_\alpha(x)$, $Y_\alpha(x)$ 表示

$$J_{-\alpha}(x) = (-1)^\alpha J_\alpha(x) \quad Y_{-\alpha}(x) = (-1)^\alpha Y_\alpha(x) \quad (2)$$

汉克尔函数定义为

$$H_\alpha^{(1)}(x) = J_\alpha(x) + iY_\alpha(x) \quad H_\alpha^{(2)}(x) = J_\alpha(x) - iY_\alpha(x) \quad (3)$$

递推关系 (Z 是 $J, Y, H^{(1)}, H^{(2)}$ 的任意一种)

$$\frac{2\alpha}{x} Z_\alpha(x) = Z_{\alpha-1}(x) + Z_{\alpha+1}(x) \quad (4)$$

一阶导数

$$\frac{dZ_\alpha}{dx} = \frac{1}{2}[Z_{\alpha-1}(x) - Z_{\alpha+1}(x)] \quad (5)$$

正交关系

$$\int_0^1 x J_\alpha(u_{\alpha,m}x) J_\alpha(u_{\alpha,n}x) dx = \frac{\delta_{m,n}}{2} [J_{\alpha+1}(u_{\alpha,m})]^2 \quad (6)$$

修正贝赛尔函数

修正贝赛尔方程为

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} - (x^2 + \alpha^2)y = 0 \quad (7)$$

其解为两个修正贝赛尔函数 (**Modified Bessel Function**)，第一类为 $I_\alpha(x)$ ，第二类为 $K_\alpha(x)$ ，与贝赛尔函数的关系为

$$I_\alpha(x) = i^{-\alpha} J_\alpha(ix) \quad K_\alpha(x) = \frac{\pi}{2} i^{\alpha+1} H_\alpha^{(1)}(ix) \quad (8)$$

球贝塞尔函数

预备知识 贝赛尔函数^[242]

球贝塞尔方程为

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} + [x^2 - n(n+1)]y = 0 \quad (1)$$

两个线性无关的解分别为第一类球贝塞尔函数 $j_n(x)$ 和第二类球贝塞尔函数 $y_n(x)$.

$$j_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x) \quad y_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x) \quad (2)$$

$$h_n^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(1)}(x) = j_n(x) + iy_n(x) \quad (3)$$

$$h_n^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(2)}(x) = j_n(x) - iy_n(x) \quad (4)$$

一阶导数 (f 是 $j, y, h^{(1)}, h^{(2)}$ 中的任意一种)

$$f'_n(z) = f_{n-1}(z) - \frac{n+1}{z} f_n(z) \quad (5)$$

渐进形式

当 $x \gg 1$ 时, 球贝塞尔函数可以近似为

$$j_l(x) \rightarrow \sin(x - l\pi/2)/x \quad y_l(x) \rightarrow -\cos(x - l\pi/2)/x \quad (6)$$

$$h_l^{(1)}(x) \rightarrow (-i)^{l+1} e^{ix}/x \quad h_l^{(2)}(x) \rightarrow i^{l+1} e^{-ix}/x \quad (7)$$

修正球贝塞尔函数

修正球贝塞尔方程和两个线性无关解为

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} - [x^2 + n(n+1)]y = 0 \quad (8)$$

$$i_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} I_{n+1/2}(x) = i^{-n} j_n(ix) \quad (9)$$

$$k_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} K_{n+1/2}(x) = \frac{\pi}{2} i^{n+2} h_n^{(1)}(ix) \quad (10)$$

分别为第一类和第二类. 演进形式为

$$i_n(x) \rightarrow \frac{e^x}{2x} \quad k_n(x) \rightarrow \frac{\pi}{2} \frac{e^{-x}}{x} \quad (11)$$

傅里叶变换（指数）

预备知识 傅里叶级数（指数）^[78], 傅里叶变换（三角）^[??]

结论

用三角傅里叶变换^[??]中同样的方法可把指数傅里叶级数拓展为指数傅里叶变换

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (1)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (2)$$

特殊地, 当 $f(x)$ 为实函数时, $g(k)$ 的实部是偶函数, 虚部是奇函数.

实数函数的情况

如果实函数 $f(x)$ 的复数傅里叶变换为 $g(k)$, 即

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (3)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (4)$$

$g(k)$ 需要满足什么条件才能使 $f(x)$ 是实数呢? 我们从式(4)开始入手.

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} [g(k) e^{ikx} + g(-k) e^{-ikx}] dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} [g(k) + g(-k)] \cos(kx) dk + \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} [g(k) - g(-k)] \sin(kx) dk \end{aligned} \quad (5)$$

从傅里叶变换（三角函数）我们已知对实数函数, 方括号项都必须为实函数, 即上式第一个方括号中的虚部为零, 第二个方括号中的实部为零, 即

$$\begin{aligned} g_{Im}(-k) &= -g_{Im}(k) \\ g_{Re}(-k) &= g_{Re}(k) \end{aligned} \quad (6)$$

所以结论是，当 $f(x)$ 为实函数时， $g(k)$ 的实部是偶函数，虚部是奇函数。由此可得另一个结论

$$|g(-k)| = \sqrt{g_{Re}^2(-k) + g_{Im}^2(-k)} = \sqrt{g_{Re}^2(k) + g_{Im}^2(k)} = |g(k)| \quad (7)$$

即频谱是偶函数。所以对于实数函数，我们只需要 $k > 0$ 的频谱。这与三角傅里叶变换的情况一致。

离散傅里叶变换

结论

预备知识 兮正矩阵，傅里叶变换（指数函数）[??]

对两组有序数列 f_0, f_1, \dots, f_{N-1} 和 g_0, g_1, \dots, g_{N-1} ，正变换和逆变换分别为⁵

$$g_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} pq\right) f_q \quad (1)$$

$$f_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=0}^{N-1} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} pq\right) g_p \quad (2)$$

离散傅里叶变换（Discrete Fourier Transform）（DFT）是一个复数域的正交变换。快速傅里叶变换（FFT）的结果与离散傅里叶变换一样，只是优化了算法使程序运行更高效。

矩阵表示

把变换和逆变换用幺正矩阵 \mathbf{F} 和 \mathbf{F}^{-1} 来表示，令列矢量 $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_N)^T$ ， $\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_N)^T$ ，变换和逆变换分别为

$$\mathbf{g} = \mathbf{F}\mathbf{f} \quad \mathbf{f} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{g} \quad (3)$$

其中

$$F_{pq} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} pq\right) \quad \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{F}^\dagger \quad (4)$$

证明 \mathbf{F} 的正交性

根据正交矩阵的定义，我们需要证明

$$\sum_{p=0}^{N-1} F_{pq_1}^* F_{pq_2} = 0 \quad (q_1 \neq q_2) \quad (5)$$

⁵工程上的定义常常是正变换没有 $1/\sqrt{N}$ 因子，逆变换的 $1/\sqrt{N}$ 因子变为 $1/N$ 。这样的好处是节省运算量。本书中使用的定义好处是变换为幺正变换，有保持归一化的特点。

而

$$\sum_{p=0}^{N-1} F_{pq_1}^* F_{pq_2} = \sum_{p=0}^{N-1} \exp \left[\frac{2\pi i}{N} (q_2 - q_1)p \right] \quad (6)$$

注意到求和的每一项在复平面上都对应模长为 1, 幅角为 $(q_2 - q_1)p/N$ 个圆周的矢量, 而 N 条矢量恰好向不同方向均匀分布, 所以相加为 0. 证毕.

逆矩阵

先来看矩阵各列的模长平方, 即式(6)中 $q_1 = q_2$ 的情况, 易得任何一列的模长平方都为 N . 所以矩阵 \mathbf{F} 是一个幺正矩阵 \mathbf{U} 乘以 \sqrt{N} . 考虑到幺正矩阵的逆矩阵是其厄米共轭, 有

$$\mathbf{F}^\dagger \mathbf{F} = \sqrt{N}^2 \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = N \mathbf{U}^{-1} \mathbf{U} = N \quad (7)$$

两边除以 N , 可得 $\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{F}^\dagger / N$. 证毕.

有时为了对称起见, 把矩阵元定义为

$$F_{pq} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp \left(-\frac{2\pi i}{N} pq \right) \quad (8)$$

这样, \mathbf{F} 的每一列模长为 1, 使 \mathbf{F} 本身就是幺正矩阵, 其逆矩阵等于厄米共轭.

用离散傅里叶变换近似傅里叶变换

在数值计算傅里叶变换时, 不可能计算连续的频谱 $g(k)$, 只能用数值积分计算离散值 $g(k_i)$

$$g(k_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (9)$$

为了节省计算量, 我们假设

证明闭合曲面的法向量面积分为零

证明闭合曲面的法向量面积分为零

对于闭合曲面 Ω , 证明 $\oint_{\Omega} d\mathbf{s} = \mathbf{0}$, 其中 $d\mathbf{s}$ 是曲面上的面元矢量, 其大小为面元的面积 ds , 方向为沿着该面元的法线向外. 把矢量积分分解成三个分量, 有

$$\begin{aligned}\oint_{\Omega} d\mathbf{s} &= \oint_{\Omega} [(\hat{\mathbf{x}} ds) \hat{\mathbf{x}} + (\hat{\mathbf{y}} ds) \hat{\mathbf{y}} + (\hat{\mathbf{z}} ds) \hat{\mathbf{z}}] \\ &= \hat{\mathbf{x}} \oint_{\Omega} \hat{\mathbf{x}} ds + \hat{\mathbf{y}} \oint_{\Omega} \hat{\mathbf{y}} ds + \hat{\mathbf{z}} \oint_{\Omega} \hat{\mathbf{z}} ds\end{aligned}\tag{1}$$

下面以第一项为例, 证明积分结果为, 后两项的证明类似. 根据散度定理, 矢量场在闭合曲面上的通量等于该矢量场散度在曲面内空间的体积分, 所以

$$\oint_{\Omega} \hat{\mathbf{x}} ds = \int_V (\nabla \cdot \hat{\mathbf{x}}) dV = \int_V 0 dV = 0\tag{2}$$

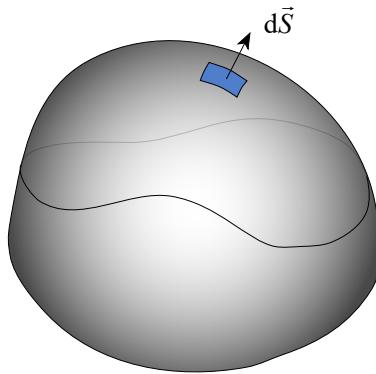


图 1: a

平均值的不确定度

例题：比如说有一个概率分布 $y = f(x)$. 它的

平均值（数学期望）为 $\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xf(x) dx$,

方差为 $\sigma_x^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 f(x) dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x) dx \right) - \bar{x}^2 = \bar{x}^2 - \bar{x}^2$

标准差为 $\sigma_x = \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 f(x) dx}$.

如果测量一个数据，这三个值就可以用来衡量这个数据的特征.

但如果测量 n 次平均值，那显然平均值显然要比一次测量更可靠， $\sigma_{\bar{x}} < \sigma_x$.

各种教科书上都会给出 $\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{\sqrt{n}}\sigma_x$ 或者 $\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{n}\sigma_x^2$. 那么这个公式到底怎么来的呢？

其实在上式中， $\sigma_{\bar{x}}^2$ 的定义是 $\sigma_{\bar{x}}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \bar{x} \right)^2 f(x_1) f(x_2) \dots f(x_n) dx_1 \dots dx_n$.

下面就从这个定义证明 $\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{n}\sigma_x^2$.

先考虑两次测量，即 $n = 2$ 的情况. 先后得到 x_1, x_2 的概率密度是 $f_2(x_1, x_2) = f(x_1) f(x_2)$. 不难证明归一化：

$$\begin{aligned} \iint f(x_1) f(x_2) dx_1 dx_2 &= \int f(x_1) dx_1 \int f(x_2) dx_2 \\ &= 1 \times 1 = 1 \end{aligned} \tag{1}$$

先看 $x_1 + x_2/2$ 的平均值，令 $y = x_1 + x_2/2$.

$$\begin{aligned} \bar{y} &= \iint \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) f(x_1) f(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \frac{1}{2} \int x_1 f(x_1) dx_1 \int f(x_2) dx_2 + \frac{1}{2} \int f(x_1) dx_1 \int x_2 f(x_2) dx_2 \\ &= \frac{\bar{x}}{2} + \frac{\bar{x}}{2} = \bar{x} \end{aligned} \tag{2}$$

结论是，进行两次测量去平均值，数学期望就是测量一次的数学期望. 这个结论是符合常识的.

根据同样的方法，可以测量方差.

$$\begin{aligned} \sigma_{\bar{x}}^2 &= \iint \left(\frac{x_1 + x_2}{2} - \bar{x} \right)^2 f(x_1) f(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \frac{1}{2} (\bar{x}^2 - \bar{x}^2) = \frac{1}{2} \sigma_x^2 \end{aligned} \tag{3}$$

所以 $\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{1}{2}\sigma_x^2$, 且 $\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_x$

对于 $n > 2$ 的情况, 利用求和符号和积分运算法则, 也很容易证明 $\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{\sqrt{n}}\sigma_x$

第二章

理论力学

经典力学笔记

拉格朗日方程为

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i}, \text{ 其中 } L(q, \dot{q}) = T - V. \quad (1)$$

正则动量 (canonical momentum) $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$, 广义力 (generalized force) $\partial L / \partial q_i$, 拉氏方程就是广义力与正则动量的牛顿第二定律. 对于任何广义坐标, 拉格朗日方程的形式不变.

拉格朗日变换 (略) 后, 得到哈密顿正则 (canonical) 方程为

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \partial H / \partial p_i \\ \dot{p}_i = -\partial H / \partial q_i \end{cases} \quad (2)$$

其中 $H(p, q) = T + V$.

泊松括号

对任意物理量 $\omega(q, p)$, 都有

$$\dot{\omega} = \sum_i \left[\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] = \sum_i \left[\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \right] = \{\omega, H\} \quad (3)$$

量子力学中的对易算符对应泊松括号. 注意该物理量不能显含时间, 即不能是 $\omega(q, p, t)$. 所以若泊松括号消失, 则该物理量守恒! 当显含时间时

$$\dot{\omega} = \{\omega, H\} + \frac{\partial \omega}{\partial t} \quad (4)$$

对应量子力学中的算符平均值演化方程. 注意若调换泊松括号里面的物理量, 结果取相反数.

坐标变换

若变换到另一套广义坐标 $q'(q)$

$$\dot{q}'_i = \sum_j \frac{\partial q'_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \quad \dot{q}_i = \sum_j \frac{\partial q_i}{\partial q'_j} \dot{q}'_j \quad (5)$$

拉格朗日量是系统的状态量，所以 $L(q', \dot{q}') = L[q(q'), \dot{q}(q', \dot{q}')]$ ，所以

$$p'_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}'_i} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}'_i} = \sum_k \frac{\partial q_k}{\partial q'_i} p_k \quad (6)$$

这就从坐标变换推出了动量变换。对于任何广义坐标以及对应的正则动量，哈密顿方程的形式不变（因为拉格朗日方程的形式不变，哈密顿是由拉格朗日推出来的）。但是还有其他情况也不变，所有使正则方程成立的坐标叫做正则坐标（canonical coordinates）。下面推导判断正则坐标的一般条件。

对于不显含时的物理量有

$$\dot{\omega} = \{\omega, H\} = \sum_i \left[\frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \right] \quad (7)$$

现在若把 H 看成是 $H[q'(q, p), p'(q, p)]$ ，

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \sum_k \frac{\partial H}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial p_i} + \frac{\partial H}{\partial p'_k} \frac{\partial p'_k}{\partial p_i} \quad (8)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = \sum_k \frac{\partial H}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial q_i} + \frac{\partial H}{\partial p'_k} \frac{\partial p'_k}{\partial q_i} \quad (9)$$

代入得，并对 H 的偏微分合并同类项得

$$\dot{\omega} = \{\omega, H\} = \sum_k \left[\frac{\partial H}{\partial q'_k} \{\omega, q'_k\} + \frac{\partial H}{\partial p'_k} \{\omega, p'_k\} \right] \quad (10)$$

注意泊松括号是对 q, p 进行偏微分，记为 $\{\cdot\}_{q,p}$ 。分别代入 $\omega = q'_i, p'_i$ ，得到转换坐标后的哈密顿方程的一般形式。为了保持正则方程的形式，必须要求

$$\{q'_i, q'_k\}_{q,p} = 0 = \{p'_i, p'_k\}_{q,p} \quad (11)$$

$$\{q'_i, p'_k\}_{q,p} = \delta_{ik} \quad (12)$$

这就是判断正则变换的一般条件。可以证明，用任何正则坐标作为泊松括号的角标，其值都不变。下面是证明

$$\{a, b\}_{q,p} = \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial q_i} \frac{\partial b}{\partial p_i} - \frac{\partial b}{\partial q_i} \frac{\partial a}{\partial p_i} \right) \quad (13)$$

其中

$$\frac{\partial a}{\partial q_i} \frac{\partial b}{\partial p_i} = \sum_j \left(\frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial q'_j}{\partial q_i} + \frac{\partial a}{\partial p'_j} \frac{\partial p'_j}{\partial q_i} \right) \sum_k \left(\frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial p_i} + \frac{\partial b}{\partial p'_k} \frac{\partial p'_k}{\partial p_i} \right) \quad (14)$$

$$\frac{\partial b}{\partial q_i} \frac{\partial a}{\partial p_i} = \sum_k \left(\frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial q'_k}{\partial q_i} + \frac{\partial b}{\partial p'_k} \frac{\partial p'_k}{\partial q_i} \right) \sum_j \left(\frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial q'_j}{\partial p_i} + \frac{\partial a}{\partial p'_j} \frac{\partial p'_j}{\partial p_i} \right) \quad (15)$$

现在我们要得到 $\{a, b\}_{q', p'} = \sum_i \left(\frac{\partial a}{\partial q'_i} \frac{\partial b}{\partial p'_i} - \frac{\partial b}{\partial q'_i} \frac{\partial a}{\partial p'_i} \right)$, 可以把上两式代入后对 $\frac{\partial a}{\partial q'_i} \frac{\partial b}{\partial p'_i}$ 和 $\frac{\partial b}{\partial q'_i} \frac{\partial a}{\partial p'_i}$ 合并同类项, 得

$$\begin{aligned} \{a, b\}_{q, p} &= \sum_{jk} \frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_k} \sum_i \left(\frac{\partial q'_k}{\partial q_i} \frac{\partial p'_k}{\partial p_i} - \frac{\partial p'_k}{\partial q_i} \frac{\partial q'_j}{\partial p_i} \right) \\ &\quad - \sum_{jk} \frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \sum_i \left(\frac{\partial q'_k}{\partial q_i} \frac{\partial p'_j}{\partial p_i} - \frac{\partial p'_j}{\partial q_i} \frac{\partial q'_k}{\partial p_i} \right) \\ &= \sum_{jk} \frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_k} \{q'_j, p'_k\}_{q, p} - \sum_{jk} \frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \{q'_k, p'_j\}_{q, p} \end{aligned} \quad (16)$$

代入正则坐标条件, 得

$$\begin{aligned} \{a, b\}_{q, p} &= \sum_{jk} \frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_k} \delta_{jk} - \sum_{jk} \frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \delta_{jk} = \sum_j \left(\frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_j} - \frac{\partial b}{\partial q'_j} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \right) \\ &= \{a, b\}_{q', p'} \end{aligned} \quad (17)$$

第三章

电动力学

电流

若在导线中取一个任意横截面，并定义一个正方向，通过该截面的电流定义为

$$I = dq/dt \quad (1)$$

其中 dq 为 dt 时间内由正方向通过截面的净电荷量¹.

考虑一根电荷线密度为 λ 的导线中电荷都以速度 v 沿正方向运动，时间 dt 内通过的长度为 dt ，通过的电荷为 λdt ，所以电流为

$$I = \lambda v \quad (2)$$

电荷守恒 电流连续性方程

总电荷守恒：一个封闭系统的总电荷保持不变（正反粒子带有不同的电荷，可以成对创造或湮灭，但总电荷仍然保持不变）.

然而这并没有阻止一些电荷从一个地点凭空消失同时在另一个地点出现，所以我们还可以描述得更精确一些。在空间中任意选取一个闭合曲面，曲面内的总电荷的减少的速率等于由内向外通过曲面的速率。

$$\oint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{s} = -\frac{d}{dt} \int \rho dV \quad (1)$$

由于不同变量的积分和求导可以交换 $\frac{d}{dt} \oint \rho dV = \oint \frac{d\rho}{dt} dV$ ，且由散度定理。上式可写为

$$\int \nabla \cdot \mathbf{j} dV + \int \frac{d\rho}{dt} dV = 0 \quad (2)$$

由于该体积分对任何闭合曲面都成立，所以

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (3)$$

¹具体来说，正电荷向正方向流动和负电荷向负方向流动，电流都去正号，反之取负号。

LC 振荡电路

电容公式

$$I = C \frac{dU_c}{dt} \quad (1)$$

电感公式

$$U_L = L \frac{dI}{dt} \quad (2)$$

由回路电压合为零，得

$$U_L + U_c = 0 \quad (3)$$

对式 1 求导得 $dI/dt = C d^2U_c/dt^2$ ，代入式 2 得 $U_L = LC d^2U_c/dt^2$ 。代入式 3 得关于 U_c 的微分方程

$$\frac{d^2U_c}{dt^2} + \frac{1}{LC}U_c = 0 \quad (4)$$

根据二阶线性常系数齐次微分方程^[69] 的第 3 种情况，其通解为

$$U_c = U_0 \sin(\omega t + \phi_0) \quad \omega = \frac{1}{\sqrt{LC}} \quad (5)$$

$$I = C \frac{dU_c}{dt} = \sqrt{\frac{C}{L}} U_0 \cos(\omega t + \phi_0) \quad (6)$$

比奥萨伐尔定律

结论

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I d\mathbf{r}' \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \quad (1)$$

说明

比奥萨伐尔定律是一个定律，即电磁学的基本假设之一，所以以下并不是推导，而是解释公式的意义。

一个粗细忽略不计的电流回路中有电流 I ，如何确定该回路在空间中任意一点所产生的磁场呢？由于磁场与电场一样可以叠加，我们可以把回路划分成极小的线段，分别计算每个小线段在某点产生的磁场，然后求和。当这些小线段的长度趋近于零，求和就变成了积分。那如何计算一小段长度为 dl 的电流（电流元）产生的磁场呢？如图（ dl 存在正方向，与 \mathbf{R} 的夹角为 θ ），为了表示电流的方向，我们先把 dl 变为矢量 $d\mathbf{l}$ ，方向为电流的正方向（当 $I > 0$ 时，电流方向与 dl 相同， $I < 0$ 时相反）。现在我们要求空间中任意一点 \mathbf{r} （把这点叫做场点）的磁场，设电流元的位置为 \mathbf{r} （把这点叫做原点），且设

$$\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' \quad (2)$$

首先，磁场大小正比于 I ，这是合理的，因为如果把两小段电流元重叠放在一起，那么根据叠加原理，任何地方的磁场都会增加一倍。其次，与点电荷的电场（库伦定律）类似，场强与距离的平方成反比。最后，由于电流有特定的方向，磁场不再具有球对称，但具有柱对称。磁场大小正比于 $|d\mathbf{l} \times \mathbf{R}| = R dl \sin \theta$ （磁场方向垂直于 $d\mathbf{l}$ 和 \mathbf{R} 所在平面，符合右手定则，见矢量的叉乘^[93]）。这说明，在 I 和 R 不变时，垂直于电流元的点 ($\theta = \pi/2$) 具有最大场强，与其共线的点 ($\theta = 0$) 场强为零。

要注意的是，虽然我们是对单独一个 $I dl$ 分析，但稳定的电流元在现实中并不存在。因为线电流必须组成环路，否则在两个端点处就会分别积累大量的异号电荷（见电流的连续性），从而产生变化的电场及磁场，而在静态电磁场问

题中，我们要求净电荷和电流的分布不随时间改变。所以在利用比奥萨伐尔公式时，必须要以对整个闭合回路积分（无穷长直导线或者螺线管等理想问题除外若给所有的小电流源编号为 $I \mathrm{d}\mathbf{l}_i$ ，令第 i 个电流源的起点为 \mathbf{r}'_i , $\mathbf{R}_i = \mathbf{r} - \mathbf{r}'_i$. 把所有电场矢量相加，变为

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_i \frac{I \mathrm{d}\mathbf{l}_i \times \mathbf{R}_i}{R_i^2} \quad (3)$$

当电流元无穷短，数量无穷多的时候，上式写为积分的形式，且由于第 i 个电流元的终点就是第 $i+1$ 个电流元的起点， $\mathrm{d}\mathbf{l}_i = \mathbf{r}'_{i+1} - \mathbf{r}'_i = \mathrm{d}\mathbf{r}'$ ，矢量积分写为

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I \mathrm{d}\mathbf{r}' \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \quad (4)$$

注意 \mathbf{R} 是场点 \mathbf{r} 和源点 \mathbf{r}' 的函数，积分时把 \mathbf{r} 视为常数而对 \mathbf{r}' 积分。为了使公式更明确，在难度较大的电磁学教材中把上式直接记为

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I \mathrm{d}\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (5)$$

矢量积分的计算方法

比奥萨伐尔定律的积分中含有矢量微元的叉乘，看起来和普通的矢量积分不同，但是在常见的简单问题中，可以从几何理解上直接转换为标量的积分（见无限长直导线的磁场和环形电流轴线的磁场）。如果是更一般的问题，则可以把叉乘分解成 3 个分量，然后变为 6 个标量积分

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\mathbf{r}' \times \mathbf{R} &= \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ \mathrm{d}x' & \mathrm{d}y' & \mathrm{d}z' \\ x - x' & y - y' & z - z' \end{vmatrix} \\ &= \hat{\mathbf{x}} [(z - z') \mathrm{d}y' - (y - y') \mathrm{d}z'] + \hat{\mathbf{y}} [\dots] + \hat{\mathbf{z}} [\dots] \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I \mathrm{d}\mathbf{r}' \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \frac{\mathrm{d}\mathbf{r}' \times \mathbf{R}}{R^3} \\ &= \hat{\mathbf{x}} \frac{\mu_0 I}{4\pi} \left[\oint \frac{1}{R^3} (z - z') \mathrm{d}y' - \oint \frac{1}{R^3} (y - y') \mathrm{d}z' \right] + \hat{\mathbf{y}} [\dots] + \hat{\mathbf{z}} [\dots] \end{aligned} \quad (7)$$

电流密度的形式

假设电流的空间分布是连续变化的而不能看成一条截面不计曲线，我们需要用电流密度 \mathbf{J} 来表示空间的电流分布。现在考虑一个粗细不能忽略的环路， \mathbf{r}' 处的截面积为 A （取截面时应垂直于电流），通过截面的电流为 $I = A\mathbf{J}$ ，所以电流元变为 $I \, d\mathbf{l} = \mathbf{J}A \, d\mathbf{l} = \mathbf{J} \cdot d\mathbf{V}$ （根据定义， $d\mathbf{l}$ 与 \mathbf{J} 的正方向相同）， $d\mathbf{V}$ 是电流元的体积。于是比奥萨伐尔定律的环路积分变为体积分

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \, dV' \quad (8)$$

注意积分内的电流密度是关于源点的函数而不是场点的函数。理论上，体积分应该在导线内部进行，然而导线外部电流密度为零，故积分可以对全空间进行。类比式式 5，更明确的写法是

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \, dV' \quad (9)$$

积分时 \mathbf{r} 视为常数。

洛伦兹力

预备知识 矢量的叉乘^[93]

磁场-中，电荷为 q ，以速度 \mathbf{v} 运动的点电荷受到的洛伦兹力通过叉乘^[93] 定义

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (1)$$

即洛伦兹力与速度和磁场的方向垂直，大小等于 qvB 乘以速度与磁场夹角的正弦值。可见当速度与磁场垂直时洛伦兹力最大，平行时没有洛伦兹力。

磁场对电荷不做功

由于任意时刻，磁场力的方向垂直于运动方向，所以静磁场不对电荷做功（类比向心力不对圆周运动做功），证明如下。洛伦兹力的瞬时功率为

$$P = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} \quad (2)$$

由矢量混合积的运算

$$\mathbf{v} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \times \mathbf{v} \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3)$$

因为矢量叉乘本身等于 0.

广义洛伦兹力

预备知识 极限^[22]

广义上的洛伦兹力是指电磁场给电荷施加的所有作用力，即电场力加洛伦兹力。麦克斯韦方程组只描述了由电荷的分布及运动情况如何计算电磁场。而广义洛伦兹力则解释了已知电磁场分布如何计算电荷的受力。对于点电荷

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4)$$

对于连续的电荷分布

$$\mathbf{f} = \rho(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (5)$$

其中 \mathbf{f} 是受力密度，用极限的方法定义为无穷小体积的受力除以该体积

$$\mathbf{f} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{\mathbf{F}}{V} \quad (6)$$

磁场的能量

预备知识 磁场矢势

结论

$$W = \frac{1}{2\mu_0} \int \mathbf{B}^2 dV \quad \text{或} \quad W = \frac{1}{2} \int \mathbf{A} \cdot \mathbf{J} dV \quad (1)$$

其中 μ_0 是真空中的磁导率, \mathbf{A} 是磁场矢势, \mathbf{J} 是电流密度, 积分是对全空间积分 (或者对被积函数不为零的空间积分).

幼稚的推导

首先我们根据能量守恒的思想, 假设给一个电感 L 充电的能量都以“磁场能”的形式储存起来, 且能量密度只是磁场的函数.

在无限长圆柱螺线管中

简单的推导

我们首先考虑一个单匝线圈的磁场能量假设线圈的电阻为零

假设 $t = 0$ 时 $I = 0$, 此时没有磁场, 磁场能量为零. 接下来 I 随着 t 慢慢增加. 反向电动势为 (定义与电流相同的方向为正)

$$\begin{aligned} \varepsilon &= -\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \\ &= -\frac{d}{dt} \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} \\ &= -\frac{d}{dt} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \end{aligned} \quad (2)$$

电源克服反电动势的功率为

$$\frac{dW}{dt} = -\varepsilon I = I \frac{d}{dt} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \int I \frac{d\mathbf{B}}{dt} \cdot d\mathbf{s} \quad (3)$$

由于磁场与电流成正比（见比奥萨伐尔定律，不妨设 $\mathbf{B} = \mathbf{b}I$ ），则

$$I \frac{d\mathbf{B}}{dt} = \mathbf{b}I \frac{dI}{dt} = \frac{\mathbf{b}}{2} \frac{dI^2}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} I \mathbf{B} \right) \quad (4)$$

所以

$$\frac{dW}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \int I \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \right) \quad (5)$$

注意两边都是对时间的导数。两边对时间积分，得

$$W = \frac{1}{2} \int I \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} \quad (6)$$

注意当 $I = 0$ 时 $W = 0$ ，所以积分常数为零。注意在上述过程中，并没有假设电流以什么样的函数随时间变化（只要是缓慢变化即可）。

$$W = \frac{I}{2} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = \frac{I}{2} \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \frac{1}{2} \oint I \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad (7)$$

这就是式

磁通量的定义

定义通过某曲面的磁通量为

$$\Phi = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} \quad (1)$$

利用磁场矢势及旋度定理, 磁通量变为

$$\Phi = \int \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{a} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (2)$$

另外, 由于磁场的散度为零, 根据高斯定理, 任何闭合曲面的磁通量都是 0. 用另一种方式来理解: 如果选定一个闭合回路, 以该闭合回路为边界的任何曲面的磁通量都相等.

闭合线圈的磁通量

如何计算一个闭合线圈对自己产生的磁通量呢? 利用磁场矢势公式

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (3)$$

注意在该积分中, \mathbf{r} 视为常量, 积分完后, 积分变量 \mathbf{r} 消失. 现在根据式 2 再次将上式对 \mathbf{r} 进行同一环路积分得到磁通量

$$\Phi = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \oint \frac{d\mathbf{r}' \cdot d\mathbf{r}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (4)$$

磁旋比 玻尔磁子

如果一个带电刚体，质量密度和电荷密度成正比，当它绕轴转动时，角动量为

$$\mathbf{L} = I\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega} \int r^2 \rho_m dV \quad (1)$$

磁矩定义为

$$\boldsymbol{\mu} = Ia\hat{\boldsymbol{\omega}} = \int \frac{dQ}{2\pi/\omega} \cdot \pi r^2 \hat{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \int r^2 \rho_e dV \quad (2)$$

其中 r 为质量元到转轴的距离。两式比较，得

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (3)$$

但对基本粒子（例如电子）的实验中，发现上式还需要一个修正因子

$$\boldsymbol{\mu} = g \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (4)$$

g 一般就叫做 g 因子。定义磁旋比 $\gamma = gq/2m$

对于粒子的自旋， $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ 。所以 $\mu = \sqrt{l(l+1)}\hbar gq/2m$ 。对于电子，实验测得 $g_e = 2.0023193043617(15) \approx 2$

$$\boldsymbol{\mu} = g_e \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right)} = \frac{\sqrt{3}}{2} g_e \mu_B \approx \sqrt{3} \mu_B \quad (5)$$

其中 μ_B 为玻尔磁子，定义为

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (6)$$

安培力

预备知识 洛伦兹力

在匀强磁场中，一段笔直的细导线中通有电流 I ，导线的长度和正方向用矢量 \mathbf{L} 表示²，若电流与 \mathbf{L} 的方向相同则取正值，若相反则取负值。导线 \mathbf{L} 受到的安培力为

$$\mathbf{F} = I \mathbf{L} \times \mathbf{B} \quad (1)$$

该式可由洛伦兹力推导，见下文。

当磁场分布不均匀，或导线是弯曲的，可用“微元法”的思想，把该导线分为许多小段然后对每小段的安培力 $d\mathbf{F} = I d\mathbf{L} \times \mathbf{B}$ 进行矢量求和，即曲线积分)。

$$\mathbf{F} = I \int_L d\mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (2)$$

L 为导线所在的曲线，积分方向沿电流方向。

推导（匀强磁场中的直导线）

假设导线中正电荷运动而负电荷不动³，运动的正电荷线密度（单位长度的电荷量）为 λ ，速度为 \mathbf{v} 。那么电流为

$$I = \lambda v \quad (3)$$

所有运动的正电荷受到的洛伦兹力为

$$\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (4)$$

当电流方向 \mathbf{v} 与 \mathbf{L} 相同时有 $L\mathbf{v} = v\mathbf{L}$ ，此时定义电流为正， $I = \lambda v$ ，相反对有 $L\mathbf{v} = -v\mathbf{L}$ ，定义电流为负， $I = -\lambda v$ 。所以

$$q\mathbf{v} = \lambda L\mathbf{v} = \pm \lambda v \mathbf{L} = I \mathbf{L} \quad (5)$$

²根据电流连续性定理，电流不可能在端点凭空出现或消失，所以我们可以认为 \mathbf{L} 是一个回路中的一段。

³事实上是负电荷 $-\lambda$ 以 $-\mathbf{v}$ 运动而正电荷不动，但这样假设得到的安培力相同，且方便记忆和推导。

代入式4得

$$\mathbf{F} = I \mathbf{L} \times \mathbf{B} \quad (6)$$

磁场中闭合电流的合力

预备知识 安培力^[268], 斯托克斯定理, 静磁场的高斯定理,

假设空间中有任意磁场 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, 闭合电流回路 L 中有电流 I . 则其受到的安培力可以表示为线积分 $\mathbf{F} = \oint L I d\mathbf{l} \times \mathbf{B}$. 积分方向为电流方向. 若磁场是匀强磁场, 则立即得到 $\mathbf{F} = I (\oint L d\mathbf{l}) \times \mathbf{B} = \mathbf{0}$ 若磁场是任意的, 那么

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \oint_L I d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \\ &= \hat{\mathbf{x}} I \oint_L d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} I \oint_L d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}} I \oint_L d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{z}} \\ &= \hat{\mathbf{x}} I \oint_L (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) \cdot d\mathbf{l} + \hat{\mathbf{y}} I \oint_L (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{y}}) \cdot d\mathbf{l} + \hat{\mathbf{z}} I \oint_L (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot d\mathbf{l} \\ &= \hat{\mathbf{x}} I \int_{\Sigma} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{y}} I \int_{\Sigma} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{y}}) \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{z}} I \int_{\Sigma} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot d\mathbf{s}\end{aligned}\tag{1}$$

其中用到了斯托克斯定理, Σ 是以闭合曲线 L 为边界的曲面. 上式中

$$\nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{B}(\nabla \cdot \hat{\mathbf{x}}) + (\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{B} - \hat{\mathbf{x}}(\nabla \cdot \mathbf{B}) - (\mathbf{B} \cdot \nabla)\hat{\mathbf{x}} = (\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x}\tag{2}$$

这里用到了 $\hat{\mathbf{x}}$ 的任意微分为 0 以及 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 的性质. 对称地, 将上式中的 $\hat{\mathbf{x}}$ 替换成 $\hat{\mathbf{y}}$ 和 $\hat{\mathbf{z}}$, 等式也成立. 所以

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{x}} I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x} \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{y}} I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial y} \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{z}} I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial z} \cdot d\mathbf{s}\tag{3}$$

写成分量的形式, 就是

$$F_x = I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x} \cdot d\mathbf{s}\tag{4}$$

$$F_y = I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial y} \cdot d\mathbf{s}\tag{5}$$

$$F_z = I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial z} \cdot d\mathbf{s}\tag{6}$$

闭合电流在磁场中的力矩

预备知识 安培力^[268], 力矩^[189]

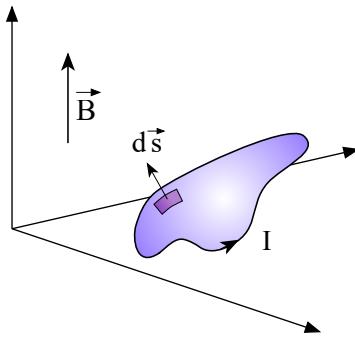


图 1: 闭合电流在磁场中所受的力矩

如图 1, 线圈中有闭合电流 I , 以及任意磁场分布 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, 现在求线圈所受力矩. 我们可以把线圈划分为许多小段 $d\mathbf{r}$, 每小段的安培力产生的力矩为

$$d\mathbf{M} = \mathbf{r} \times d\mathbf{F} = \mathbf{r} \times (I d\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \quad (1)$$

对连续叉乘进行化简^[99] 得

$$d\mathbf{M} = \mathbf{r} \times (I d\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = I (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} - I \mathbf{B} (\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}) \quad (2)$$

对 \mathbf{r} 沿闭合回路进行环积分得总力矩为

$$\mathbf{M} = \int d\mathbf{M} = I \oint (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} - I \mathbf{B} \oint \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} \quad (3)$$

其中

$$\oint \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} = \oint r \hat{\mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r} = \oint r dr = \frac{r^2}{2} \Big|_{r_0}^{r_0} = 0 \quad (4)$$

这是因为换积分的起点和终点到原点的距离都相同. 所以

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= I \oint (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \hat{\mathbf{x}} I \oint (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{x}} \cdot d\mathbf{r} + \hat{\mathbf{y}} I \oint (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{y}} \cdot d\mathbf{r} + \hat{\mathbf{z}} I \oint (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{z}} \cdot d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (5)$$

对第一项进行分析，剩下两项类推即可由斯托克斯定理得

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}I \oint (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})\hat{\mathbf{x}} \cdot d\mathbf{r} &= \hat{\mathbf{x}}I \int \nabla \times [(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})\hat{\mathbf{x}}] \cdot d\mathbf{s} \\ &= \hat{\mathbf{x}}I \int \nabla(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{x}} \cdot d\mathbf{s} \\ &= \hat{\mathbf{x}}I \int d\mathbf{s} \times \nabla(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{x}}\end{aligned}\quad (6)$$

其中面积分在以环路为边界的任意曲面进行。对 $\hat{\mathbf{y}}$ 和 $\hat{\mathbf{z}}$ 项也同样处理，得

$$\mathbf{M} = I \int d\mathbf{s} \times \nabla(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) \quad (7)$$

这是最一般的力矩表达式。

当磁场为匀强磁场时，由于 $\nabla(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}) = \mathbf{B}$

$$\mathbf{M} = I \left(\int d\mathbf{s} \right) \times \mathbf{B} \quad (8)$$

电磁场的动量守恒 动量流密度张量

预备知识 能流密度，张量，张量的散度

结论

假设电磁场动量守恒，则动量流密度张量为

$$T_{ij} = \epsilon_0 \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^2 \delta_{ij} - E_i E_j \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \delta_{ij} - B_i B_j \right) \quad (1)$$

该张量也成为麦克斯韦应力张量（Maxwell Stress Tensor）

推导

能量是标量，所以能流密度就是矢量。但动量本身就是矢量，要如何表示动量流密度呢？我们可以分析动量在某方向分量的流密度。根据张量的散度

$$(\nabla \cdot \vec{T})_j = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} T_{ji} \quad (2)$$

假设电磁场满足动量守恒，在闭合空间中，有“转换速率 + 流出速率 + 增加速率 = 0”（类比电磁场的能量守恒公式）。则电磁场的动量守恒会有

$$\mathbf{f} + \nabla \cdot \vec{T} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (3)$$

由广义洛伦兹力计算电荷的受力密度 \mathbf{f}

$$\mathbf{f} = \rho (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \rho \mathbf{E} + \mathbf{j} \times \mathbf{B} \quad (\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}) \quad (4)$$

由于式 3 的后两项是电磁场的量，不能含有关于电荷的量，所以接下来要通过麦克斯韦方程组把电荷密度 ρ 和电流密度 \mathbf{j} 替换成电磁场。

$$\rho = \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} \quad (\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}) \quad (5)$$

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}) \quad (6)$$

代入上式，得

$$\mathbf{f} = \epsilon_0 (\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \times \mathbf{B} \quad (7)$$

其中

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \times \mathbf{B} &= \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) - \mathbf{E} \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) - (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{B} \quad (\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}) \end{aligned} \quad (8)$$

代入上式得

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &= \epsilon_0 (\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} + \epsilon_0 (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E} - \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \\ &= \epsilon_0 [(\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E}] + \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \end{aligned} \quad (9)$$

为了使式中电磁场的公式更加对称，不妨加上一项

$$\frac{1}{\mu_0} (\nabla \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} = \mathbf{0} \quad (\nabla \cdot \mathbf{B} = 0) \quad (10)$$

得

$$\mathbf{f} = \epsilon_0 [(\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E}] + \frac{1}{\mu_0} [(\nabla \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} + (\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}] - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \quad (11)$$

一般来说，凡是出现两个连续的叉乘要尽量化成点乘，下面计算 $(\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E}$. 由吉布斯算子（劈形算符）的相关公式

$$\nabla (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{A} \quad (12)$$

令 $\mathbf{A} = \mathbf{B} = \mathbf{E}$ ，得

$$\nabla (\mathbf{E}^2) = 2\mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) + 2(\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} \quad (13)$$

即 $(\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E} = (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{E}^2)$ 同理得

$$(\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} = (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{B}^2) \quad (14)$$

代入得

$$\begin{aligned} \mathbf{f} = & \epsilon_0 \left[(\nabla \times \mathbf{E}) \mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{E}^2) \right] \\ & + \frac{1}{\mu_0} \left[(\nabla \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{B}^2) \right] - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \end{aligned} \quad (15)$$

与式 3 对比，可以看出动量流密度张量的散度为

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{T} = & -\epsilon_0 [(\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{E}^2)] \\ & - \frac{1}{\mu_0} [(\nabla \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{B}^2)] \end{aligned} \quad (16)$$

接下来由二阶张量的散度计算公式，通过对比系数，就可以求出动量流密度张量 \mathbf{T} （三阶矩阵）。

下面把等式右边的部分用求和符号表示（求和符号是张量分析中最常见的符号，只有熟练运用才能学号张量分析）。下面推导用到了克罗内克 δ 函数，且定义任意矢量加上下标表示第 j 个分量，例如

$$\mathbf{A}_j = \begin{cases} A_x (j=1) \\ A_y (j=2) \\ A_z (j=3) \end{cases} \quad (17)$$

$(\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{E}^2)$ 是一个矢量，它的第 j 个分量

$$\begin{aligned} & \left[(\nabla \cdot \mathbf{E}) \mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{E}^2) \right]_j \\ &= \left(\sum_{i=x,y,z} \frac{\partial E_i}{\partial i} \right) E_j + \left(\sum_{i=x,y,z} E_i \frac{\partial}{\partial i} \right) E_j - \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} \left(\frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial i} \delta_{ij} \right) \\ &= \sum_{i=x,y,z} \left(\frac{\partial E_i}{\partial i} E_j + E_i \frac{\partial E_j}{\partial i} - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial i} \delta_{ij} \right) \\ &= \sum_{i=x,y,z} \left(\frac{\partial}{\partial i} (E_i E_j) - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial i} \delta_{ij} \right) \\ &= \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial}{\partial i} \left(E_i E_j - \frac{1}{2} \mathbf{E}^2 \delta_{ij} \right) \end{aligned} \quad (18)$$

同理

$$\left[(\nabla \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{B} - \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{B}^2) \right]_j = \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial}{\partial i} \left(B_i B_j - \frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \delta_{ij} \right) \quad (19)$$

所以

$$\left(\nabla \cdot \vec{\hat{T}}\right)_j = \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial}{\partial i} \left[\epsilon_0 \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^2 \delta_{ij} - E_i E_j \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \delta_{ij} - B_i B_j \right) \right] \quad (20)$$

而由张量散度的定义

$$\left(\nabla \cdot \vec{\hat{T}}\right)_j = \sum_i \frac{\partial}{\partial i} T_{ij} \quad (21)$$

得到动量流密度张量为

$$T_{ij} = \epsilon_0 \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^2 \delta_{ij} - E_i E_j \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \delta_{ij} - B_i B_j \right) \quad (22)$$

理论上，在 \mathbf{T} 上面加上任意一个满足 $\nabla \cdot \vec{\hat{T}}' = \mathbf{0}$ 的张量场，均可以使电磁场动量守恒，但是若规定无穷远处动量流密度为零，则可以证明 $T'_{ij} = 0$.

电场的高斯定理

预备知识 流量和通量

结论

高斯定理是著名的麦克斯韦方程组中四条方程中的一条。麦克斯韦方程组完整地描述了电磁场的一切分布和变化规律。

积分形式

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho dV \quad (1)$$

在空间中任意选取一个闭合曲面，电场在这个曲面上从内向外的通量等于被曲面包围的总电荷量除以真空中的介电常数。

微分形式

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2)$$

空间任意一点的电场散度等于电荷密度除以真空中的介电常数。

电通量

如果把电场想像成是某种不可压缩液体的速度场（液体流动的速度矢量在空间上的分布），那么对于电场中假想的一个不闭合的空间曲面，电通量就相当于单位时间流过该曲面的体积。类比流量和通量中得到的公式

$$dV/dt = \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{s} \quad (3)$$

电通量为（符号为 Φ ，国际单位 Nm^2/C ）

$$\Phi = \oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} \quad (4)$$

即电通量就是电场在所选曲面上的通量。

高斯定理的积分形式

高斯定理的积分形式说的是，选取任意闭合曲面为高斯面（由内向外为正方向），高斯面上的电通量等于高斯面内的总电荷除以常数。即

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho dV \quad (5)$$

其中常数 ϵ_0 为真空中的电介质常数，又叫真空中的电容率。为了便于理解和记忆，可以把电场想像成某种流体的场，这种流体从正电荷流出，流入负电荷，流出和流入的速率（单位时间的体积）和电荷的大小成正比，比例系数为 $1/\epsilon_0$ 。从数学上来说，有电荷的地方电场就有源， ρ/ϵ_0 就叫做电场的源密度。高斯定理的证明见下文。

高斯定理的微分形式

根据数学上的高斯定理，对任何闭合曲面，若一个标量场在曲面内的体积分等于一个矢量场在曲面上的面积分，该标量场就是该矢量场的散度。把该结论用于上式，可得电场的散度为

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0 \quad (6)$$

拓展阅读 静电场的拉普拉斯方程

高斯定理的证明（积分形式）

- 首先只考虑高斯面内一个点电荷 Q 对一个面元 $d\mathbf{s}$ 的通量。若元 $d\mathbf{s}$ 与相对于点电荷的位矢 \mathbf{r} 的夹角为 θ ，通过该面元的电通量为

$$d\Phi = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = \frac{kQ}{r^2} d\mathbf{s} \cdot \cos \theta \quad (7)$$

下面证明保持以 ds 为底面， Q 为顶点的圆锥的任意一个截面的电通量都是一样的（即图 1 中 ds 和 ds' 的电通量一样）。要证明这点，首先考虑两个与 Q 距离相同，但角度不同的截面（见图 2），其中 ds 垂直于 \mathbf{r} 。他们的电通量分别为

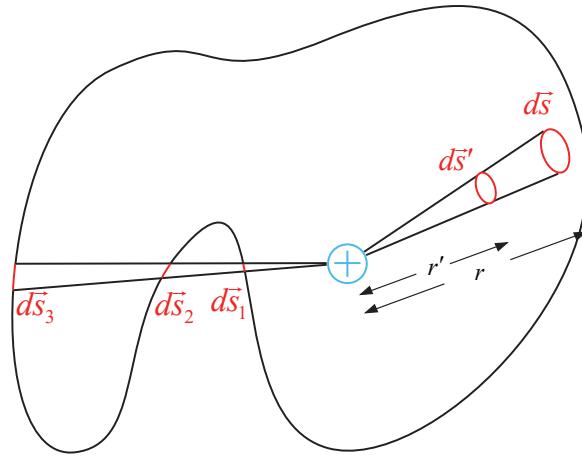


图 1: 图 1



图 2: 图 2

$$d\Phi_a = E \cdot d\vec{s}_a \cdot \cos \theta \quad (8)$$

$$d\Phi_b = E \cdot d\vec{s}_b \quad (9)$$

然而显然有 $ds_b = ds_a \cdot \cos \theta$ (注意圆锥非常细长的时候, 母线近似都平行), 所以有

$$d\Phi_a = d\Phi_b \quad (10)$$

即, 原地改变截面的角度, 电通量不变. 下面再考虑角度垂直但与电荷距离不同的情况 (图 3 中的 ds_1 与 ds_2) 他们的电通量分别为

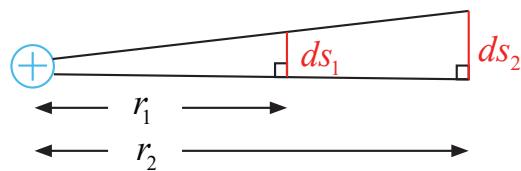


图 3: 图 3

$$d\Phi_1 = \frac{kQ}{r_1^2} ds_1 \quad (11)$$

$$d\Phi_2 = \frac{kQ}{r_2^2} ds_2 \quad (12)$$

然而根据几何关系，有

$$\frac{ds_1}{r_1^2} = \frac{ds_2}{r_2^2} \quad (13)$$

所以仍然有.

$$d\Phi_1 = d\Phi_2 \quad (14)$$

2. 若把整个闭合曲面划分成无数个小面元（如图 4），每个小面元 ds_i 根据上面推理，都等效为半径 R 上的一块垂直面元 ds_i 。这样，这些等效面元可以重新组成一个半径为 R 的球体。而球体的通量为

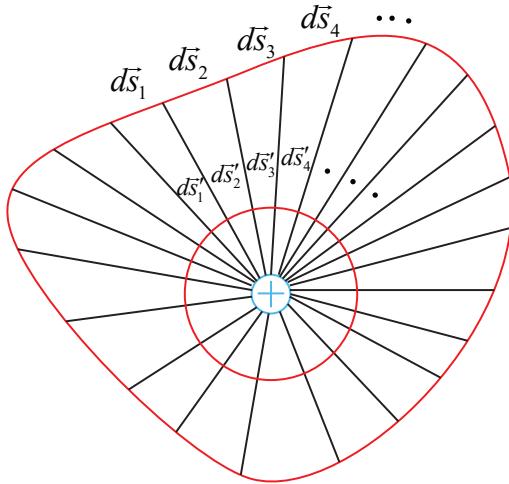


图 4: 图 4

$$\Phi = \frac{kQ}{R^2} \cdot 4\pi R^2 = 4\pi kQ \quad (15)$$

令真空中的介电常数 $\epsilon_0 = 1/4\pi k$ ，就得到高斯定理

$$\Phi = Q/\epsilon_0 = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho \cdot dV \quad (16)$$

若高斯面内有许多点电荷或电荷分布，则根据电场叠加原理，对每个点电荷应用上述结论再相加即可。另外，若出现高斯面重叠的情况（如图

1 中的 $d\mathbf{s}_1$, $d\mathbf{s}_2$, $d\mathbf{s}_3$), 高斯定理仍然成立. 这是因为 $d\mathbf{s}_1$ 和 $d\mathbf{s}_2$ 的电通量大小相等, 然而方向相反, 对总电通量的贡献抵消, 只有剩下的 $d\mathbf{s}_3$ 才对总电通量有贡献, 这和不重叠的情况一样.

再来证明高斯面外部的点电荷对高斯面的总电通量没有贡献. 因为从高斯面外的点电荷(电场源)“流入”高斯面的电通量全部“流出”, 这是由于从电荷出发的所有圆锥要么不被高斯面截断, 要么被高斯面截断两次, 一次进一次出, 且两个界面上的电通量大小相同, 总电通量贡献为零.

法拉第电磁感应定律

预备知识 磁通量

电磁感应定律的积分形式

闭合线圈产生的感生电动势等于线圈内磁通量随时间的变化率. 方向由楞次定律决定.

即

$$\varepsilon = -\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} = -\int \frac{d\mathbf{B}}{dt} \cdot d\mathbf{a} \quad (1)$$

另一方面, 感生电动势是由感生电场产生的.

$$\varepsilon = \oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} \quad (2)$$

合并上面两式, 得

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = -\int \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{a} \quad (3)$$

如果我们假设感生电场只与电场的分布和变化率有关, 则这个公式对空间中任何假想中的回路都成立, 而不需要有真正的线圈存在. 注意上式中的磁场是空间中的所有磁场.

电磁感应定律的微分形式

旋度定理告诉我们, 若对任意闭合回路, 一个矢量场对曲面正方向的面积分等于另一个场在曲面边界线正方向的线积分, 那么前者是后者的旋度. 应用到上式, 可得电场的旋度为

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4)$$

电磁场的能量守恒 坡印廷矢量

预备知识 麦克斯韦方程组, 电场的能量, 磁场的能量

结论

1. 坡印廷矢量

真空中电磁场的能流密度为

$$\mathbf{s} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (1)$$

\mathbf{s} 就是坡印廷矢量.

2. 电磁场能量守恒积分形式

$$\int_V \frac{dw}{dt} dV + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_E dV + \oint_{\Omega} \mathbf{s} \cdot d\mathbf{a} = 0 \quad (2)$$

选取任意的一个闭合曲面 Ω , 内部空间记为 V , 以下三者之和为零.

- (a) 电磁场对 V 中所有电荷做功的功率
- (b) V 中电磁场能量增加的速率
- (c) 以及通过曲面 Ω 流出的能量的速率

3. 电磁场能量守恒微分形式

$$\frac{dw}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{s} = 0 \quad (3)$$

空间中选取任意一点, 以下三者之和为零.

- (a) 电磁场对电荷的功率密度
- (b) 电磁场能量密度增量
- (c) 能流密度散度

推导

类比电流的连续性方程（即电荷守恒），若电磁场不对电荷做功，能量守恒可以写成

$$\frac{\partial \rho_E}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{s} = 0 \quad (4)$$

的形式。其中 \mathbf{s} 是电磁场的能流密度（也叫坡印廷矢量）（参考流密度）。但若再考虑上电磁场对电荷做功，则还需要加上一项做功做功功率密度 $\partial w / \partial t$ ，即单位时间单位体积电磁场对电荷做的功）。

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial \rho_E}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{s} = 0 \quad (5)$$

第一项中电磁场对电荷做功即广义洛伦兹力做功（功率密度）

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} = \rho (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{v} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \quad (6)$$

假设电磁场的能量守恒式 5 成立，那么 $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = -\partial \rho_E / \partial t - \nabla \cdot \mathbf{s}$ 。等式右边只与场有关，所以应该把电流密度 \mathbf{j} 用麦克斯韦方程组替换换成场的表达式，即

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (7)$$

代入得

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= \left(\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \cdot \mathbf{E} \\ &= \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \mathbf{E} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \mathbf{E} \end{aligned} \quad (8)$$

式 5 第二项中， ρ_E 是电场能量密度和磁场能量密度之和，即

$$\begin{aligned} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) &= \mathbf{B} (\nabla \cdot \hat{\mathbf{x}}) + (x \nabla) \cdot \mathbf{B} - \hat{\mathbf{x}} (\nabla \cdot \mathbf{B}) - (\mathbf{B} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{x}} \\ &= (x \nabla) \cdot \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x} \end{aligned} \quad (9)$$

现在我们可以把式 8，式 9 代入式 5 中，求出 $\nabla \cdot \mathbf{s}$ 。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{s} &= -\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial \rho_E}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \mathbf{E} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \mathbf{E} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{B}^2}{\mu_0} \right) \\ &= -\frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \mathbf{E} - \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \mathbf{B} \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $(\nabla \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{E} = (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{B} - \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})$, 因为 $\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{B} - (\nabla \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{E}$ (Gibbs 算子相关公式). 代入得

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{s} &= -\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial \rho_E}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{E} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \mathbf{E} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{B}^2}{\mu_0} \right) \\ &= -\frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{B} - \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot \mathbf{B} + \frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})\end{aligned}\quad (11)$$

其中 $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$, 代入得

$$\nabla \cdot \mathbf{s} = \nabla \cdot \left(\frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \right) \quad (12)$$

即

$$\mathbf{s} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (13)$$

这就是电磁场的能流密度.

事实上, 给 \mathbf{s} 再加上任意一个散度为零的场, 式 12 都能满足, 但为了简洁起见, 一般写成式 13.

非齐次亥姆霍兹方程 推迟势

波动方程为

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = f(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

用格林函数法求解，令格林函数满足

$$\nabla^2 G - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (2)$$

这个方程的意义是，如果在时刻 t , \mathbf{r} 处出现一个极短的脉冲，会生成怎样的波函数 G . 求出 G 以后，我们可以把非齐次项 $f(\mathbf{r}, t)$ 看成由许许多多这样的脉冲组成，对空间和时间进行积分. 即可得到式 1 的解.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \int f(\mathbf{r}', t') G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') dV' dt' \quad (3)$$

下文用傅里叶变换法解式 2 解出格林函数为

$$G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \frac{1}{4\pi} \frac{\delta((t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) - t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (4)$$

式 4, 式 3 得式 1 的解为

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{f(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV \quad (5)$$

式 5 与静电场的势能公式很像，但是场源的时间做了修正. 其中 $t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c \equiv t_{ret}$ 定义为推迟时间（retarded time）， $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$ 是波从 \mathbf{r}' 到 \mathbf{r} 所需的时间. 也就是说， $f(\mathbf{r}, t)$ 并不能马上影响 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ，而是需要一个“信号传播时间”才行. 在静电场中，由于场源不随时间变化，所以不需要考虑时间延迟.

具体过程

解格林函数

从物理意义上，要求格林函数在以 \mathbf{r}' 为中心的任意方向都相同，即只是 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ 的函数. 以下为了方便，令 $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. 由于等式右边除了原点外都是零，方程为齐次方程. 齐次解为平面波

$$G(\mathbf{r}, t) = \sum A(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\omega t} \quad (6)$$

求和是对所有满足 $\omega/k = c$ 和边界条件的 ω 和 \mathbf{k} 求和（或积分）。但显然该解在原点不满足要求。为了排除原点，且满足对称性，以 \mathbf{r}' 为原点建立球坐标，改用球坐标中的拉普拉斯方程，方程变为

$$\frac{1}{R^2} \frac{d}{dr} \left(R^2 \frac{dG}{dR} \right) - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 G}{dt^2} = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \quad (7)$$

在 $R \neq 0$ 的条件下解齐次方程，首先分离变量，得到分离变量解（提示：
 $\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dG}{dr}) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rG)$ ）

$$\frac{1}{R} [C_1(\omega) e^{i\omega R/c} + C_2(\omega) e^{-i\omega R/c}] e^{i\omega t} \quad (8)$$

所以通解为式 8 对不同的 ω 求和。然而 ω 是连续的，所以改用傅里叶变换法解方程式 7

$$\begin{cases} A(R, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(R, t, t') e^{i\omega t} dt \\ G(R, t, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} A(R, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \end{cases} \quad (9)$$

式 9 就是式 8 对连续 ω 的求和（积分）得到的通解，待定系数包含在 A 里面，下面的式 12 验证了这点。另外，式 7 右边含时 *delta* 函数的傅里叶变换为

$$\delta(t - t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t'} e^{-i\omega t} d\omega \quad (10)$$

式 9，式 10 代入方程式 7 得到经过时间傅里叶变换的偏微分方程，与式 7 等效。

$$\nabla^2 A(R, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} A(R, \omega) = -e^{i\omega t'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (11)$$

注意这是关于位置的偏微分方程， ω 视为常数。解这条方程，就相当于解出了固定振动频率 ω 的波源所产生的同频率的波动方程。齐次解为

$$A(R, \omega) = \frac{1}{R} [C_1(\omega) e^{i\omega R/c} + C_2(\omega) e^{-i\omega R/c}] \quad (12)$$

（解方程提示： $\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} (R^2 \frac{dA}{dR}) = \frac{1}{R} \frac{d^2}{dR^2} (RA)$ ，令 $\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} (R^2 \frac{dA}{dR}) = \frac{1}{R} \frac{d^2}{dR^2} (RA)$ ）

由于这是方程 $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ 的通解，而式 11 的右边可以看做 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ 时的边界条件，接下来利用边界条件找到适合的待定系数 $C_1(\omega)$ 和 $C_2(\omega)$ 。首先当 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ 时， $R \rightarrow 0$ ， $A \rightarrow \frac{C_1 + C_2}{R}$ 。所以

$$\nabla^2 A(R, \omega) = (C_1 + C_2) \nabla^2 \frac{1}{R} = -4\pi(C_1 + C_2) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (13)$$

(关于 $\nabla^2 \frac{1}{R}$ 见空间狄拉克 delta 函数,). 代入式 11 左边第一项, 得

$$-4\pi(C_1 + C_2)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{\omega^2}{c^2}A(R, \omega) = -e^{i\omega t'}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (14)$$

由于空间 delta 函数 $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sim \frac{1}{R^3}$, 所以相比之下 $\frac{\omega^2}{c^2}A(R, \omega) \sim \frac{1}{R}$ 在 $R \rightarrow 0$ 时可以忽略不计. 等式两边对比系数得

$$C_1 + C_2 = \frac{1}{4\pi}e^{i\omega t'} \quad (15)$$

再考虑式 12 所代表的波函数分量, 第一项代表波源向外传播的球形波, 第二项代表向波源传播的, 所以 $C_2 = 0$, 式 12 变为

$$A(R, \omega) = \frac{1}{R}C_1(\omega)e^{i\omega R/c} = \frac{1}{4\pi R}e^{i\omega t'}e^{i\omega R/c} \quad (16)$$

现在可以把上式进行反傅里叶变换式 9 得到格林函数

$$\begin{aligned} G(R, t, t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} A(R, \omega) e^{-i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4\pi R} e^{i\omega t'} e^{i\omega R/c} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i\omega t} d\omega \\ &= \frac{1}{4\pi R} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(t' + R/c - t)} d\omega \\ &= \frac{1}{4\pi R} \delta(t - R/c - t') \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{\delta((t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) - t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (15) \end{aligned} \quad (17)$$

这就是式 2 的解式 4.

电场波动方程

预备知识 麦克斯韦方程组（介质）[\[??\]](#)

介质中

非线性光学中一般认为介质具有 $\mu = \mu_0$, 且假设 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ 仍然成立

介质中没有自由电荷或自由电流.

类似真空情况的推导过程, 有

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{H}) = -\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} \quad (1)$$

把电位移矢量的定义 $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ 代入上式, 化简为

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{H}) = -\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} \quad (2)$$

介质中的波动方程

对非磁介质

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \quad (1)$$

平面波时

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 (1 + \tilde{\chi}) \mathbf{E} + \mathbf{P}^{NL} = \tilde{\epsilon} \mathbf{E} + \mathbf{P}^{NL} \quad (3)$$

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \tilde{\epsilon} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}^{NL}}{\partial t^2} \quad (4)$$

波浪号表示复数， $\tilde{\epsilon}$ 和 $\tilde{\chi}$ 都只是 ω 而不是场强的函数。先来看线性的情况 ($\mathbf{P}^{NL} = \mathbf{0}$)，例如洛伦兹模型。

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \tilde{\epsilon} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mathbf{0} \quad (5)$$

(见齐次波动方程，先做时间傅里叶变换，再解齐次亥姆霍兹方程，通解是所有平面波) 然而这里的 $\tilde{k}^2 = \mu_0 \tilde{\epsilon} \omega$ 是复数，平面波变为指数衰减的单频单向波。以 z 方向传播 x 方向极化为例，令 $\tilde{k} = k + \kappa$

$$E_x(z, t) = \tilde{E}_{0x} e^{i(\tilde{k}z - \omega t)} = \tilde{E}_{0x} e^{-\kappa z} e^{i(kz - \omega t)} \quad (6)$$

$$\tilde{k} = \omega \sqrt{\mu_0 \tilde{\epsilon}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 + \chi^{(1)}} \quad (7)$$

通解仍然为所有可能的单频单向波的线性组合。实折射率和吸收系数定义为

$$n = \frac{ck}{\omega} = \operatorname{Re} \left[\sqrt{1 + \chi^{(1)}} \right] \approx 1 + \frac{1}{2} \operatorname{Re}[\chi^{(1)}] \quad (8)$$

$$\alpha = 2\kappa = \frac{2\omega}{c} \operatorname{Im} \left[\sqrt{1 + \chi^{(1)}} \right] \approx \frac{\omega}{c} \operatorname{Im}[\chi^{(1)}] \quad (9)$$

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_0 (n + i\alpha c / 2\omega)^2 \quad (10)$$

注意区分 ϵ (permittivity)， ϵ_r (dielectric constant) 和 χ (susceptibility)。有时候 ϵ_r 。不同的书符号可能不一样，以名称和语境为准。

菲涅尔公式

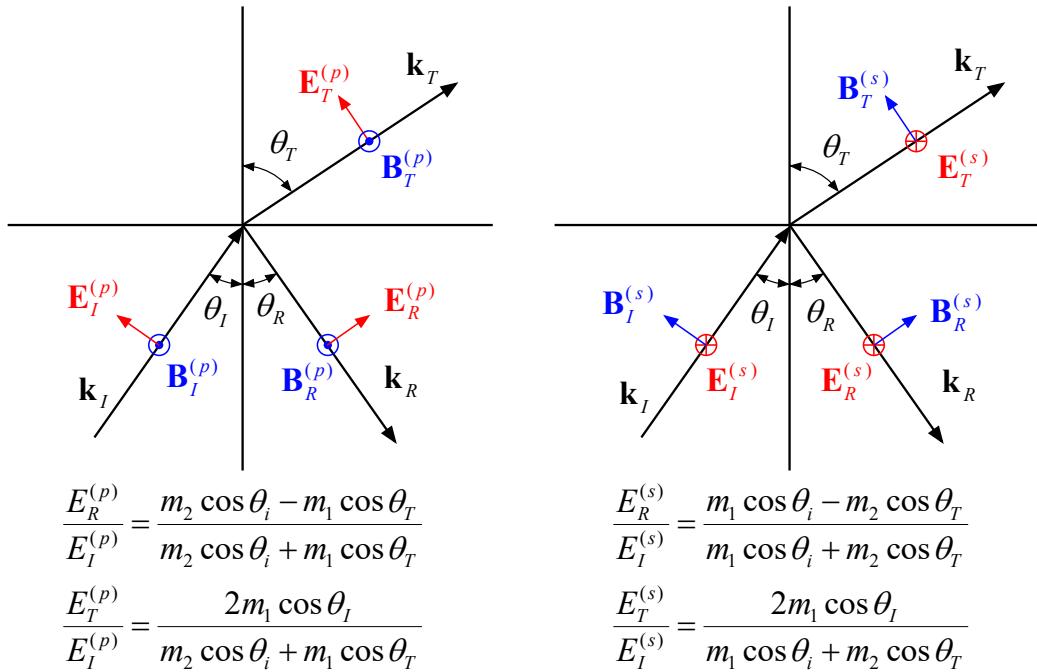


图 1: 菲涅尔公式

利用具体的电磁场的边界条件

- $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ 和 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 分别对应 $\epsilon \mathbf{E}_\perp = \epsilon' \mathbf{E}'_\perp$; $\epsilon \mathbf{B}_\perp = \epsilon' \mathbf{B}'_\perp$.
- $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ 和 $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ 分别对应 $\mathbf{E}_{\parallel\parallel} = \mathbf{E}'_{\parallel\parallel}$ 和 $\mathbf{B}_{\parallel\parallel}/\mu = \mathbf{B}'_{\parallel\parallel}/\mu'$.

现在分两种情况讨论

1. 极化方向垂直于入射面 (右图)

$$\frac{E_R^{(s)}}{E_I^{(s)}} = \frac{m_1 \cos \theta_i - m_2 \cos \theta_T}{m_1 \cos \theta_i + m_2 \cos \theta_T} \quad \frac{E_T^{(s)}}{E_I^{(s)}} = \frac{2m_1 \cos \theta_I}{m_1 \cos \theta_i + m_2 \cos \theta_T} \quad (1)$$

2. 极化方向平行于入射面 (左图)

$$\frac{E_R^{(p)}}{E_I^{(p)}} = \frac{m_2 \cos \theta_i - m_1 \cos \theta_T}{m_2 \cos \theta_i + m_1 \cos \theta_T} \quad \frac{E_T^{(p)}}{E_I^{(p)}} = \frac{2m_1 \cos \theta_I}{m_2 \cos \theta_i + m_1 \cos \theta_T} \quad (2)$$

其中 $m_i = n_i/\mu_i = c\sqrt{\epsilon_i/\mu_i}$, 一般情况下介质的磁导率于真空区磁导率的区别可忽略, 即可以把 m_i 替换为折射率 n_i . 另外注意菲涅尔公式包含相位信息, 即以上的 E 可以是复振幅.

布儒斯特角

我们这里考虑常见的 $n_2 > n_1$ 且 $\mu_1 = \mu_2$ 情况. 由式 2 容易证明当入射角为布儒斯特角 (**Brewster's angle**) 时反射光的平行 (p) 分量消失. 布儒斯特角等于

$$\theta_B = \arctan(n_2/n_1) \quad (3)$$

盒中的电磁波

空间中一个电阻不计的金属盒中有电磁波。金属盒的大小为

$$\begin{cases} 0 \leq x \leq a \\ 0 \leq y \leq b \\ 0 \leq z \leq c \end{cases} \quad (1)$$

电场的波动方程为

$$\nabla^2 \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2)$$

矢量相等的充要条件是三个分量分别相等

$$\nabla^2 E_x = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2}, \quad \nabla^2 E_y = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2}, \quad \nabla^2 E_z = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2} \quad (3)$$

下面以 E_x 为例，用分离变量法得出通解。先令 $E_x = X(x)Y(y)Z(z)T(t)$ 。代入上式，两边同除 $X(x)Y(y)Z(z)T(t)$ 得

$$\frac{d^2 X}{dx^2} \Big/ X + \frac{d^2 Y}{dy^2} \Big/ Y + \frac{d^2 Z}{dz^2} \Big/ Z = \frac{1}{c^2} \frac{d^2 T}{dt^2} \Big/ T \quad (4)$$

由于上式每一项都是一个独立变量的函数，所以每一项都等于一个常数。令这些常数为

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X}{dx^2} \Big/ X &= -k_x^2 & \frac{d^2 Y}{dy^2} \Big/ Y &= -k_y^2 \\ \frac{d^2 Z}{dz^2} \Big/ Z &= -k_z^2 & \frac{1}{c^2} \frac{d^2 T}{dt^2} \Big/ T &= -\omega^2 \end{aligned} \quad (5)$$

(取负号是因为我们只对三角函数解感兴趣，指数函数解在这里无关) 代入上式，这些常数满足

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \omega^2 \quad (6)$$

上面三式的通解是

$$\begin{cases} X = C_1 \cos(k_x x) + C_2 \sin(k_x x) \\ Y = C_3 \cos(k_y y) + C_4 \sin(k_y y) \\ Z = C_5 \cos(k_z z) + C_6 \sin(k_z z) \end{cases} \quad (7)$$

时间函数的解取 $T = C \cos(\omega t)$ (时间函数的相位不重要) 由理想导体的电磁场边界条件

$$E_{//} = 0 \quad \frac{\partial E_{\perp}}{\partial n} = 0 \quad (8)$$

$\partial E_x / \partial x = 0$ ($x \rightarrow a$ 时); $E_x = 0$ ($y \rightarrow b$ 或 $z \rightarrow c$ 时). 把上面的通解带入条件, 得

$$X = C_1 \cos\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \quad Y = C_4 \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \quad Z = C_6 \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \quad (9)$$

三个变量相乘, 令 $C_1 C_4 C_6 = E_{x0}$, 得

$$E_x = E_{x0} \cos\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \quad (10)$$

同理对 E_y , E_z 分析, 得到电场的三个分量在盒内的分布

$$\begin{cases} E_x = E_{x0} \cos\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \\ E_y = E_{y0} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \cos\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \\ E_z = E_{z0} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \cos\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \end{cases} \quad (11)$$

$$T = C \cos(\omega t) \quad (12)$$

且满足 $\omega = \pi \sqrt{n_x^2/a^2 + n_y^2/b^2 + n_z^2/c^2}$ 特殊地, 当盒子是立方体的时候, $a = b = c = L$ 时, $\omega = \pi \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}/L$.

拉格朗日电磁势

由于

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial T}{\partial q_i} = Q_i \quad (1)$$

若非常规势能 $U(q_1, q_2, \dots, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, t)$ 与广义力满足

$$Q_i = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial U}{\partial q_i} \quad (2)$$

且定义拉格朗日量为 $L = T - U$, 则代入可得拉格朗日方程

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (3)$$

现在证明在任意电磁场中运动的点电荷的非常规势为

$$U = q(\Phi - \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) \quad (4)$$

以下用直角坐标证明 $(q_1, q_2, q_3 = x, y, z)$

$$F_i = Q_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i} + \frac{d}{dt} \frac{\partial u}{\partial \dot{x}_i} \quad (5)$$

以 x 为例

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}} = -q \frac{d}{dt} A_x = -q \left[(\nabla A_x) \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right] \quad (6)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = q \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \cdot \mathbf{v} \right) \quad (7)$$

$$Q_x = -\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{d}{dt} \frac{\partial u}{\partial \dot{x}} = q \left[-\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + v_y \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - v_z \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] \quad (8)$$

根据广义洛伦兹力及电磁势的定义

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad \mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} F_x &= q(E_x + v_y B_z - v_z B_y) \\ &= q \left[-\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + v_y \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - v_z \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

对比可得 $F_x = Q_x$.

第四章

量子力学

原子单位

预备知识 玻尔原子模型

在量子力学的许多理论或数值计算中，选用原子单位（**atomic unit**）会更方便。原子单位中，不同物理量的符号都记为“a.u.”，而事实上，可以把“a.u.”等效为数值 1（无量纲），例如角频率单位“Rad/s”中单位“Rad”可等效为数值 1。以后我们只有在想要强调原子单位时，才加“a.u.”。

单位转换的一般方法为定义一个转换常数 β ，例如原子单位中，我们把一个电子的质量定义为“1 a.u.”，把以 a.u. 为单位的质量 m_a 转换为以 kg 为单位的质量 m ，可先定义转换常数为

$$\beta_m = m_e / \text{a.u.} \approx 9.109 \times 10^{-31} \text{kg} \quad (1)$$

则有

$$m = \beta_m m_a \quad (2)$$

再次注意 m_a 是一个没有量纲的变量。

[表 1](#) 是基本单位的转换常数表。其中许多常量都是基于氢原子的玻尔模型的基态（原子核不动）的参数定义的（表中简称基态）。

用精细结构常数可以化简以下部分公式。注意这是一个无量纲常数。

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 7.2973525664 \times 10^{-3} \approx \frac{1}{137} \quad (3)$$

使用原子单位可以简化许多公式，同时表达微观尺度的物理量变得更容易

- 点电荷电势

$$V(\mathbf{r}) = q/r \quad (4)$$

- 薛定谔方程

$$-\frac{1}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

表 1: 原子单位转换常数表

物理量	β (单位: $SI/a.u.$)	描述	数值
质量 m	m_e	电子质量	$9.10938215 \times 10^{-31}$
长度 x	$\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c}$	玻尔半径 a_0	$5.2917721067 \times 10^{-11}$
速度 v	$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} = \alpha c$	基态电子速度 v_0	2.187691263×10^6
电荷 q	e 或 q_e	电子电荷	$1.6021766208 \times 10^{-19}$
时间 t	a_0/v_0	长度除以速度	$2.418884326 \times 10^{-17}$
角动量 L	$m_e v_0 a_0 = \hbar$	长度乘以动量	$1.054571800 \times 10^{-34}$
电势 V	$\frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0}$	基态轨道电势	27.211386019
能量 E	$\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = \alpha^2 m c^2$	基态电子势能大小	$4.3597446499 \times 10^{-18}$
电场强度 \mathcal{E}	$\frac{e}{(4\pi\epsilon_0) a_0^2}$	基态轨道电场强度	$5.1422067070 \times 10^{11}$
磁感应强度 B	$\frac{\hbar}{e a_0^2}$	无	2.350517550×10^5

例 1 电场中电子的薛定谔方程

SI 单位下电子的薛定谔方程为 (偶极子近似)¹

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} \psi + ex\mathcal{E}(t)\psi = i\hbar \frac{d}{dt} \psi \quad (6)$$

其中 $\mathcal{E}(t)$ 是电场. 注意到上式中每一项都具有能量量纲, 为了化为更简单的无量纲方程, 把等式两边除以能量单位 $\beta_E = \hbar^2/(m_e \beta_x^2)$, 得

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d(x/\beta_x)^2} \psi + em_e \beta_x^3 \beta_{\mathcal{E}} / \hbar^2 \cdot \left[\frac{\mathcal{E}(t)}{\beta_{\mathcal{E}}} \right] \left(\frac{x}{\beta_x} \right) \psi = m_e \beta_x^2 / (\beta_t \hbar) \cdot i \frac{d}{d(t/\beta_t)} \psi \quad (7)$$

现在定义一些无量纲的物理量, $x_a \equiv x/\beta_x$, $t_a \equiv t/\beta_t$, $\mathcal{E}_a \equiv \mathcal{E}/\beta_{\mathcal{E}}$, 代入得^{2 3}

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d x_a^2} \psi + \frac{em_e \beta_x^3 \beta_{\mathcal{E}}}{\hbar^2} \cdot \mathcal{E}_a(t_a) x_a \psi = \frac{m_e \beta_x^2}{\beta_t \hbar} \cdot i \frac{d}{d t_a} \psi \quad (8)$$

¹为了区别能量与电场, 以下用 E 表示能量, 用 \mathcal{E} 表示电场.

²严格来说, 波函数也要变为 $\psi = \beta_{\psi} \psi_a$ 但注意到薛定谔方程为齐次方程, 两边可约去 β_{ψ} , 故波函数无需转换. 但要注意 $\psi(x_a) = \psi(x/\beta_x)$.

³注意这里定义 $\mathcal{E}_a(t_a) = \beta_{\mathcal{E}} \mathcal{E}(t) = \beta_{\mathcal{E}} \mathcal{E}(\beta_t t_a)$

如果我们适当选择不同的 β , 就有可能将上式简化为

$$-\frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_a^2} \psi + \mathcal{E}_a(t_a) x_a \psi = i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t_a} \psi \quad (9)$$

不难验证, 表中给出的 β 就满足这样的条件.

在量子力学问题的数值计算中, 通常先使用原子单位来化简公式.

事实上, 原子单位有不同的版本, 以适用不同的问题.

例 2 另一种原子单位

当问题涉及一基本角频率 ω 的时候, 可选择 $\beta_E = \hbar\omega$ 做能量单位. 为了让薛定谔方程仍然保持式 9 的形式, 在式 7 的推导中, 令能量单位为

$$\beta_E = \frac{\hbar^2}{m_e \beta_x^2} = \hbar\omega \quad (10)$$

得长度单位为

$$\beta_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega}} \quad (11)$$

令式 8 中两个含有 β 的因子为 1, 得

$$\beta_{\mathcal{E}} = \frac{\hbar\omega}{e\beta_x} \quad \beta_t = \frac{1}{\omega} \quad (12)$$

一种常见的情况是平面波电场 $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t)$, 定义 $\mathcal{E}_{a0} = \mathcal{E}_0/\beta_{\mathcal{E}}$, 则该原子单位下的电场为

$$\mathcal{E}_a(t_a) = \mathcal{E}(t)/\beta_{\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{E}_0}{\beta_{\mathcal{E}}} \cos(\omega t) = \mathcal{E}_{a0} \cos(t_a) \quad (13)$$

注意右边不含 ω , 形式更简洁.

电子轨道与元素周期表

在这里，用最简单的方式介绍原子的壳层结构，并解释元素周期表如何根据壳层结构分出每个周期。

首先画一下原子轨道

为方便画图和描述，用下图来表示原子，假设电子的轨道是一个个圆圈。现在要把电子放到这些轨道上面来，使电子的总能量最小。这种状态叫做原子

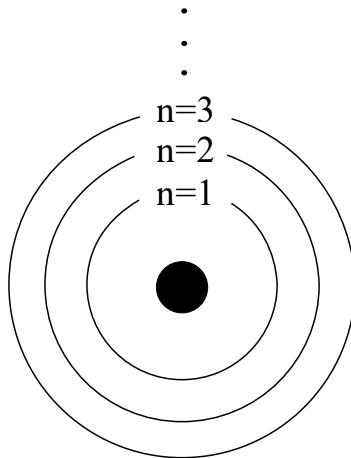


图 1: 电子轨道

的基态。理想的状态是，所有电子都在最小的一圈轨道上，但是由于每条轨道只能容纳一定数目的电子，另一些电子不得不进入其他轨道。

为了解释每条轨道能容纳多少电子，把每个轨道的“空位”用一行格子描述。当一行格子被电子填满时，该轨道就不能容纳更多电子了。给不同的格子命名：从半径最小的轨道开始，用数字 1, 2, 3…依次命名每条轨道，这些数字也叫主量子数，用 n 来表示。在上图中，每条轨道从第一列开始依次用 $S, P, D, F\dots$ 命名，每一列有相同的角量子数，用 l 来表示。 $S, P, D, F\dots$ 的角量子数依次是 $l = 0, 1, 2, 3\dots$ 把行标和列标组合起来，就能得到任意一个格子的名称，例如第三行第二列的格子叫做 $3P$ 。对于主量子数为 n 的行，角量子数从 0 增加到 $n - 1$ ，也就是说第 n 行有 n 个格子。

接下来，每个格子又能装不同数目的电子，任意一格能装的电子数等于

	1 = 0	1	2	3
	S	P	D	F
...				
n=4	4S	4P	4D	4F
n=3	3S	3P	3D	
n=2	2S	2P		
n=1	1S			

图 2: 用格子描述电子轨道

$(2l + 1) \times 2$. 这是因为, 对于角量子数为 l 的格子, 还存在另一个参数 m , 叫磁量子数. 对于特定的角量子数 l , m 可以取 $-l, -l + 1 \dots 0, \dots l - 1, l$ 等 $2l + 1$ 个不同的值. 所以每个格子又可以根据不同的 m 细分成 $2l + 1$ 个小格子. 最后, 每一个小格子里面能装两个电子. 总共算下来, 第 n 行刚好可以装 n^2 个电子 (见下图).

到此为止, 每条轨道承载电子的数目已经解释清楚了, 但是应该如何把电子往格子里面放呢? 为了使电子总能量最小, 对于氢原子 (1 个核外电子), 显然电子应该放在 $1S$ 格子里, 氦原子 (2 个核外电子) 可以把两个电子都放在 $1S$ 格子里, 从而把 $n = 1$ 的轨道填满, 这就是第一周期的两个原子的电子分布. 对于锂原子 (3 个核外电子) 可以在氦原子的基础上往 $2S$ 格子里放一个电子…但奇怪的是, 填电子的顺序并不是从下到上从左到右, 而是如下图中的绿色线条和箭头所示, 即按照 $1S, 2S, 2P, 3S, 3P, 4S, 3D, 4P, 5S \dots$ 的顺序来填上图的格子. 格子内的数字表示每格能装下的电子数, 即 $(2l + 1) \times 2$.

	1 = 0	1	2	3	4
	S	P	D	F	G
...					
n=4	2	6	10	14	18
n=3	2	6	10	14	
n=2	2	6			
n=1	2				

图 3: 轨道的填充顺序

元素周期表的排序

要判断某个原子所在的周期，就先根据原子序号找出上图中所有装有电子的格子，其中 n 最大的格子就是该元素所在的周期。例如 30 号元素，可以按照上图绿色线条的顺序占满 $1S, 2S, 2P, 3S, 3P, 4S, 3D$ （这些格子能容纳的总电子数刚好是 30）。其中 $4S$ 的主量子数最大， $n = 4$ ，所以 30 号元素在第四周期。按照这个规律，把上图按照周期分类如下。

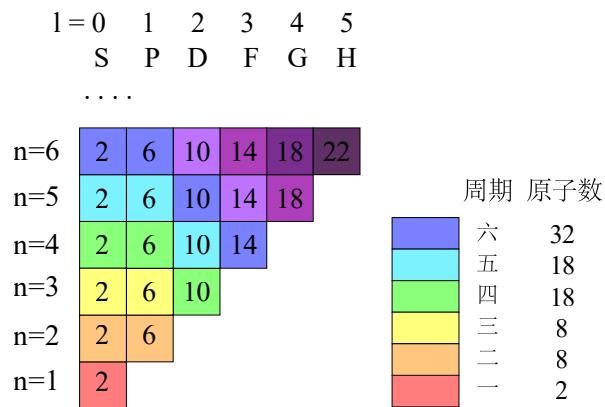


图 4: 划分周期

玻尔原子模型

预备知识 圆周运动^[??], 向心力

结论

能级公式

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \approx -13.6eV\frac{Z^2}{n^2} \quad (1)$$

玻尔半径

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m} \quad (2)$$

玻尔原子模型是量子力学发展的早期被提出的一种解释类氢原子光谱的模型. 该词条讨论其最简单的版本.

所有原子中最简单的一类叫类氢原子, 类氢原子只有一个电核外电子, 以及一个带 Z 个元电荷的原子核. 以下的计算假设二者为质点和点电荷, 原子核不动, 电子绕原子核做圆周运动. 运用经典力学和库仑力公式, 可求出电子在不同半径下做圆周运动的能量. 库伦定律与牛顿定律(圆周运动)分别为

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{(Ze)e}{r^2} \quad F = ma = m\frac{v^2}{r} \quad (3)$$

解得电子速度为

$$v = e\sqrt{\frac{Z}{4\pi\epsilon_0 mr}} \quad (4)$$

动能与势能分别为

$$E_K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad E_P = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} \quad (5)$$

总能量为

$$E = E_K + E_P = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (6)$$

到此为止，我们还没有用到量子力学。然而这样的模型与真实的类氢原子相比有两个致命的缺陷：第一，根据电动力学，圆周运动的电子会向外辐射电磁波，能量减少，最终坠入原子核；第二，该模型允许氢原子的能量具有连续值（因为 r 可连续变化），而实验中氢原子只能放出特定能量的光子，说明只能取特定的能量，即存在离散的能级，我们把能级由低到高记为 $E(n=1, 2, 3\dots)$ 。

以上矛盾说明围观世界的例子不遵守经典力学和电磁学。玻尔为了解释实验，在经典力学和电磁学上加入了一个条件：角动量量子化。

以原子核为原点，电子轨道平面的法向量为 z 轴，由于电子的位矢 \mathbf{r} 与动量 \mathbf{p} 始终垂直，电子的角动量为

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = mvr \cdot \hat{\mathbf{z}} \quad (7)$$

玻尔引入的角动量量子化条件为

$$mvr = n\hbar \quad (8)$$

其中 n 可以取任意正整数， \hbar 为约化普朗克常量

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (9)$$

该条件也可以等效理解为驻波条件，即允许的圆形轨道长度是德布罗意波长的整数倍。但注意只有原子核不动是可以这样理解。

$$2\pi r \cdot n = \frac{h}{mv} \quad (10)$$

注意式8与式10等效。把式4带入了该条件，解得可能的轨道半径为

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = mvr \cdot \hat{\mathbf{z}} \quad (11)$$

可见轨道与 n^2 成正比。

氢原子($Z=1$)的 r_1 是量子力学中一个重要常数，叫玻尔半径，一般记为 a_0 。把 r_n 代入式4，得到对的电子速度为

$$v_n = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \cdot \frac{1}{n} \quad (12)$$

代入式6，得到能级表达式为

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6eV \frac{Z^2}{n^2} \quad (13)$$

最简单的原子是氢原子， $Z=1$ ，最低的能级为 $n=1$ ，所以氢原子基态的能级为 $-13.6eV$ 。这是一个著名的常数，建议熟记。

类氢原子的约化质量

预备知识 玻尔原子模型

玻尔氢原子模型假设原子核的质量远大于电子质量. 得出的结论是

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2h^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6eV \frac{Z^2}{n^2} \quad (1)$$

当考虑原子核运动的时候 (但仍然忽略万有引力), 上式变为

$$E_n = -\frac{\mu Z^2e^4}{8\epsilon_0^2h^2} \frac{1}{n^2} \quad (2)$$

其中 $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ 叫做约化质量. m_1 和 m_2 分别是原子核质量和核外电子质量. 要注意的是, 这时的 E_n 包括了原子核的动能.

推导

1. 经典力学的条件

$$m_1 \frac{v_1^2}{r_1} = m_2 \frac{v_2^2}{r_2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{(r_1 + r_2)^2} \quad (3)$$

2. 角动量量子化条件 (注意角动量是总角动量!)

$$m_1v_1r_1 + m_2v_2r_2 = n\hbar \quad (4)$$

3. 质心系条件

$$m_1r_1 = m_2r_2, m_1v_1 = m_2v_2 \quad (5)$$

要求的能量为

$$E_n = \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_1 + r_2} \quad (6)$$

联立这几条式子, 就可以解出考虑原子核运动的能级公式.

推荐的步骤是, 把所有的 r_2 和 v_2 写成 m_1r_1/m_2 和 m_1v_1/m_2 . 然后用和玻尔原子模型中一样的方法解出来即可.

康普顿散射

预备知识 光子，相对论动量，相对论能量

高能光子与自由电子发生弹性碰撞，要考虑相对论效应。由于光子能量很高，可假设自由电子初始不动。

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (1)$$

光子的动量为 $p = h/\lambda$ ，能量为 cp 。能量守恒

$$m_e c^2 + cp_i - cp_f = \sqrt{m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2} \quad (2)$$

动量守恒

$$\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f = \mathbf{p}_e \quad (3)$$

两式平方，消去 p_e 得波长差式 1.

概率流密度

预备知识 含时薛定谔方程

结论

一维情况下，对于某个波函数 $\psi(x, t)$ ，定义概率流为

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (1)$$

某个区间中的概率增加率等于流入该区间的概率流

$$\frac{d}{dt} P_{ab}(t) = J(b, t) - J(a, t) \quad (2)$$

三维情况下，概率流的定义变为

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (3)$$

且有

$$\frac{d}{dt} P_V(t) = \frac{d}{dt} \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \int_S \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{s} \quad (4)$$

或写为概率守恒公式（类比电荷守恒）

$$\frac{d}{dt} (\psi^* \psi) + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (5)$$

平面波的概率流的速度就是例子密度.

推导

对一维情况有

$$\frac{d}{dt} P_{ab} = \frac{d}{dt} \int_a^b \psi^* \psi dx = \int_a^b \left(\psi \frac{\partial}{\partial t} \psi^* + \psi^* \frac{\partial}{\partial t} \psi \right) dx \quad (6)$$

一维薛定谔方程以及复共轭为

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi \quad (7)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V \psi^* \quad (8)$$

代入上式的时间微分，得

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} P_{ab} &= \frac{i\hbar}{2m} \int_a^b \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_a^b \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \Big|_{x=a}^{x=b} = J(a) - J(b) \end{aligned} \quad (9)$$

三维情况的证明可类比.

概率流的速度

类比经典力学或电磁学中的 $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$ ，若定义概率流速度为概率流除以概率密度，则平面波 $\psi(x) = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ 的概率流速为

$$\mathbf{v} = \mathbf{j}/|\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} (-|A|^2 i\mathbf{k} - |A|^2 i\mathbf{k}) / |A|^2 = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}_{CM} \quad (10)$$

所以平面波的概率流速度等于具有相同动量的经典粒子的速度.

能量归一化

想要能量归一化，需要

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_E^*(x) \psi_E(x) dx = \delta(E - E') \quad (1)$$

能不能在动量归一化的波函数基础上修改，得到能量归一化的本征函数呢？动量归一化的要求是

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \psi_k(x) dx = \delta(k - k') \quad (2)$$

另外注意 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, $E' = \hbar^2 / k'^2 2m$.

$$\delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 - k'^2\right)\right) \quad (3)$$

根据 δ 函数的性质，若 x_0 是 $f(x)$ 的一个零点

$$\delta(f(x)) = \frac{1}{f'(x)} \delta(x - x_0) \quad (4)$$

所以

$$\begin{aligned} \delta(E - E') &= \delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2 - k'^2\right)\right) = \frac{m}{\hbar^2 k} \delta(k - k') \\ &= \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \psi_k(x) dx \end{aligned} \quad (5)$$

可得

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} \psi_k(x) \quad (6)$$

氢原子基态的波函数

预备知识 波函数简介

由于波函数的统计诠释，统计在量子力学中经常碰到，所以这里举一个例子让你熟悉一下统计的一些常见计算。

氢原子是唯一有解析解的物理实例，因为它结构简单，只有一个核外电子。由于核外电子质量又远小于原子核的质量，忽略核的运动，且不计万有引力。

氢原子基态的波函数为 $\psi(\mathbf{r}) = Ae^{-r/a}$ ，其中 $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$ 是量子理论中一个重要的常数，玻尔半径。由于这是个球对称函数，所以氢原子的波函数通常在球坐标中表示，即表示成三个球坐标的函数 $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \phi)$ 。其模长平方同样表示粒子在某点出现的概率密度。由于氢原子基态的波函数是球对称的，所以只是 r 的函数。

归一化

概率密度必须归一化，也就是说，在所有地方找到电子的概率之和为必为 1。

所以可以用归一化来确定波函数前面的系数 A 。把概率密度对整个空间体积分

$$1 = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \int_0^{+\infty} (A^2 e^{-2r/a}) (4\pi r^2 dr) = A^2 \pi a^3 \quad (1)$$

所以 $A = 1/\sqrt{\pi a^3}$ ，

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (2)$$

位置的平均值

根据连续概率分布中平均值（或数学期望）的定义

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \mathbf{0} \quad (3)$$

积分显然为零，因为波函数关于中心呈球对称分布，各个方向的 \mathbf{r} 互相抵消了。所以如果对足够多个处于基态的氢原子测量电子的位置，并求平均位置（矢量），一定会在原子核处。

电子离原子核距离的平均值

如果在上题中，求平均值的不是位置矢量，而是位置的大小，那么结果显然是大于零的.

$$\langle r \rangle = \int r |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \int r (A^2 e^{-2r/a}) (4\pi r^2 dr) = \frac{3}{8} a^4 A = \frac{3}{2} a \quad (4)$$

注意这比玻尔半径要大.

电子最可能出现的位置

一个位置的波函数模长平方越大，电子越有可能出现在这个位置. 所以现在要求的是概率密度出现最大值的位置.

根据指数函数的性质，最大值 $|\psi(\mathbf{r})|_{\max}^2 = (e^{-0/a}/\sqrt{\pi a^3})^2 = 1/(\pi a^3)$ ，最大值位置为 $\mathbf{r} = \mathbf{0}$.

电子与原子核最可能的距离

若定义径向概率密度为

$$f(r) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{\int_r^{\Delta r} |\psi(\mathbf{r})|^2 (4\pi r^2 dr)}{\Delta r} = 4\pi r^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (5)$$

要求最可能出现的半径 $f(r)_{\max}$ ，可以对其求导（见导数与极值）. 即 $df(r)/dr = 0$ 即 $8re^{-2r/a}/a^3 - (4/a^3)(2/a)r^2 e^{-2r/a} = 0$ ，解得 $a = r$.

这个重要结论说明，玻尔半径就是氢原子基态中电子与原子核最可能的距离.

算符对易与共同本征函数

预备知识 厄米矩阵，本征函数的简并

命题

以下两个条件互为充分必要条件

1. 两个厄米算符 \hat{A} 和 \hat{B} 互相对易.
2. 算符 \hat{A} 和 \hat{B} 的本征方程存在一整套共同的本征函数 ψ_i .

证明条件 $2 \rightarrow 1$

设算符 \hat{A} 和 \hat{B} 有一组共同的本征函数 ψ_i ，则它们同时满足 \hat{A} 和 \hat{B} 的本征方程

$$\begin{cases} \hat{A}\psi_i = a_i\psi_i \\ \hat{B}\psi_i = b_i\psi_i \end{cases} \quad (1)$$

对任何 ψ_i ，都有

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_i) = \hat{A}(b_i\psi_i) = b_i\hat{A}\psi_i = a_i b_i \psi_i \quad (2)$$

$$\hat{B}(\hat{A}\psi_i) = \hat{B}(a_i\psi_i) = a_i\hat{B}\psi_i = a_i b_i \psi_i \quad (3)$$

所以 $\hat{A}\hat{B}\psi_i = \hat{B}\hat{A}\psi_i$ 即

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad (4)$$

即两算符对易.

证毕.

证明条件 $1 \rightarrow 2$

要证明 $1 \rightarrow 2$ ，只需证明 \hat{A} 的一套本征函数都满足 \hat{B} 的本征方程即可.

(1) 算符 \hat{A} 非简并情况 (\hat{B} 是否简并没关系)

先解出算符 \hat{A} 的本征方程 $\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i$, 如果 \hat{A} 算符不发生简并 (见本征函数的简并) 那么本征值各不相同, 且给定一个本征值 a_i 其解只可能是 ψ_i 或者 ψ_i 乘以一个任意复常数 (注释: 其实也可以再相乘一个算符 \hat{A} 不涉及的物理量的函数, 例如总能量算符 \hat{H} 的本征函数还可以再成一个时间因子 $e^{i\omega t}$).

因为算符对易, 有

$$\hat{A}(\hat{B}\psi_i) = \hat{B}(\hat{A}\psi_i) = a_i(\hat{B}\psi_i) \quad (5)$$

把式中的 $\hat{B}\psi_i$ 看成一个新的波函数, 上式说明 $\hat{B}\psi_i$ 是算符 \hat{A} 和本征值 a_i 的另一个本征函数. 根据以上分析, $\hat{B}\psi_i$ 必定是 ψ_i 乘以某个复常数 (命名为 b_i), 即

$$\hat{B}\psi_i = b_i\psi_i \quad (6)$$

而这正是 \hat{B} 的本征方程 (而 \hat{B} 也是厄米矩阵, 所以作为本征值 b_i 的数域从复数缩小到实数).

证毕.

(2) 算符 \hat{A} 简并情况

假设算符 \hat{A} 的所有本征值为 a_i (各不相同), 任意一个 a_i 有 n_i 重简并. 若 $n_i = 1$, 对应唯一一个 ψ_i , 那么根据上文对非简并情况的推理, ψ_i 就已经是 \hat{B} 的本征函数了.

若 $n_i > 1$, 存在一个 n_i 维希尔伯特子空间, 里面任何一个函数都是 a_i 对应的本征函数, 所以要在子空间中寻找共同本征函数, 只需在子空间中寻找 \hat{B} 的本征函数即可. 令 ϕ_i 为本征值为 a_i 的子空间中的任意函数, 利用对易关系

$$\hat{A}(\hat{B}\phi_i) = \hat{B}(\hat{A}\phi_i) = a_i(\hat{B}\phi_i) \quad (7)$$

这条式子说明 $\hat{B}\phi_i$ 是 \hat{A} 和 a_i 的一个本征函数, 即 $\hat{B}\phi_i$ 仍然在 a_i 的简并子空间中. 所以 \hat{B} 对子空间来说是一个闭合的厄米算符, 所以必有 N 个线性无关的本征函数.

证毕.

以下的内容应该归到厄米算符里面讲 (厄米算符在希尔伯特空间中是无穷维的矩阵, 但是如果一个厄米算符在一个子空间中闭合, 那么就可以通过以下方

法找到 N 个线性无关的本征函数. 先在空间中任意选取 n_i 个线性无关的正交本征函数 $\psi_{i1}, \psi_{i2} \dots \psi_{in_i}$ 作为子空间的基底 (本征函数的简并), 并可以用基底 $\psi_{i1}, \psi_{i2} \dots \psi_{in_i}$ 展开.

令 $\hat{B}\psi_{ij} = \sum_{k=1}^{n_i} W_{jk} \psi_{ik}$ ($W_{jk} = \langle \psi_{ij} | \hat{B} | \psi_{ik} \rangle$, 可以是复数), 则 \hat{B} 在该子空间可以表示成一个 n_i 维的方形矩阵 (记为 W).

以 $\psi_{i1}, \psi_{i2} \dots \psi_{in_i}$ 为子空间的基底, 子空间内任意函数 $\phi = x_1 \psi_{i1} + x_2 \psi_{i2} \dots$ 可

以记为 $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_i} \end{pmatrix}$. 根据算符的矩阵表示, \hat{B} 在子空间的矩阵元就是系数 W_{jk} ,

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & \dots & W_{1n_i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{n_i 1} & \dots & W_{n_i n_i} \end{pmatrix} \quad (8)$$

所以 \hat{B} 在子空间范围内的本征方程的矩阵形式就是

$$W |\phi_k\rangle = b_{ik} |\phi_k\rangle \quad (9)$$

所以 \hat{B} 在子空间的本征值就是 W 的本征值, 本征函数就是 W 的本征矢对应的波函数.

最后要证明的就是 W 矩阵必然存在 n_i 个本征矢. 由于 \hat{B} 是厄米算符, W 必然是厄米矩阵, 而 n_i 维的厄米矩阵必然存在 n_i 个两两正交的复数本征矢和实数本征值 (厄米接矩阵).

综上所述, 对每一个 n_i 重简并的 a_i , 都存在 n_i 个两两正交的本征函数作为 \hat{A} , \hat{B} 算符的共同本征函数.

证毕.

算符的矩阵表示

考虑一个比较基本的问题，算符的“功能”是什么呢？算符就是对函数的一种操作方法。给出一个波函数，经过算符作用，可以得到一个新的波函数。以下给出量子力学中算符的两个重要性质

1. 算符都是线性的，即对任意 n 个波函数 $\psi_1, \psi_2 \dots \psi_n$ ，算符 \hat{Q} 满足

$$\hat{Q}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \dots c_n\psi_n) = c_1\hat{Q}\psi_1 + c_2\hat{Q}\psi_2 \dots c_n\hat{Q}\psi_n \quad (1)$$

2. 算符的本征方程的本征值都是实数。因为根据测量理论，本征值就是可能出现的测量结果，所以本征值一定是实数。

我们已经知道，波函数可以用列向量表示。既然算符都是线性的，而矩阵可以表示列向量的线性变换，是否可以用矩阵代替算符，从而作用于列向量呢？根据性质 1，若是算符 \hat{Q} 的本征函数， $\lambda_1 \dots \lambda_n$ 是对应的本征值（实数），则

$$\begin{aligned} \hat{Q}\psi &= \hat{Q}(c_1\psi_1 + \dots + c_n\psi_n) \\ &= c_1\hat{Q}\psi_1 + \dots + c_n\hat{Q}\psi_n \\ &= \lambda_1c_1\psi_1 + \dots + \lambda_nc_n\psi_n \end{aligned} \quad (2)$$

若把上面的波函数表示成列矢量，就相当于在算符 \hat{Q} 的作用下任意一个列矢量 $|\psi\rangle = (c_1, \dots, c_n)^T$ 总是会变成 $(\lambda_1c_1, \dots, \lambda_nc_n)^T$ 。这个变换可以用矩阵

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (3)$$

来表示，即

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1c_1 \\ \vdots \\ \lambda_nc_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

所以矩阵 \mathbf{Q} 就是算符 \hat{Q} 的矩阵形式，把算符作用在波函数上得到新的波函数，等效于把算符对应的矩阵作用在波函数对应的列矢量上，得到新的波函数对应

的列矢量.

用矩阵和列向量表示的本征方程如下

$$\mathbf{Q} |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \quad (5)$$

解得 $\lambda = \lambda_i$ 时, $|\psi\rangle = |\psi_i\rangle = (0, \dots, 1, \dots, 0)^T$ (只有第 i 个分量等于 1, 其余分量等于 0), 而 $|\psi_i\rangle$ 正是波函数 ψ_i 对应的列向量.

在任意基底中的矩阵

上面的讨论中用矩阵 \mathbf{Q} 表示算符 \hat{Q} , 其局限性在于, 只能使用 \hat{Q} 的本征函数 $\psi_1 \dots \psi_n$ 作为基底. 现在若用其他基底 (正交归一的) $\phi_1 \dots \phi_n$, 能否求出算符 \hat{Q} 对应的矩阵 \mathbf{Q}_1 呢?

下面讨论中, 为了避免混淆, 用 $|f\rangle_\phi$ 表示波函数 f 以 $\phi_1 \dots \phi_n$ 为基底的列矢量, $|f\rangle_\psi$ 表示波函数 f 以 $\psi_1 \dots \psi_n$ 为基底的列矢量.

现取任意一波函数 f , $|f\rangle_\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$, $|f\rangle_\phi = \begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}$. 虽然他们表示同一个波函数 f , 但是由于选取的基底不同, 列向量也不同. 下面讨论他们之间的变换关系.

若把 f 按 ϕ_i 展开, 有

$$\begin{aligned} \int \phi_i^* f \, dx &= \int \phi_i^* (d_1 \phi_1 + \dots + d_n \phi_n) \, dx = \sum_{j=1}^n d_j \int \phi_i^* \phi_j \, dx \\ &= \sum_{j=1}^n d_j \delta_{ij} = d_i \end{aligned} \quad (6)$$

若把 f 按 ψ_i 展开, 有

$$d_i = \int \phi_i^* f \, dx = \int \phi_i^* (c_1 \psi_1 + \dots + c_n \psi_n) \, dx = \sum_{j=1}^n c_j \int \phi_i^* \psi_j \, dx \quad (7)$$

上式用矩阵和列矢量表示, 即 $\begin{pmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$, 即 $|f\rangle_\phi = P|f\rangle_\psi$.

其中 P 矩阵的矩阵元 $P_{ij} = \int \phi_i^* \psi_j \, dx$. P 叫做基底变换矩阵 (或表象变换矩

阵).

若令 $\hat{Q}f = g$, 根据前面的内容, $Q|f\rangle_\psi = |g\rangle_\psi$ 其中 $Q = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$.
下面应用基底变换矩阵, 有 $|f\rangle_\psi = P^{-1}|f\rangle_\phi$; $|g\rangle_\psi = P^{-1}|g\rangle_\phi$. 代入上式得

$$QP^{-1}|f\rangle_\phi = P^{-1}|g\rangle_\phi \quad (8)$$

两边左乘 P 得

$$PQP^{-1}|f\rangle_\phi = |g\rangle_\phi \quad (9)$$

令 $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{PQP}^{-1}$, 得

$$Q_1|f\rangle_\phi = |g\rangle_\phi \quad (10)$$

所以 \mathbf{Q}_1 就是要求的矩阵.

下面证明 \mathbf{Q}_1 是厄米矩阵

我们先学习所谓幺正矩阵. 这里给出幺正矩阵的一种定义:

若把矩阵 P 的每一列划分成一个列向量, 从左到右分别为 $|p_1\rangle \dots |p_n\rangle$, 若满足 $\langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij}$ 则矩阵 P 叫做幺正矩阵.

容易证明式 * 中的 P 就是幺正矩阵 (证明略).

性质 1: 幺正矩阵一个很重要的性质就是其厄米共轭等于其逆矩阵, $P^* = P^{-1}$
证明:

要证明, $P^* = P^{-1}$, 只需证明 P^*P 是单位矩阵即可.

根据矩阵乘法的定义,

$$(P^*P)_{ij} = \sum_{k=1}^n (P^*)_{ik} P_{kj} \quad (11)$$

根据厄米共轭的定义,

$$\sum_{k=1}^n (P^*)_{ik} P_{kj} = \sum_{k=1}^n (P_{ki})^* P_{kj} = \langle p_i | p_j \rangle = \delta_{ij} \quad (12)$$

所以 P^*P 是 n 阶的单位矩阵. 证毕.

在上文中, Q 是所谓的实数元的对角矩阵, 所以 $Q^* = Q$;
另外容易证明, $(AB)^* = B^*A^*$. 所以

$$Q_1^* = (PQP^{-1})^* = (P^{-1})^*(PQ)^* = P(Q^*P^*) = PQP^{-1} = Q_1 \quad (13)$$

所以 Q_1 是厄米矩阵.

无限深势阱

预备知识 定态薛定谔方程，二阶常系数齐次微分方程

只考察质量为 m 的粒子沿 x 方向的运动情况。势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ +\infty & (x < 0 \text{ 或 } x > a) \end{cases} \quad (1)$$

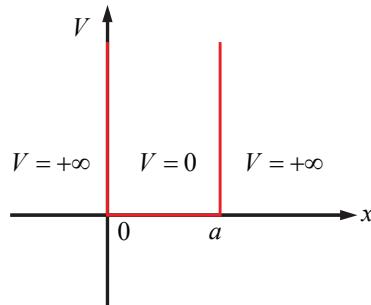


图 1: 无限深势阱

求解定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) = E\psi(x). \quad (2)$$

结论

第 n 个能级为

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (3)$$

能量的本征波函数为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (4)$$

推导

先考虑势阱内部 ($0 \leq x \leq a$, $V = 0$)，方程变为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (5)$$

这是二阶常系数齐次微分方程. 通解为

$$\psi(x) = C_1 \cos(kx) + C_2 \sin(kx) \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6)$$

其中（通解也可以写成指数函数 Ce^{ikx} , 加上边界条件后的结论一样）现在讨论边界条件：在有限深势阱束缚态中将会看到，如果势阱外部势能是有限值，波函数将会按照指数函数衰减，势能越高衰减得越快. 而现在势阱外部势能为无穷大，就可以直接认为波函数在势阱外部始终为零. 所以边界条件为

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0 \quad (7)$$

这两个条件代入以上通解中，解得

$$C_2 = 0, \quad k = \frac{n\pi}{a}. \quad (n = 1, 2, 3\dots). \quad (8)$$

C_1 的取值暂时不能确定，但先将通解写为 $\psi(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ ，常数 C 就可以通过波函数的归一化来确定：

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-a}^{+a} \left| C \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right|^2 dx = |C|^2 \frac{a}{2}. \quad (9)$$

严格来说， C 可以是复数，解为 $C = \sqrt{2/a}e^{i\theta}$. 但是为了方便通常把归一化常数中的相位因子 $e^{i\theta}$ 默认为 1. 所以归一化的波函数为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (10)$$

另外，由

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k = \frac{n\pi}{a} \quad (11)$$

可以得出能级是离散的结论. 即

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3\dots) \quad (12)$$

有限深球势阱

束缚态

角向方程为球谐函数，势阱内部的径向方程（unscaled）为球贝塞尔函数 $j_l(kx)$ ，外部为第二类修正球贝赛尔函数 $k_l(\kappa x)$ ， k 和 κ 的定义与一维的有限深势阱相似。在势阱边界处，函数和一阶导数需要相等。

升降算符

预备知识 本征方程

结论

已知某个算符 \hat{Q} , 若能找到另一个算符 \hat{Q}_+ , 使得 $[\hat{Q}, \hat{Q}_+] = h\hat{Q}_+$ 成立 (是大于零的实数), 这个算符就是 \hat{Q} 对应的升算符. 同理, 若有 \hat{Q}_- 使得 $[\hat{Q}, \hat{Q}_-] = -h\hat{Q}_-$ 成立, 这个算符就是对应的降算符. 升降算符的作用是把一个本征函数变为本征值更大或者更小的本征函数. 即 $\hat{Q}(\hat{Q}_{\pm}\psi) = (q \pm h)(\hat{Q}_{\pm}\psi)$.

意义

有时候如果算符过于复杂求解本征方程比较困难, 就可以尝试寻找升降算符. 升降算符可以让我们不用求解本征方程就可以快速地找到本征值. 具体见简谐振子和轨道角动量.

证明

如果 ψ 是 \hat{Q} 的一个本征函数, 且本征值为 λ , 那么根据对易关系 $[\hat{Q}, \hat{Q}_+] = h\hat{Q}_+$ 有

$$\hat{Q}(\hat{Q}_+\psi) = \hat{Q}_+(\hat{Q}\psi) + h\hat{Q}_+\psi = \hat{Q}_+(\lambda\psi) + h\hat{Q}_+\psi = (\lambda + h)(\hat{Q}_+\psi) \quad (1)$$

降算符的证明同理.

本征函数的归一化

注意升降算符并不一定能保持函数的归一化. 若假设 $\hat{a}_{\pm}|\psi_n\rangle = A_n|\psi_{n+1}\rangle$, 其中 $|\psi_n\rangle$ 和 $|\psi_{n+1}\rangle$ 都是归一化的本征态, 那么由归一化条件要求

$$\langle\psi_n| \hat{a}_{\pm}^* \hat{a}_{\pm} |\psi_n\rangle = |A_n|^2 \langle\psi_{n+1} | \psi_{n+1}\rangle = |A_n|^2 \quad (2)$$

习惯上令 A_n 为实数, 即上式开方.

简谐振子（升降算符）

预备知识 升降算符

结论

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hat{x} \mp i\hat{p}) \quad \hat{a}_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \quad \hat{a}_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (1)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega\hbar \quad \hat{n} = \hat{a}_+ \hat{a}_- \quad \hat{H} = \omega\hbar \left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \quad (2)$$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} \beta^{1/2}} e^{-(x/\beta)^2/2} \quad \beta = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (3)$$

推导

在经典的弹簧振子模型中，若质点沿 x 轴方向振动，且在 $x = 0$ 处平衡，则势能函数 $V(x) = kx^2/2$ 。由于自由振动的频率为 $\omega = \sqrt{k/m}$ ，所以势能可记为

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (4)$$

在量子力学中，这个模型要用薛定谔方程来求解。该模型的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = \frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] \quad (5)$$

定态薛定谔方程（能量的本征方程）为

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (6)$$

由于这个方程需要使用幂级数，但作为一种巧妙的方法，先利用升降算符来得到能量的本征值，再求本征函数。这里直接给出 \hat{H} 的升降算符，他们分别可以把本征值升降 $\omega\hbar$ （证明见下文）

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (m\omega\hat{x} \mp i\hat{p}) \quad \Delta E = \omega\hbar \quad (7)$$

根据升降算符的结论，对任意一个 \hat{H} 的本征函数 ψ_n ，有

$$\hat{H}(\hat{a}_\pm \psi_n) = (E_n \pm \hbar\omega)(\hat{a}_\pm \psi_n) \quad (8)$$

这也就是说，简谐振子的定态薛定谔方程的解中，本征值 E_n 取离散值，且相邻两个能级相差 $\Delta E = \hbar\omega$ 。

类似于无限深势垒，谐振子也应该有一个最低能级 E_0 和对应的 $\psi_0(x)$ 。所以 \hat{a}_- 必然对 ψ_0 无效，即得到的波函数没有物理意义，所以不妨猜测 $\hat{a}_- \psi_0 = 0$ 即

$$(m\omega \hat{x} + i\hat{p})\psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{d}{dx}\psi_0 = -\frac{m\omega x}{\hbar}\psi_0 \quad (9)$$

这是一阶齐次线性微分方程，通解为

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{\beta}} e^{-(x/\beta)^2/2} \quad (10)$$

其中 $\beta = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 具有长度量纲。不难验证上式是定态薛定谔方程式 6 的解，本征值为 $E_0 = \omega\hbar/2$ 。

归一化条件

证明 $\psi_{n+1} = 1/\sqrt{n+1}\hat{a}_+\psi_n$, $\psi_{n-1} = 1/\sqrt{n}\hat{a}_-\psi_n$

$$\begin{aligned} A^2 &= \int (a_+ \psi_n)^* (a_+ \psi_n) dx \\ &= \int (a_+^* a_+ \psi_n)^* (\psi_n) dx \\ &= \int (a_- a_+ \psi_n)^* (\psi_n) dx \end{aligned} \quad (11)$$

而 $\hat{a}_- \hat{a}_+ \psi_n = \hat{H} \psi_n / \omega \hbar + 1/2 \psi_n = (n+1) \psi_n$ 。所以

$$A^2 = (n+1) \int \psi_n^* \psi_n dx = n+1 \cdot A = \sqrt{n+1} \quad (12)$$

所以 $\psi_{n+1} = 1/\sqrt{n+1}\hat{a}_+\psi_n$

波函数

现在只需要对基态波函数不断使用升算符和归一化系数就可以得到任意激发态波函数（已归一化）

$$\psi_n = \frac{\hat{a}_+}{\sqrt{n!}} \psi_0 \quad (13)$$

升降算符的证明

根据升降算符的定义, 要证明 \hat{a}_\pm 是升降算符只需证明对易关系

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \pm \omega \hbar \hat{a}_\pm \quad (14)$$

根据升降算符定义

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \frac{1}{2m\sqrt{2m\hbar\omega}} [(m\omega\hat{x})^2 + \hat{p}^2, m\omega\hat{x} \mp i\hat{p}] \quad (15)$$

不难证明

$$[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{D}] \quad (16)$$

和

$$[\hat{x}^2, \hat{x}] = [\hat{p}^2, \hat{p}] = 0 \quad (17)$$

将两式代入后, 只剩下两个交叉项

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \frac{\omega}{2\sqrt{2m\hbar\omega}} (\mp i[\hat{x}^2, \hat{p}] + [\hat{p}^2, \hat{x}]) \quad (18)$$

同样可以证明

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (19)$$

所以

$$[\hat{x}^2, \hat{p}] = \hat{x}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{x} = 2i\hbar\hat{x} \quad (20)$$

$$[\hat{p}^2, \hat{x}] = -\hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} = -2i\hbar\hat{p} \quad (21)$$

代入得

$$[\hat{H}, \hat{a}_\pm] = \frac{\pm\omega\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (\hat{x} \mp i\hat{p}) = \pm\omega\hbar\hat{a}_\pm \quad (22)$$

证毕.

简谐振子升降算符归一化

所以，记住，一般来说，算符满足的一个条件是 $\langle g | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}^*g | f \rangle$. 但是对于厄米算符， $\hat{Q}^* = \hat{Q}$ ，所以有 $\langle g | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}g | f \rangle$

对于角动量升算符，

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ \hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z\end{aligned}\quad (1)$$

所以

$$\begin{aligned}\hat{L}_+ \hat{L}_- \varphi_{l,m} &= \hbar^2(l+1)l\varphi_{l,m} - \hbar^2m^2\varphi_{l,m} + m\hbar^2\varphi_{l,m} \\ &= \hbar^2[l(l+1) - m(m-1)]\varphi_{l,m}\end{aligned}\quad (2)$$

所以 $\langle \hat{L}_- \varphi_{l,m} | \hat{L}_+ \varphi_{l,m} \rangle = \langle \varphi_{l,m} | \hat{L}_+ \hat{L}_- \varphi_{l,m} \rangle = \hbar^2[l(l+1) - m(m-1)]$

所以 $\hat{L}_- \varphi_{l,m} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\varphi_{l,m-1}$

同理可证 $\hat{L}_+ \varphi_{l,m} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\varphi_{l,m+1}$

对于谐振子的升降算符 $\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega\hat{x} \mp i\hat{p})$.

$$\begin{aligned}\hat{a}_- \hat{a}_+ &= \frac{1}{2m\omega\hbar}(m^2\omega^2\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - im\omega[\hat{x}, \hat{p}]) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar}\left(\frac{1}{2m}(m^2\omega^2\hat{x}^2 + \hat{p}^2) + \frac{\omega\hbar}{2}\right) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar}\hat{H} + \frac{1}{2}\end{aligned}\quad (3)$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{a}_+ \varphi_n | \hat{a}_+ \varphi_n \rangle &= \langle \varphi_n | \hat{a}_- \hat{a}_+ \varphi_n \rangle \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} \\ &= n + 1\end{aligned}\quad (4)$$

$$\hat{a}_+ \varphi_n = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1} \quad (5)$$

同理 $\hat{a}_- \varphi_n = \sqrt{n}\varphi_{n-1}$

简谐振子升降算符归一化

预备知识 简谐振子（量子）

首先要提醒的是，一般算符满足的一个条件是 $\langle g | \hat{Q} f \rangle = \langle \hat{Q}^\dagger g | f \rangle$. 但是对于厄米算符， $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}$ ，所以有 $\langle g | \hat{Q} f \rangle = \langle \hat{Q} g | f \rangle$.

对于谐振子的升降算符 $\hat{\mathbf{a}}_\pm = 1/\sqrt{2m\omega\hbar}(m\omega\hat{\mathbf{x}} \mp i\hat{\mathbf{p}})$ ，有

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}}_- \hat{\mathbf{a}}_+ &= \frac{1}{2m\omega\hbar} (m^2\omega^2\hat{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{p}}^2 - im\omega [\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{p}}]) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar} \left(\frac{1}{2m} (m^2\omega^2\hat{\mathbf{x}}^2 + \hat{\mathbf{p}}^2) + \frac{\omega\hbar}{2} \right) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar} \hat{\mathbf{H}} + \frac{1}{2}\end{aligned}\tag{1}$$

$$\begin{aligned}|\hat{\mathbf{a}}_+ \varphi_n|^2 &= \langle \hat{\mathbf{a}}_+ \varphi_n | \hat{\mathbf{a}}_+ \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | \hat{\mathbf{a}}_- \hat{\mathbf{a}}_+ \varphi_n \rangle \\ &= \left\langle \varphi_n \left| \left(\frac{1}{\omega\hbar} \hat{\mathbf{H}} + \frac{1}{2} \right) \varphi_n \right. \right\rangle \\ &= \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} = n + 1\end{aligned}\tag{2}$$

所以有 $\hat{\mathbf{a}}_+ \varphi_n = \sqrt{n+1} \varphi_{n+1}$ (同理 $\hat{\mathbf{a}}_- \varphi_n = \sqrt{n} \varphi_{n-1}$).

再次提醒，归一化系数后面可以加上任意相位因子 $e^{i\theta}$ ，同样能满足归一化条件，但一般省略.

简谐振子（级数）

结论

简谐振子的能级为

$$E_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar\omega \quad (1)$$

波函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} H_n(u) e^{-u^2/2} \quad (2)$$

其中

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, u \equiv \alpha x, H_n(u) \equiv (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} (e^{-u^2}) \quad (3)$$

$H_n(u)$ 叫做 Hermite Polynomials. 前 6 个分别为

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 1 & H_3(u) &= 8u^3 - 12u \\ H_1(u) &= 2u & H_4(u) &= 16u^4 - 48u^2 + 12 \\ H_2(u) &= 4u^2 - 2 & H_5(u) &= 32u^5 - 160u^3 + 120u \end{aligned} \quad (4)$$

前 4 个波函数分别为（注意函数的奇偶性与角标的奇偶性相同）

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-u^2/2} \\ \psi_1(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \sqrt{2} u e^{-u^2/2} \\ \psi_2(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2u^2 - 1) e^{-u^2/2} \\ \psi_3(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} u (2u^2 - 3) e^{-u^2/2} \end{aligned} \quad (5)$$

推导

薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (6)$$

高斯波包

预备知识 高斯分布，含时薛定谔方程，动量表象

结论

设 $t = 0$ 时的波函数（已归一化）

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-(x-x_0)^2/(2\sigma_x^2)} e^{i\frac{p_0}{\hbar}x} \quad (1)$$

那么动量表象波函数具有对称的形式⁴

$$\psi(p, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-(p-p_0)^2/(2\sigma_p^2)} e^{-i\frac{x_0}{\hbar}(p-p_0)} \quad (2)$$

其中 σ_x 为位置的标准差， σ_k 为 k 的标准差，满足不确定原理

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \quad (3)$$

含时波函数为

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1 + i\hbar t / 2m\sigma^2}} \times \\ & \exp \left[\frac{-(x - p_0 t / m)^2}{(2\sigma)^2 (1 + i\hbar t / 2m\sigma^2)} \right] \exp \left[\frac{ip_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0 t}{2m} \right) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

若令 $\hbar = 1$ ，且定义无量纲参数 $x' = x/\sigma$, $k' = \sigma k$, $t' = t/m\sigma^2$. 则上式可记为
(省略撇号)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1 + it}} \exp \left[\frac{-(x - k_0 t)^2}{2(1 + it)} \right] \exp [ik_0(x - k_0 t)] \quad (5)$$

⁴也可以把式 1 和式 2 同时除以常数 $e^{ip_0 x_0}$ 使式 1 最后的 x 变为 $x - x_0$, 式 2 最后的 $p - p_0$ 变为 p .

推导

如果我们想要一维波函数的概率分布为高斯分布^[233], 即

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} e^{-(x/\sigma_x)^2/2} \quad (6)$$

先假设波函数为实数, 有

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-(x/2\sigma_x)^2} \quad (7)$$

变换到动量表象, 得⁵

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-(p/2\sigma_p)^2} \quad (8)$$

其中 $\sigma_x = \hbar/2\sigma_x$, 可见高斯波包一个独特的性质就是在位置和动量表象下都是高斯分布.

由于波函数为实数, 动量平均值为零. 为了让波函数由一个动量, 而维持 $\psi(x)$ 和 $\psi(p)$ 的波形不变, 我们可以直接将动量表象中的波函数平移 p_0 , 得

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-[(p-p_0)/2\sigma_p]^2} \quad (9)$$

由傅里叶变换的性质, 对应的位置表象波函数需要乘以因子 $\exp(ip_0x/\hbar)$ 变为

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-(x/2\sigma_x)^2} e^{ip_0x/\hbar} \quad (10)$$

类似地, 也可以将 $\psi(x)$ 平移 x_0

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-[(x-x_0)/2\sigma_x]^2} e^{ip_0(x-x_0)/\hbar} \quad (11)$$

而 $\psi(p)$ 则需要乘以因子 $\exp(-ix_0p/\hbar)$

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-[(p-p_0)/2\sigma_p]^2} e^{-ix_0p/\hbar} \quad (12)$$

而习惯上将以上两式同乘一个常数 $e^{ip_0x_0/\hbar}$ 得到式 1 和式 2.

⁵可以用 Wolfram Alpha 或 Mathematica 计算积分.

轨道角动量

预备知识 角动量

思路：根据力学量（测量量）的经典表达式，可以写出对应的算符（这其实是量子力学的一个重要假设，课本往往将其忽略，而直接告诉你可以这样做）

从经典公式到算符

经典力学中一个粒子的角动量公式是

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (1)$$

其中 \mathbf{r} 是参考点到物体的位矢， \mathbf{p} 是粒子的动量。或者写成直角坐标系中的分量形式（令原点为参考点）

$$L_x = yp_z - zp_y \quad L_y = zp_x - xp_z \quad L_z = yp_z - zp_y \quad (2)$$

如果用 $\hat{\mathbf{r}} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ 表示空间位置算符（这里出现了一点符号上的尴尬，因为 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ 既可以算符又可以表示单位矢量，不过幸好 x 算符就是变量 x ，所以我在该词条中用 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ 表示单位矢量， x, y, z 表示变量和算符），用 $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}_x \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{p}}_y \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{p}}_z \hat{\mathbf{z}}$ 表示空间动量算符，那空间角动量算符可以表示为。

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \quad (3)$$

三个分量的算符为

$$\hat{L}_x = y\hat{\mathbf{p}}_z - z\hat{\mathbf{p}}_y \quad \hat{L}_y = z\hat{\mathbf{p}}_x - x\hat{\mathbf{p}}_z \quad \hat{L}_z = x\hat{\mathbf{p}}_y - y\hat{\mathbf{p}}_x \quad (4)$$

还可以定义角动量模长平方算符（注意 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 算符是一个整体，不是两个算符相乘）

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (5)$$

能同时测量什么

对于角动量分量，理想的状况是，如果能解出本征方程

$$\hat{\mathbf{L}}\varphi = \mathbf{l}\varphi \quad (6)$$

我们就能得到矢量的本征值 \mathbf{l} ，然后测量 \mathbf{L} 本征态的结果就一定是 \mathbf{l} 。但事实上， \mathbf{L} 几乎从来不单独使用，因为上式无解。为什么？要解上式，充分必要条件就是要存在 φ ，使三个分量同时有解

$$\hat{\mathbf{L}}_x\varphi = l_x\varphi \quad \hat{\mathbf{L}}_y\varphi = l_y\varphi \quad \hat{\mathbf{L}}_z\varphi = l_z\varphi \quad (7)$$

不幸的是， $\hat{\mathbf{L}}_x$, $\hat{\mathbf{L}}_y$, $\hat{\mathbf{L}}_z$ 中任意两个都不对易（常见对易关系表，所以没有共同的本征函数（算符对易和共同本征矢函数）。

事实上，三个分量中我们只能同时知道一个（不确定原理，通常情况下，我们选择解 $\hat{\mathbf{L}}_z$ 的本征方程 $\hat{\mathbf{L}}_z\varphi = l_z\varphi$ 。

比较幸运的是，如果定义角动量模长平方算符 $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_x^2 + \hat{\mathbf{L}}_y^2 + \hat{\mathbf{L}}_z^2$ （又一次根据经典力学的定义得到），可以发现 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 和 $\hat{\mathbf{L}}_x$, $\hat{\mathbf{L}}_y$, $\hat{\mathbf{L}}_z$ 都对易，所以必然存在一套本征函数，同时是 $\hat{\mathbf{L}}_x$, $\hat{\mathbf{L}}_y$, $\hat{\mathbf{L}}_z$ 其中一个和 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的本征函数（习惯上约定计算 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 和 $\hat{\mathbf{L}}_z$ 的共同本征矢）。

升降算符和本征值

如果要解 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 和 $\hat{\mathbf{L}}_z$ 的共同本征函数，通常的方法是先把算符的表达式转换到球坐标中再解方程。但是我们现在先用一种更简单的（但非常重要的）方法，升降算符（在简谐振子问题中已经见过），来绕过本征函数直接求出共同波函数的简并情况以及对两个算符的本征值。

由于升降算符没有什么方法可以求出来，这里直接给出并证明 $\hat{\mathbf{L}}_z$ 的升降算符分别为

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} = \hat{\mathbf{L}}_x \pm i\hat{\mathbf{L}}_y \quad (8)$$

根据升降算符中的一种定义，要证明它们是升降算符，只要证明 $[\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] \propto \hat{\mathbf{L}}_{\pm}$ 即可。结论是（证明见常见算符对易表）

$$[\hat{\mathbf{L}}_z, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_{\pm} \quad (9)$$

类似简谐振子的升降算符, 我们还需要一个归一化系数使 $\hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle = A_{\pm} |l, m \pm 1\rangle$ 成立 (见轨道角动量升降算符归一化). 结论是

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle \quad (10)$$

由于 $|l, m\rangle$ 也是

轨道角动量升降算符归一化

预备知识 轨道角动量

首先要提醒，一般来说，算符满足的一个条件是 $\langle g | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}^*g | f \rangle$. 但是对于厄米算符， $\hat{Q}^* = \hat{Q}$ ，所以有 $\langle g | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}g | f \rangle$.

对于角动量升算符

$$\hat{L}_+ \hat{L}_- = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z \quad (1)$$

所以

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- \varphi_{l,m} &= \hbar^2 l(l+1) \varphi_{l,m} - \hbar^2 m^2 \varphi_{l,m} + m\hbar^2 \varphi_{l,m} \\ &= \hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)] \varphi_{l,m} \end{aligned} \quad (2)$$

所以

$$\langle \hat{L}_- \varphi_{l,m} | \hat{L}_+ \varphi_{l,m} \rangle = \langle \varphi_{l,m} | \hat{L}_+ \hat{L}_- \varphi_{l,m} \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)] \quad (3)$$

所以

$$\hat{L}_- \varphi_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \varphi_{l,m-1} \quad (4)$$

同理可证

$$\hat{L}_+ \varphi_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \varphi_{l,m+1} \quad (5)$$

严格来说，归一化系数后面加上任意相位因子 $e^{i\theta}$ 后仍能满足式 3，但一般省略.

自旋角动量

1. 自旋角动量三个分量算符 $\hat{\mathbf{S}}_x \hat{\mathbf{S}}_y \hat{\mathbf{S}}_z$ 的互相对易关系以及自旋模长平方算符 $\hat{\mathbf{S}}^2$ 的对易关系
2. 与轨道角动量同理, 存在一组本征态 $|s, m\rangle$

($s = 0, 1/2, 1, 3/2\dots$, $m = -s, -s+1\dots, s-1, s$ 但是每种粒子都有固有的 s) 满足

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle \text{ 和 } \hat{\mathbf{S}}_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle$$

3. 存在升降算符 $\hat{\mathbf{S}}_{\pm} = \hat{\mathbf{S}}_x \pm i\hat{\mathbf{S}}_y$, 且

$$\hat{\mathbf{S}}_{\pm} |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle \text{ (根号项是归一化系数)}$$

4. 对于 $s = \frac{1}{2}$ 的粒子, 一共有 2 个本征态, 分别是 $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$. 他们的角动量模长平方都是 $\frac{3}{4}\hbar^2$, 角动量 z 分量都是 $\hbar/2$. 以这两个本征态为基底, 令第一个为 $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 第二个为 $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. 可以得出角动量平方算符的矩阵为 $\hat{\mathbf{S}}^2 = \hbar^2 3/4 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\hat{\mathbf{S}}_z = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. 根据 $\hat{\mathbf{S}}_+ \chi_- = \hbar \chi_+$ 和 $\hat{\mathbf{S}}_- \chi_+ = \hbar \chi_-$, 得到

$$\hat{\mathbf{s}}_y = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ 和 } \hat{\mathbf{s}}_z = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

然后, 定义泡力矩阵.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

其实, 根据对易关系直接就可以得到泡力矩阵.

直积空间

1. 两个矢量空间的直积空间就是两个空间所有可能的基底组合. 整个直积空间中任意矢量可以表示为 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n c_{ij} |u_i\rangle |v_j\rangle \right)$, 从而可以把所有系数写成一个列矢量表示. 然而顺序非常重要, 计算中要保持一致. 这里规定顺序为 $\{|u_1v_1\rangle, |u_1v_2\rangle \dots |u_2v_1\rangle, |u_2v_2\rangle \dots\}$. 在以下讨论中, 我们假设所有的基底都是正交归一的. 一个直积空间可以用两种方法分成子空间, 一种是根据 $|u_iv_i\rangle$ 中 u_i 的不同来划分, 另一种根据 $|v_i\rangle$ 不同来划分. 姑且分别叫做 $|u_i\rangle$ 子空间和 $|v_i\rangle$ 子空间.
2. 两个矢量 (分别来自两空间) 的直积定义为: 先把它们分别在各自的基底上展开, 然后用乘法分配律进行相乘. 两空间的基底相乘得到直积空间中新的基底. 直积空间中, 只有一些矢量可以表示成两个空间中的矢量的一次直积运算. 这种矢量的特征是, 若投影到不同子空间, 则对应分量成正比.
3. 两个算符的直积变成的 (线性) 算符可以作用在直积空间中的任意矢量. 先定义作用在任意直积矢量上的结果为

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})(|u\rangle \otimes |v\rangle) = (\hat{A}|u\rangle) \otimes (\hat{B}|v\rangle) \quad (1)$$

要对任意矢量作用, 只需将其拆成直积基底的线性组合, 然后再分别对直积基底作用即可. 特殊地, 可以用 $\hat{A} \otimes \hat{I}$ 运算将 $\{|u_i\rangle\}$ 空间中的 \hat{A} 拓展到直积空间中来

$$(\hat{A} \otimes \hat{I})(|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle) = (\hat{A}|u_i\rangle) \otimes |v_j\rangle \quad (2)$$

等式右边的矢量仍然落在 $|v_i\rangle$ 子空间中. 所以, 算符 $\hat{A} \otimes \hat{I}$ 作用在直积空间的任意矢量上, 相当于 $\hat{A} \otimes \hat{I}$ 对各个子空间中的分量作用. $\hat{I} \otimes \hat{B}$ 的作用类似. 根据定义, 不难证明

$$(\hat{A} \otimes \hat{I})(\hat{I} \otimes \hat{B})(|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle) = (\hat{I} \otimes \hat{B})(\hat{A} \otimes \hat{I})(|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle) = (\hat{A}|u\rangle) \otimes (\hat{B}|v\rangle) \quad (3)$$

即两算符对易且等于 $(\hat{A} \otimes \hat{B})$.

4. 矢量的内积

定义两个直积矢量的内积分别为每个空间中对应矢量的内积的乘积.

$$(\langle u' | \otimes \langle v' |) (|u\rangle \otimes |v\rangle) = \langle u | u' \rangle \cdot \langle v | v' \rangle \quad (4)$$

计算任意两个矢量的内积，只需分解成直积空间基底之间的内积再运用以上定律即可. 如果要求直积空间的基底正交归一，任意两基底必须满足

$$(\langle u_{i'} | \otimes \langle v_{j'} |) (|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle) = \langle u_{i'} | u_i \rangle \cdot \langle v_{j'} | v_j \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \quad (5)$$

这就等效于要求 $\{|u_i\rangle\}$ 和 $\{|v_i\rangle\}$ 分别都是正交归一基底.

5. 矩阵元的计算. 若直积空间中的基底正交归一，求矩阵元只需用

$$\langle u_{i'} v_{j'} | (\hat{A} \otimes \hat{B}) |u_i v_j\rangle = \langle u_{i'} v_{j'} | (\hat{A} |u_i\rangle \otimes \hat{B} |v_j\rangle) = \langle u_{i'} | \hat{A} |u_i\rangle \cdot \langle v_{j'} | \hat{B} |v_j\rangle \quad (6)$$

现在用分块矩阵的概念，若把矢量分成一段段，每一段是 u 子空间中的系数，矩阵也会分成一些小块. 在 m, n 小块中，根据式，这个分块中的矩阵元为

$$A_{mn} \cdot B \quad (7)$$

所以， $\hat{A} \otimes \hat{B}$ 的矩阵是把 A 的每个矩阵元 A_{mn} 拓展成矩阵分块 $A_{mn}B$. 注意这是以 u 空间来划分列矩阵. 反之，如果是根据 v 空间来划分列矩阵，那么就是把 B 的每个矩阵元 B_{mn} 拓展成矩阵分块 $B_{mn}A$.

关于本征问题的定理

* 如果考虑直积空间中的本征问题， A_1 的本征矢 $|eig_i\rangle$ 具有 n 重简并，简并空间的基底分别为 $|eig_i\rangle |v_1\rangle, |eig_i\rangle |v_2\rangle, \dots$

* $A_1 \otimes B_2$ 的本征值共有 $m \times n$ 个 m 和 n 分别是 A 和 B 的维度，若 $a_1, a_2 \dots a_m$ 和 $b_1, b_2 \dots b_n$ 分别是 A 和 B 的本征值，那么 $A \otimes B$ 的本征值分别为 $a_1 b_1, a_1 b_2 \dots a_2 b_1, a_2 b_2 \dots a_m b_{n-1}, a_m b_n$. 本征矢为 $|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$

* $A \otimes I + I \otimes B$ 的本征值分别为 $a_i + b_j$ ，本征矢同样为 $|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$.

* 单个空间的厄米矩阵拓展到直积空间仍然是厄米矩阵. 两个空间分别的厄米矩阵直积仍然是厄米矩阵.

* 厄米矩阵加厄米矩阵仍然是厄米矩阵.

角动量加法

考虑两个系统, 总角动量分别为 l_1 和 l_2 , 可能的状态分别为 $|l_1, m_1\rangle, |l_2, m_2\rangle$. 角动量算符分别为 $\hat{L}_1^2, \hat{L}_{1x}, \hat{L}_{1y}, \hat{L}_{1z}, \hat{L}_2^2, \hat{L}_{2x}, \hat{L}_{2y}, \hat{L}_{2z}$.

现在定义总角动量算符

$$\hat{J}^2 = (\hat{L}_1 + \hat{L}_2)^2 = (\hat{L}_{1x} + \hat{L}_{2x})^2 + (\hat{L}_{1y} + \hat{L}_{2y})^2 + (\hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z})^2 \quad (1)$$

$$\hat{J}_z = \hat{L}_{1z} + \hat{L}_{2z} \quad (2)$$

令量子数分别为 J 和 M . 所有新增的对易关系为

$$[\hat{J}^2, J_z] = 0, [\hat{J}^2, L_1^2] = 0, [\hat{J}^2, L_2^2] = 0, [J_z, L_{1z}] = 0, [J_z, L_{2z}] = 0 \quad (3)$$

若限制 l_1 和 l_2 为常数, 原来和现在的 Complete Set of Commutable Operators (CSCO) 是

$$\left\{ \hat{L}_{1z}, \hat{L}_{2z} \right\}, \left\{ \hat{J}^2, \hat{J}_z \right\} \quad (4)$$

现在已知前一组的本征基底 $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$, 要求后者的基底 $|J, M\rangle$. 首先由对易关系, $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$ 已经是 \hat{J}_z 的本征矢, 每个 M 可以有一个子空间, 维数 N 是 $m_1 + m_2 = M$ 的不同组合数. 当 $|M| = l_1 + l_2$ 时 $N = 1$ (唯一的非简并情况), $|M| = l_1 + l_2 - 1$ 时 $N = 2$, 以此类推 (但注意 m_1, m_2 不能超出范围)

$$N = \begin{cases} l_1 + l_2 + 1 - |M| & (|M| > |l_1 - l_2|) \\ \min \{l_1, l_2\} & (otherwise) \end{cases} \quad (5)$$

我们只需要在每个子空间 M 中把 \hat{J}^2 对角化即可.

$$\hat{J}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + 2 \left(\hat{L}_{1x} \hat{L}_{2x} + \hat{L}_{1y} \hat{L}_{2y} + \hat{L}_{1z} \hat{L}_{2z} \right) \quad (6)$$

其中只有 $\hat{L}_{1x} \hat{L}_{2x} + \hat{L}_{1y} \hat{L}_{2y}$ 不是对角矩阵. 利用升降算符表示

$$2 \left(\hat{L}_{1x} \hat{L}_{2x} + \hat{L}_{1y} \hat{L}_{2y} \right) = \hat{L}_{1+} \hat{L}_{2-} + \hat{L}_{1-} \hat{L}_{2+} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \langle l_2, m'_2 | \langle l_1, m'_1 | \hat{J}^2 | l_1, m_1 \rangle | l_2, m_2 \rangle \\ = & \hbar^2 \left[\begin{array}{l} \delta_{m'_1, m_1} \delta_{m'_2, m_2} [l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2m_1 m_2] \\ + \delta_{m'_1, m_1 + 1} \delta_{m'_2, m_2 - 1} \sqrt{l_1(l_1 + 1) - m_1(m_1 + 1)} \sqrt{l_2(l_2 + 1) - m_2(m_2 - 1)} \\ + \delta_{m'_1, m_1 - 1} \delta_{m'_2, m_2 + 1} \sqrt{l_1(l_1 + 1) - m_1(m_1 - 1)} \sqrt{l_2(l_2 + 1) - m_2(m_2 + 1)} \end{array} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

一般在一个 M 空间中, m_1 用降序排列, $m_2 = M - m_1$, m_1 的最大值为

$$\max \{m_1\} = \begin{cases} l_1 & (M \geq l_1 - l_2) \\ l_2 + M & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (9)$$

这样, J^2 就是一个三对角矩阵, 其本征矢矩阵就是从 $|J, M\rangle$ 表象到 $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$ 表象的么正变换矩阵 U_M ($|J, M\rangle$ 的顺序取 J 从大到小). 矩阵的输入矢量可以用 m_1 为角标, 输出矢量可以用 J 为角标. 查 CG 表时, CG 系数通常以 U_M 矩阵的形式给出 (如 Griffiths). 可以证明, U_M 的 N 个本征值为 $J(J+1)\hbar^2$, 其中 $J = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots$ (共 N 项) (注意最小值大于但不一定等于 $|M|$). J 在所有子空间的最小值是 $|l_1 - l_2|$ (当 $|M| = |l_1 - l_2|$ 时取得), 所以 J 在所有子空间的范围是

$$J = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2 \quad (10)$$

现在我们已经知道了每个子空间 M 的变换, 那么如何求总变换呢? 先把总矩阵列表, 行标题是所有的 $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$, 列标题是所有的 $|J, M\rangle$, 对每个空间, 找到对应的 N 行和 N 列, 把 $N \times N$ 的 U_M 矩阵照抄上去即可.

球坐标和柱坐标中的径向方程

球坐标

在球坐标中，我们可以把径向波函数乘以 r 定义为定义 Scaled Wave Function 已获得更简单的径向微分方程

$$u(r) = rR(r) \quad (1)$$

哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hat{K}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + \hat{V} \quad (2)$$

其中径向动能为

$$\hat{K}_r R = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2u}{dr^2} \quad (3)$$

把 $\hat{L}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi$ 代入薛定谔方程，角向动能变为离心势能项

$$\hat{K}_{\theta,\phi}\psi = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \psi \quad (4)$$

所以径向方程为（注意只有有心力才能分离变量）

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = ER \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu \quad (6)$$

注意只有第一项不同。

归一化条件

总波函数体积分要求

$$\int |R|^2 |Y|^2 r^2 d\Omega dr = 1 \quad (7)$$

球谐函数已经满足 $\int |Y|^2 d\Omega = 1$ ，所以，要求

$$\int |R|^2 r^2 dr = 1 \quad (8)$$

正交条件类似。根据定义

$$\int |u|^2 dr = 1 \quad (9)$$

柱坐标

$$u(r) = \sqrt{r}\psi(r) \quad (10)$$

$$\hat{H} = \hat{K}_r + \frac{\hat{L}_z^2}{2mr^2} \quad (11)$$

$$\hat{K}_r R = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{r}} \left(\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{1}{4r^2} u \right) \quad (12)$$

$$\frac{\hat{L}_z^2}{2mr^2} \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2}{r^2} \psi \quad (13)$$

所以径向方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m^2}{r^2} - \frac{1}{4r^2} \right) \right] u = Eu \quad (14)$$

数值解薛定谔方程

用试射法解以下薛定谔方程，其中 $V(x)$ 已知

$$-\frac{1}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

先讨论偶函数势能的情况。当 $V(x)$ 为偶函数，定态波函数为奇函数或偶函数。前者可用初始条件 $\psi(0) = 0, \psi'(0) = 1$ ，后者可用初始条件 $\psi(0) = 1, \psi'(0) = 0$ 。这样解出来的波函数一般不满足归一化条件，若需要可另行归一化。

现在可用定步长的欧拉法或者龙格库塔四阶法来解 $x \in [0, x_{max}]$ 的薛定谔方程。显然程序中不能选取 $x \in [0, +\infty]$ ，但是要保证 x_{max} 足够大，使解出薛定谔方程后有 $\psi(x_{max}) \approx 0, \psi'(x_{max}) \approx 0$ 。

但如何求得本征值 E 呢？一种简单的方法是试射法。顾名思义，取不同离散的 E ，用一定的条件判断对这些 E 波函数在 x_{max} 处是否满足边界条件 $\psi(x_{max}) \approx 0$ ⁶。

一般来说，若 E 略大于某本征值 E_n 时，会有 $\psi(x_{max}) > 0$ ，略小时会有 $\psi(x_{max}) < 0$ 。所以画出 $\psi(x_{max})$ 关于 E 的图像，用目测法找到零点即可。若需要更精确的本征值，可选取一个更小的区间，再次画图。

若觉得这样做比较麻烦，可用多区间的二分法自动寻找以上图像中的零点，方法如下。先确定本征值所在的范围，把该范围先等分成 N 等份，在每一份的两端判断 $\psi(x_{max})$ 的符号，如果有变号，则说明该份中至少有一个零点。继而可用二分法求解零点的精确值。在这种方法中，必须保证每个小份中至多有一个零点，否则有可能漏解。检查是否漏解可以用波函数节点的数量来判断。如果节点数 N_{node} 是递增的，则没有漏解。

⁶如果 x_{max} 足够大，只需满足这一条件即可自动满足 $\psi'(x_{max}) \approx 0$

氢原子的波函数

预备知识 波函数简介

氢原子的波函数在球坐标中表示为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (1)$$

其中 n 是主量子数, l 是角量子数, m 是磁量子数. R_{nl} 是归一化的径向波函数, Y_l^m 是归一化的球谐函数.

1. 径向波函数 $R_{nl}(r)$

$$R(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l [L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)] \quad (2)$$

$$n=1 \quad R_{10} = 2a^{-3/2} \exp(-r/a) \quad (3)$$

$$n=2 \quad \begin{cases} R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a}\right) \exp(-r/2a) \\ R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}} a^{-3/2} \frac{r}{a} \exp(-r/2a) \end{cases} \quad (4)$$

$$n=3 \quad \begin{cases} R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \exp(-r/3a) \\ R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) \exp(-r/3a) \\ R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp(-r/3a) \end{cases} \quad (5)$$

2. 球谐函数 Y_l^m

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \varepsilon \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad (6)$$

$$l=0 \quad Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \quad (7)$$

$$l = 1 \quad \begin{cases} Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \\ Y_1^{\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cdot e^{\pm i\phi} \end{cases} \quad (8)$$

$$l = 2 \quad \begin{cases} Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1) \\ Y_2^{\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta \cdot e^{\pm i\phi} \\ Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm 2i\phi} \end{cases} \quad (9)$$

含时微扰理论

在讲微扰理论之前，我们先来看如何把含时薛定谔方程写为矩阵的形式。含时薛定谔方程的一般形式为

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

我们把哈密顿算符分为含时部分和不含时部分

$$\hat{H} = \hat{H}_U + \hat{H}'(t) \quad (2)$$

我们已经知道 $\hat{H}(t) = 0$ 的情况下含时薛定谔方程的通解：先解出对应的定态薛定谔方程的波函数 $|\psi_n\rangle$ 和能级 E_n ，通解可表示为

$$|\psi_U(t)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \quad (3)$$

注意其中 c_n 为常数，由初始波函数决定。我们可以定义一组含时基底

$$|\phi_n(t)\rangle = |\psi_n\rangle e^{iE_n t/\hbar} \quad (4)$$

用于展开式 1 中的含时波函数。注意任何时刻这组基底都正交归一。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle e^{iE_n t/\hbar} \quad (5)$$

由于基底并不是总哈密顿算符的本征矢，系数需由常数拓展为时间的函数。

选择了基底后，就可以把薛定谔方程表示为矩阵的形式。把上式代入薛定谔方程（式 1）得

$$\begin{aligned} & \sum_n c_n(t) \hat{H}_0 |\phi_n(t)\rangle + \sum_n c_n(t) \hat{H}'(t) |\phi_n(t)\rangle \\ &= i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |\phi_n(t)\rangle + i\hbar \sum_n c_n(t) \frac{d}{dt} |\phi_n(t)\rangle \end{aligned} \quad (6)$$

考虑到上式左边的 $\hat{H}_0 |\phi_n(t)\rangle = E_n |\phi_n(t)\rangle$ 和右边的 $i\hbar d |\phi_n(t)\rangle / dt = E_n |\phi_n(t)\rangle$ 相等，可化简为

$$\sum_n c_n(t) \hat{H}'(t) |\phi_n(t)\rangle = i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |\phi_n(t)\rangle \quad (7)$$

两边左乘 $\langle \phi_m(t) | = e^{iE_m t/\hbar} \langle \psi_m |$ 得⁷

$$\sum_n H'_{mn} c_n(t) = i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) \quad (8)$$

其中

$$H'_{mn} = \langle \phi_m(t) | \hat{H}'(t) | \phi_n(t) \rangle = \langle \psi_m | \hat{H}'(t) | \psi_n \rangle e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \quad (9)$$

把式 8 写成矩阵形式为（对矢量求导即对每个分量分别求导^[113]）

$$\mathbf{H}' \mathbf{c} = i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{c} \quad (10)$$

到此为止我们还没有做任何近似，上式和式 1 完全等效。

若哈密顿算符中的势能包含时间，只有极少数情况下存在解析解。这时我们可以用含时微扰理论来近似求解。类比不含时微扰理论，我们引入一个常数 λ 来分离不同阶数的近似，最后只需令 $\lambda = 1$ 即可。理论上当阶数足够高时，近似解将会逼近精确解。

令哈密顿算符，系数矢量分别为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'(t) \quad (11)$$

$$\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}^{(0)}(t) + \lambda \mathbf{c}^{(1)}(t) + \lambda^2 \mathbf{c}^{(2)}(t) \quad (12)$$

代入式 10，根据 $\lambda = 1$ 的阶数分离方程，得

$$\frac{d}{dt} \mathbf{c}^{(0)}(t) = \mathbf{0} \quad (0 \text{ 阶近似}) \quad (13)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{c}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}'(t) \mathbf{c}^{(0)}(t) \quad (1 \text{ 阶近似}) \quad (14)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{c}^{(n)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}'(t) \mathbf{c}^{(n-1)}(t) \quad (n \text{ 阶近似}) \quad (15)$$

为了求解各阶近似，我们假设 $t = 0$ 时只有 0 阶系数 $\mathbf{c}^{(0)}(0)$ 不为零。若给出初始波函数 $|\psi(0)\rangle$ ，可用 $|\phi_n(0)\rangle = |\psi_n\rangle$ 展开得到 $\mathbf{c}^{(0)}(0)$ 。式 13 说明零阶系数矢量为常数，所以零阶近似解就是 $\mathbf{c}^{(0)}(t) = \mathbf{c}^{(0)}(0)$ 。继续把 $\mathbf{c}^{(0)}(t)$ 代入式 14，两边对时间从 0 到 t 定积分（矢量的积分即对每个分量分别积分）得

$$\mathbf{c}^{(1)}(t) - \mathbf{c}^{(1)}(0) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathbf{H}'(t) \mathbf{c}^{(0)}(t) dt \quad (16)$$

⁷这样做的物理意义是要求每个基底上的分量相等

代入 $\mathbf{c}^{(1)}(0) = 0$, $\mathbf{c}^{(0)}(t) = \mathbf{c}^{(0)}(0)$, 得一阶近似解为

$$\mathbf{c}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathbf{H}'(t) \mathbf{c}^{(0)}(0) dt \quad (17)$$

类似地, 对式 15 积分, 若已知 $\mathbf{c}^{(n-1)}(t)$, 有

$$\mathbf{c}^{(n)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathbf{H}'(t) \mathbf{c}^{(n-1)}(t) dt \quad (18)$$

所以要想得到 n 阶近似解, 积分 n 次即可. 要注意的是, 许多教材中不使用式 9 定义矩阵 \mathbf{H}' , 而是定义其矩阵元为跃迁偶极子 (**Transition Dipole**)

$$H'_{mn} = \langle \psi_m | \hat{H}'(t) | \psi_n \rangle \quad (19)$$

为了明确起见, 式 18 的分量表达式为

$$c_j^{(n)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \sum_i \langle \psi_j | \hat{H}'(t) | \psi_i \rangle e^{i(E_j - E_i)t/\hbar} c_i^{(n-1)}(t) dt \quad (20)$$

大多数情况下我们只使用一阶近似, 一种较简单的情况是, 若初始波函数为某一个 $|\psi_i\rangle$, 且 $\langle j | \hat{H}' | i \rangle = W_{ji} f(t)$, W_{ji} 为常数, 此时式 17 变为 $f(t)$ 关于角频率 $\omega_{ji} = (E_j - E_i)t/\hbar$ 的反傅里叶变换.

$$c_j^{(1)}(t) = \frac{W_{ji}}{i\hbar} \int_0^t f(t) e^{i\omega_{ji}t} dt \quad (21)$$

所以在一阶近似中, 波函数在 $[0, t]$ 时间段内由 $|\psi_i\rangle$ 跃迁到 $|\psi_j\rangle$ 的概率约为

$$P_{ji}(t) = \left| c_j^{(1)}(t) \right|^2 \quad (22)$$

几种含时微扰

$$S = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f | \hat{H}'(t) | i \rangle e^{i\omega_{fi} t} dt \quad (1)$$

当 $\langle f | \hat{H}'(t) | i \rangle = W_{fi}g(t)$ 时

$$P_{fi} = |S|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 \quad (2)$$

1. $g(t) = \delta(t - t_0)$ 瞬时脉冲

$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 = \left| \int_{t_0-\epsilon}^{t_0+\epsilon} \delta(t - t_0) e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 = 1 \quad (3)$$

代入得

$$P_{fi} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \quad (4)$$

2. $g(t)$ 为方形脉冲 (从 $t = t_1$ 到 $t = t_2$)

$$\begin{aligned} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 &= \left| \int_{t_1}^{t_2} e^{i\omega_{fi} t} dt \right|^2 = \left| \frac{e^{i\omega_{fi} t_2} - e^{i\omega_{fi} t_1}}{i\omega_{fi}} \right|^2 \\ &= \frac{\sin^2[\omega_{fi}(t_2 - t_1)/2]}{[\omega_{fi}(t_2 - t_1)/2]^2} (t_2 - t_1)^2 \\ &= \Delta t^2 \text{sinc}^2[\omega_{fi}\Delta t/2] \end{aligned} \quad (5)$$

概率为

$$P_{fi} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \Delta t^2 \text{sinc}^2[\omega_{fi}\Delta t/2] \quad (6)$$

于瞬时脉冲相比, 主要跃迁到附近的 E_2 能级. 且时间越长能量变化越小.

3. $g(t) = e^{i\omega t}$ 为简谐振动. 与上面的推导类似, 结果为

$$P_{fi} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \Delta t^2 \text{sinc}^2[(\omega_{fi} + \omega)\Delta t/2] \quad (7)$$

这说明, 跃迁倾向于增加能量 $\hbar\omega$, 时间越长, 就越靠近 $\hbar\omega$. 要注意真实的简谐微扰往往是 $\cos(\omega t)$, 分解为两项积分后, 会有干涉效应, 结果较为复杂. 但若 $\omega \gg \omega_{fi}$ 时可以忽略干涉项.

考虑当 Δt 非常大的情况, 这时 sinc^2 函数可以看做 δ 函数. 由 Mathematica 得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}^2(x) dx = \pi \quad (8)$$

含连续态的微扰理论

预备知识 不含时微扰理论

一般的束缚 + 连续微扰理论. 假设我们有两个束缚态和连续态, 总的波函数可以写成

$$|\psi\rangle = C_1 |1\rangle + C_2 |2\rangle + \int \phi(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle d^3k \quad (1)$$

令归一化条件为 $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$, $\langle \mathbf{k}'|\mathbf{k}\rangle = \delta^3(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$, otherwise = 0.

\mathbf{H}' 矩阵可以想象成是这个样子的

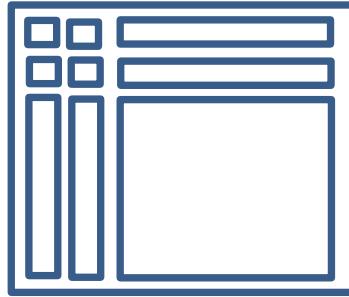


图 1: \mathbf{H}' 矩阵的结构

方格子代表 $C_{ij} = \langle i| H' |j\rangle$, 横条代表 $H_{i\mathbf{k}'} = \langle i| H' |k'\rangle$, 纵条代表 $H_{\mathbf{k}j} = \langle \mathbf{k}| H' |j\rangle$.

与离散的情况相似, 微扰理论的推导方法是先把 $|\psi\rangle$ 代入含时薛定谔方程, 然后两边分别左乘基底 $\langle i|$ 和 $\langle \mathbf{k}|$, 注意后者这里要使用动量归一化条件把对 \mathbf{k} 的积分消去. 微扰递推公式为

$$C_i^{(n+1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int dt' \left(\sum_{j \neq i} H'_{ij} C_j^{(n)} + \int H_{i\mathbf{k}'} \phi^{(n)}(\mathbf{k}') d^3k' \right) \quad (2)$$

$$\phi^{(n+1)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{i\hbar} \int dt' \left(\sum_j H'_{\mathbf{k}j} C_j^{(n)} + \int H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi^{(n)}(\mathbf{k}') d^3k' \right) \quad (3)$$

关于 $|\mathbf{k}\rangle$ 的定义, 若势能函数是局部的, 那么在无穷远处波函数是平面波, 由此来定义 \mathbf{k} . 这样, 在计算 $\langle \mathbf{k}'|\mathbf{k}\rangle$ 时, 由于积分范围是无穷, 可以忽略局部势

能对波函数的影响，所以归一化系数就是 $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$ 的归一化系数即 $1/(2\pi)^{3/2}$.

量子散射 分波展开

散射截面 σ 等于一定时间内被散射的粒子数除以单位截面入射的粒子数. 那么从经典力学的角度, 如果想象入射粒子流密度是均匀的, σ 可以看做是一个障碍物 (无远程作用) 的最大横截面面积, 微分截面 $d\sigma/d\Omega$ 可以理解为单位立体角的散射截面. 量子力学中, 如果考虑单粒子以平面波入射, 那么 σ 等于被散射的概率流 (概率/时间) 除以入射的概率流密度 (概率/时间/面积). 概率流定义为

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (1)$$

$$\sigma = \lim_{r \rightarrow \infty} \int \frac{(\mathbf{j}_{sc} \cdot \hat{r})}{|\mathbf{j}_{inc}|} r^2 d\Omega \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{(\mathbf{j}_{sc} \cdot \hat{r}) r^2}{|\mathbf{j}_{inc}|} \quad (2)$$

在球坐标中解定态薛定谔方程, 能量和角动量的本征基底为

$$\psi_{k,l,m}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3)$$

其中径向波函数满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} (r R_{k,l}) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] (r R_{k,l}) = E (r R_{k,l}) \quad (4)$$

原则上我们只需要把初始波包在这个基底上展开, 加上时间因子即可得到 $t = +\infty$ 时概率的分布. 现在我们假设势能没有角分布 ($m = 0$), 且无穷远处势能为 0, 则基底化简为

$$\psi_{k,l}(\mathbf{r}) = R_{k,l}(r) Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} R_{k,l}(r) P_l(\cos \theta) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} R_{k,l}(r \rightarrow +\infty) &= A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \\ &= [A_l \sin(kr - l\pi/2) - B_l \cos(kr - l\pi/2)]/r \\ &= \sin[kr - l\pi/2 + \delta_l(k)]/r \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $\delta_l(k) = \arctan(-B_l/A_l)$. 注意径向函数只能是实数, 否则将会有概率流持续流入或流出原点.

然而我们也可以选择能量和无穷远处的线性动量 \mathbf{k} 作为本征值 (由对称性, 令 $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}}$), 求出本征基底, 这样如果初始波包有很窄的动量分布 (近似为

平面波), 我们仅从本征基底的角分布就可求出微分截面而无需分解波包. 令该基底为

$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{ikz} + \sum_l \rho_{k,l}(r) P_l(\cos \theta) \quad (7)$$

由于在无穷远处, 平面波就是定态薛定谔方程的解, 所以剩下的项也应该是. 且由于散射只有向外的概率流, 令

$$\rho_{k,l}(r \rightarrow +\infty) = (2l+1)a_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (8)$$

其中 $(2l+1)$ 是为了以下计算方便, 球面波的相位包含在 $a_l(k)$ 中. 该基底在无穷远处也可记为

$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (9)$$

其中 $f(k, \theta) = \sum_l (2l+1)a_l(k)P_l(\cos \theta)$. 注意式 9 在无穷远处是精确成立的. 若从波包的角度考虑, 入射波包可以看做仅由第一项展开得到, 出射波包的 $\theta \neq 0$ 部分仅由第二项展开得到, 所以可以仅用第一项计算 \mathbf{j}_{inc} , 第二项计算 \mathbf{j}_{sc} , 代入式 2 得

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2 \quad (10)$$

假设我们已经在球坐标中解出了 $\psi_{k,l}$, 即径向波函数 $R_{k,l}(r)$ 与相移, 如何获得 $f(k, \theta)$, 即系数 $a_l(k)$ 呢? 把 ψ_k 用 $\psi_{k,l}$ 基底展开, 即对 P_l 展开, 再逐项对比系数即可. 首先展开平面波

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (11)$$

无穷远处

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr} P_l(\cos \theta) \quad (12)$$

将式 12 与式 8 代入式 7, 再逐项与式 6 对比, 得

$$a_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l(k)} - 1}{2ik} \quad (13)$$

总结起来, 轴对称的有心力的散射问题只需通过径向方程式 4 获得 $\delta_l(k)$, 求出 $a_l(k)$ 和 $f(k, \theta)$ 即可.

波恩近似（散射）

我们还是要解出连续态的不含时波函数，且无穷远处的动量为 \mathbf{k}_i (入射平面波的动量).

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \quad (1)$$

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = \frac{2m}{\hbar^2}V\psi \equiv U(\mathbf{r})\psi \quad (2)$$

这是非齐次亥姆霍兹方程，其格林函数为(球面波)

$$G(R) = -\frac{e^{ikR}}{4\pi R} \quad (3)$$

满足

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r}) \quad (4)$$

薛定谔方程的积分形式为

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d^3r' \quad (5)$$

ψ_0 是自由粒子波函数，由于无穷远处积分项消失 ($1/r$)， $\psi_0(\mathbf{r} \rightarrow \infty)$ 要求具有动量 \mathbf{k}_i ，唯一的选择是平面波

$$\psi_0(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} \quad (6)$$

由于微分截面定义在无穷远处，我们把格林函数取无穷远处的极限 (远场)，注意这个极限在定义中，所以并不算是一个近似。这是关于 \mathbf{r}' 的平面波

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \hat{r} \cdot \mathbf{r}' \approx r \quad (7)$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rightarrow -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} \quad (8)$$

其中 $\mathbf{k}_f = k\hat{r}$ 是出射的方向，注意 $|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$ 意味着弹性散射。

积分方程求近似解的一般方法是先把一个近似解代入积分内，积分得到一阶修正后的解，再次代入，得到二阶修正后的解，以此类推迭代。波恩近似中，

假设势能相对于入射动能较弱，积分项相当于微扰，所以令初始（零阶）波函数为 $\psi_0(\mathbf{r})$ 。代入式 5 得一阶修正的波函数，叫做第一波恩近似

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - A \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (9)$$

根据定义，散射幅为

$$f(k, \hat{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (10)$$

这相当于势能函数的空间傅里叶变换。

高阶波恩近似

把式 5 多次代入式 5 的积分中，得到精确解的“积分级数”形式

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \psi_0(\mathbf{r}) + \int d^3 r' G(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') \\ &\quad + \int d^3 r' G(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \int d^3 r'' G(k, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi_0(\mathbf{r}'') \\ &\quad + \int d^3 r' G(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \times \\ &\quad \int d^3 r'' G(k, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \int d^3 r''' G(k, \mathbf{r}'', \mathbf{r}''') U(\mathbf{r}''') \psi_0(\mathbf{r'''}) \dots \end{aligned} \quad (11)$$

若只计算是指包含前 n 行，就叫第 n 波恩近似。具体计算时，偶尔会用到二阶，基本不会用到三阶或以上。

非常有趣的是，即使我们不假设零阶波函数是平面波，波函数展开成上式时取前 n 行的结果仍然是相同的。

第五章

热学与统计力学

统计力学公式大全

微分关系

$$H = E + PV \quad (1)$$

$$G = E + PV - ST \quad (2)$$

$$\mu dN + N d\mu = dG = V dP - S dT + \mu dN \quad (3)$$

微正则系综

$$dS = \frac{1}{T} dE + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN \quad (4)$$

正则系综

$$-kT \ln Q = F = E - ST \quad (5)$$

$$dF = -S dT - P dV + \mu dN \quad (6)$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q \quad (7)$$

巨正则系综

$$-PV = \Phi = E - ST - \mu N \quad (8)$$

$$\Phi = -kT \ln \Xi \quad (9)$$

$$d\Phi = -P dV - S dT - N d\mu \quad (10)$$

$$\langle n_i \rangle = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_i} \quad (11)$$

理想气体

$$V_n = \frac{\pi^{n/2} R^n}{\Gamma(1+n/2)} \quad (N \text{ 维球体}) \quad (12)$$

$$\Omega_0 = \frac{V^N}{N! h^3} \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (N \text{ 粒子能级密度}) \quad (13)$$

$$a(\varepsilon) = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2} \quad (\text{单粒子能及密度}) \quad (14)$$

$$S = Nk \left(\ln \frac{V}{N\lambda^3} + \frac{5}{2} \right) \quad (\text{熵}) \quad (15)$$

$$N = zQ_1 \Rightarrow \mu = kT \ln \frac{N\lambda^3}{V} \quad (\text{化学势}) \quad (16)$$

$$\Xi = \ln N \quad (\text{巨势}) \quad (17)$$

量子气体

$$N = Q_1 g_{3/2}(z) = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad (BE) \quad (18)$$

$$N = Q_1 f_{3/2}(z) \quad (FD) \quad (19)$$

$$\frac{PV}{kT} = Q_1 g_{5/2}(z) = \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (BE) \quad (20)$$

$$\frac{PV}{kT} = Q_1 f_{5/2}(z) \quad (FD) \quad (21)$$

$$PV = NkT \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad (BE) \quad (22)$$

$$PV = NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \quad (FD) \quad (23)$$

$$E = \frac{3}{2}PV \quad (BE \text{ 和 } FD) \quad (24)$$

理论上可以通过三式中的任意两式消去 z , 但是不能写成解析形式.

$$g_n(z) = z + \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} \dots \quad (25)$$

$$f_n(z) = z - \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} \dots$$

BE 凝聚态

$$N = \frac{V}{\lambda_c^3} g_{3/2}(1) \Rightarrow T_c = \frac{\hbar^2}{2\pi mk} \left(\frac{N}{2.612V} \right)^{2/3} \quad (26)$$

$$\frac{N_e}{N} = \frac{\lambda^3}{\lambda_c^3} \Rightarrow N_e = N \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \Rightarrow N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right] \quad (27)$$

$$N_0 = \frac{1}{e^{(\varepsilon_0 - \mu)/kT} - 1} = \frac{kT}{\varepsilon_0 - \mu} \quad (28)$$

$$\varepsilon_0 - \mu \ll \varepsilon_1 - \varepsilon_0 \Rightarrow \varepsilon_0 - \mu \ll \varepsilon_1 - \mu \quad (29)$$

$$N_1 = \frac{1}{e^{(\varepsilon_1 - \mu)/kT} - 1} < \frac{kT}{\varepsilon_1 - \mu} \ll \frac{kT}{\varepsilon_0 - \mu} = N_0 \quad (30)$$

范德瓦尔斯方程

$$\left(P + \frac{aN^2}{V^2} \right) (V - bN) = NkT \quad (31)$$

量子转子能级

角量子数 l 决定能级

$$E_l = l(l+1) \frac{\hbar^2}{2IkT} \quad (32)$$

$2l+1$ 重简并，其中 $I = m_1 m_2 r_{12}^2 / (m_1 + m_2)$ 为质心转动惯量.

当 l 为偶数时，两粒子的波函数具有交换对称，奇数时反对称.

两原子核的自旋共有 $s^2 = (2I+1)^2$ 种状态，其中对称态占 $s(s+1)/2$ 种，反对称态占 $s(s-1)/2$ 种.

若两粒子都是费米子 (I 为半整数)，则总波函数反对称，即 l 为单数核自旋对称，或 l 为偶数核自旋反对称.

弹簧振子能级

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (33)$$

非简并.

为什么书上说 $m = 0$ (能级密度与 ε^m 成正比) 不能产生凝聚态, 然而我在模拟中做到了?

分子平均碰壁数

结论

当容器中的气体平均速度为 \bar{v} , 分子数密度为 n 时, 单位容器面积单位时间受到分子碰撞的平均次数为

$$\frac{1}{4}n\bar{v} \quad (1)$$

推导

假设所有分子的速度都是 v , 分子数密度为 n (单位体积内的分子数). 假设分子之间不发生碰撞. 如果所有的分子都向同一个方向运动, 那么单位时间通过面积为 a 的垂直截面的分子数为 nva . 如果容器是一个球壳, 那么球壳的一半会受到粒子的撞击, 单位时间的撞击次数 (碰撞率) 等于单位时间粒子通过容器最大截面的个数 (如图 1), 即 $nv(\pi R^2)$. 如果有一半的分子向右移动,

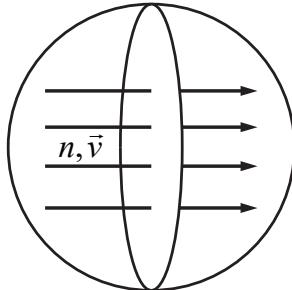


图 1: 分子同向运动的情况

一半向上移动 (如图 2), 那么每个方向的分子数密度变为原来的一半, 总的碰撞率仍为

$$\frac{1}{2}nv(\pi R^2) + \frac{1}{2}nv(\pi R^2) = nv(\pi R^2) \quad (2)$$

依此类推, 如果分子运动的方向被均匀分布在空间的各个方向上, 单位时间碰撞数仍然是. 由于球形容器的表面积为, 所以单位容器壁面积单位时间的碰撞数就是 $nv(\pi R^2)$.

接下来如果把球形容器改成任意形状的容器, 由于分子运动在各个方向都是一样的, 所以结论不变.

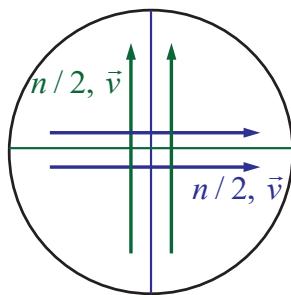


图 2: 分子向两个方向运动的情况

另外，一般情况下并不是每个分子都具有相同的速度，所以速度取平均值 v 即可。

相空间

单个粒子的相空间

单个粒子（看做质点）的状态可以由 3 个位置坐标 (x, y, z) 和三个动量坐标 (p_x, p_y, p_z) 来描述，为了便于拓展到一般情况，我们用 $q_1 \equiv x, q_2 \equiv y, q_3 \equiv z$ 和 $p_1 \equiv p_x, p_2 \equiv p_y, p_3 \equiv p_z$ 表示。想象一个由 3 个 q_i 坐标和 3 个 p_i 坐标组成的 6 维空间，体积元定义为

$$d\Omega_1 = \frac{1}{h^3} dq_1 dq_2 dq_3 \cdot dp_1 dp_2 dp_3 \quad (1)$$

为了方便表示，简写为 $d\Omega_1 = d^3q \cdot d^3p$.

$$\Omega_1 = \frac{1}{h^3} \int_{\Omega_1} d^3q \cdot d^3p \quad (2)$$

积分对所有可能的 q_i 和 p_i 进行。例如粒子若被限制在一个长宽高分别为 L_x, L_y, L_z 的盒子里，而动量没有限制，那么上面积分变为

$$\Omega_1 = \frac{1}{h^3} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \int dq_1 \cdot dq_2 \cdot dq_3 \cdot d^3p = \frac{L_x L_y L_z}{h^3} \int d^3p \quad (3)$$

经典力学中，对于 N 个粒子的系统，可以用 $3N$ 个位置坐标和 $3N$ 个动量坐标来完全描述系统的状态。则相空间为 $6N$ 维空间。

理想气体的状态密度（相空间）

结论

$$\Omega_0 = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (1)$$

$$g(E) = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{(3N/2 - 1)!} E^{3N/2 - 1} \quad (2)$$

预备知识 N 维球体的体积

在 N 个不相干粒子的相空间中，能量小于 E 的体积为

$$\Omega_0 = \frac{1}{N!h^3} \int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^{3N}q \cdot d^{3N}p = \frac{V^N}{N!h^3} \int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^{3N}p \quad (3)$$

其中积分 $\int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^{3N}p$ 可以看做 $n = 3N$ 维球体的体积，半径为 $R = \sqrt{2mE}$.

词条 N 维球体的体积中的结论为

$$V_n = \begin{cases} \frac{R^n}{(n/2)!} \pi^{(n-1)/2} & (\text{奇数 } n) \\ \frac{R^n}{(n/2)!} \pi^{n/2} & (\text{偶数 } n) \end{cases} \approx \frac{n-1}{2} = \frac{n}{2} \quad (4)$$

(由于系统中粒子数 N 非常多，可以近似认为 $(n-1)/2 = n/2$. 见热力学中的近似). 代入 $n = 3N$ 和 $R = \sqrt{2mE}$, 得其中,

$$\int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^3p = \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (5)$$

N 个不可区分粒子组成的理想气体，能量小于 E 的能级个数为

$$\Omega_0 = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (6)$$

对能量求导得到状态密度为

$$g(E) = \frac{d\Omega_0}{dE} = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{(3N/2 - 1)!} E^{3N/2 - 1} \quad (7)$$

理想气体单粒子能级密度

相空间法

$$\begin{aligned}\Omega_0 &= \frac{1}{h^3} \int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^3q \cdot d^3p \\ &= \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi p^3 \\ &= \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi (2m\varepsilon)^{3/2}\end{aligned}\tag{1}$$

$$a(\varepsilon) = \frac{d\Omega_0}{d\varepsilon} = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2}\tag{2}$$

量子力学法

由盒中粒子得，单粒子的能级为

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi n_x}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_y}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_z}{L_z} \right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\tag{3}$$

在 k 空间中，每个能级所占的体积为

$$V_1 = \frac{\pi^3}{L_x L_y L_z} = \frac{\pi^3}{V}\tag{4}$$

K 空间中，能量小于 E 的量子态数为（注意 n 为正值，所以只求一个卦限的体积，加 $1/8$ 系数）

$$\Omega_0 = \frac{1}{8} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4}{3} \pi k^3 \sqrt{\frac{\pi^2}{V}} = \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi (2m\varepsilon)^{3/2}\tag{5}$$

$$a(\varepsilon) = \frac{d\Omega_0}{d\varepsilon} = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2}\tag{6}$$

理想气体（微正则系综法）

预备知识 理想气体的状态密度（相空间）

N 粒子相空间

由理想气体的状态密度（相空间）中的结论， ΔE 能量内的状态数为

$$\Omega(E, V, N; dE) = g(E) dE = \frac{V^N}{N! h^3} \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{(3N/2 - 1)!} E^{3N/2 - 1} dE \quad (1)$$

根据熵的定义

$$S = kT \ln \Omega = Nk \left(\ln \frac{V}{N\lambda^3} + \frac{5}{2} \right) \quad (2)$$

其中用到了 Stirling 近似 $\ln N! = N \ln N - N$.

根据熵的微分关系

$$dS = \frac{1}{T} dE + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN \quad (3)$$

可求出温度，压强，化学势和能量之间的关系.

理想气体（正则系宗法）

可区分粒子和不可区分粒子

对于可区分粒子，从粒子的角度求和，配分函数为 (dis=distinguishable)

$$\begin{aligned} Q_{dis} &= \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{i_2=0}^{\infty} \dots \sum_{i_N=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_{i_1} + \varepsilon_{i_2} \dots)} = \sum_{i_1=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_{i_1}} \sum_{i_2=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_{i_2}} \dots \sum_{i_N=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_{i_N}} \\ &= \left(\sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_i} \right)^N = Q_1^N \end{aligned} \quad (1)$$

从能级的角度求和

$$Q_{dis} = \sum_{\{n_i\}} \frac{N!}{n_0! n_1! \dots} \exp \left(-\beta \sum_{i=0}^{\infty} n_i \varepsilon_i \right) = \sum_{\{n_i\}} \frac{N!}{n_0! n_1! \dots} e^{-n_1 \varepsilon_1 \beta} e^{-n_2 \varepsilon_2 \beta} \dots \quad (2)$$

由式 1 和式 2 物理意义可知，二者相等。再从能级的角度考虑，若粒子不可区分（由于这个配分函数是最常用的，所以不写角标）

$$Q = \sum_{\{n_i\}} e^{-n_1 \varepsilon_1 \beta} e^{-n_2 \varepsilon_2 \beta} \dots \quad (3)$$

比较式 2，求和的每项少了一个因子 $N!/(n_0! n_1! \dots)$

理想气体条件：能级占有率极低，几乎没有两个粒子在同一个能级上，所以大部分 $n_i = 0$, $0! = 1$. 个别 $n_i = 1$, $1! = 1$. 可以近似认为

$$\frac{N!}{n_0! n_1! \dots} \approx N! \quad (4)$$

所以

$$Q = \frac{1}{N!} Q_{dis} = \frac{1}{N!} Q_1^N \quad (5)$$

那如何求 Q_1 呢？

对单粒子相空间积分

注意每个量子态对应的相空间体积为 h 的空间维数次方。

$$Q_1 = \frac{1}{h^3} \int e^{-(p^2/2m)/kT} d^3p d^3x = \frac{V}{h^3} \int e^{-(p^2/2m)/kT} d^3p = \frac{V}{\lambda^3} \quad (6)$$

其中 λ 叫做热力学波长，正比与粒子热运动的德布罗意波

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad (7)$$

对单粒子能级密度积分

用单粒子能级密度 $a(\varepsilon)$ 对玻尔兹曼因子积分.

$$a(\varepsilon) = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2} \quad (8)$$

$$Q_1 = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_i} = \int_0^{\infty} a(\varepsilon) e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon \quad (9)$$

对积分换元，令 $x = \beta\varepsilon$,

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon = (kT)^{3/2} \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \Gamma(3/2) (kT)^{3/2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{3/2} \quad (10)$$

$$Q_1 = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_i} = \int_0^{\infty} a(\varepsilon) e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon = \frac{2\pi V(2m)^{3/2}}{h^3} \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{3/2} = \frac{V}{\lambda^3} \quad (11)$$

对系统的能级密度积分

现在我们试图直接求 Q ，系统的总能级密度为

$$g(E) = \frac{d\Omega_0}{dE} = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{(3N/2 - 1)!} E^{3N/2-1} \quad (12)$$

$$Q = \int_0^{\infty} g(E) e^{-E\beta} dE = \frac{V^N (2\pi m)^{3N/2}}{N!h^3 (3N/2 - 1)!} \int_0^{\infty} E^{3N/2-1} e^{-\beta E} dE \quad (13)$$

令 $x = \beta E$ 对积分换元，

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} E^{3N/2-1} e^{-\beta E} dE &= (kT)^{3N/2} \int_0^{\infty} x^{3N/2-1} e^{-x} dx \\ &= (kT)^{3N/2} \Gamma(3N/2) \\ &= (kT)^{3N/2} (3N/2 - 1)! \end{aligned} \quad (14)$$

代入上式得

$$\begin{aligned} Q &= \frac{V^N (2\pi m)^{3N/2}}{N! h^3 (3N/2 - 1)!} (kT)^{3N/2} (3N/2 - 1)! \\ &= \frac{V^N (2\pi m k T)^{3N/2}}{N! h^3} = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N \\ &= \frac{1}{N!} Q_1^N \end{aligned} \quad (15)$$

与之前的结果都一样.

热力学性质

得到系统的配分函数 Q 以后, 可由用亥姆霍兹自由能得到热力学的性质

$$F = -kT \ln Q = -kT (N \ln Q_1 - N \ln N + N) \quad (16)$$

$$S = Nk \left(\ln \frac{V}{N\lambda^3} + \frac{5}{2} \right) \quad (17)$$

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = \frac{NkT}{V} \quad (\text{理想气体状态方程}) \quad (18)$$

$$\mu = kT \ln \frac{N\lambda^3}{V} = kT \ln \frac{N}{Q_1} \quad (19)$$

在巨正则系综里, 定义逸度为 $z = e^{\mu/kT}$, 则 $N = zV/\lambda^3 = zQ_1$.

分布函数

若有 N 个粒子组成理想气体, 每个能级平均有多少粒子 (由于理想气体的条件是能级占有率 $\langle n_i \rangle \ll 1$, 但仍然会有分布曲线)

对任何一个粒子来说, 出现在 ε_i 能级 (非简并) 的概率是 $e^{-\beta\varepsilon_i}/Q_1 = \lambda^3 e^{-\beta\varepsilon_i}/V$. 那么 N 个没有相互作用的粒子在该能级的平均粒子数就为

$$\langle n_i \rangle = \frac{N\lambda^3}{V} e^{-\beta\varepsilon_i} \quad (20)$$

理想气体的化学能 $\mu = kT \ln N\lambda^3/V$, 即 $e^{\mu/kT} = N\lambda^3/V$. 代入上式, 得

$$\langle n_i \rangle = e^{\beta\mu} e^{-\beta\varepsilon_i} = e^{(\mu-\varepsilon_i)/kT} \quad (21)$$

这就是麦克斯韦-玻尔兹曼分布.

理想气体（巨正则系综法）

理想气体的巨配分函数

结论

$$\Xi = \exp(zQ_1) = \exp\left(\frac{zV}{\lambda^3}\right) \quad (1)$$

推导

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} e^{(N\mu - E_i)\beta} = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Q \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} z^N \frac{1}{N!} Q_1^N \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} (zQ_1)^N \\ &= \exp(zQ_1) \\ &= \exp\left(\frac{zV}{\lambda^3}\right) \end{aligned} \quad (2)$$

其中用到了指数函数的泰勒展开

$$\exp(x) = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 \dots = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} x^N \quad (3)$$

状态方程推导

首先求出理想气体的巨势

$$\Phi = -kT \ln \Xi = -kT \frac{zV}{\lambda^3} \quad (4)$$

由巨正则系综法

$$d\Phi = -P dV - S dT - N d\mu \quad (5)$$

$$P = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial V}\right)_{T,\mu} = kT \frac{z}{\lambda^3} \quad (6)$$

注意 z 是 μ 和 T 的函数 ($z = e^{\mu/kT}$), λ 是 T 的函数, 所以 z 和 λ 在该偏微分中都看做常数.

$$N = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}\right)_{V,T} = kT \frac{V}{\lambda^3} \left(\frac{\partial z}{\partial \mu}\right)_{V,T} = \frac{Vz}{\lambda^3} \quad (= zQ_1) \quad (7)$$

若用上面两式消去 z/λ^3 因子, 得到理想气体状态方程 $PV = NkT$.

另外, 想象在巨正则系综的物理情景中, 变化 T 和 μ , 从而使式 7 中的粒子数保持不变, 则 N 不变时可以看成 T 的函数 (而这个函数应该与正则系综所得到的一样). 由式 7 得

$$\mu = kT \ln \frac{N\lambda^3}{V} \quad (8)$$

再测试一下状态方程 $PV = -\Phi$, 得到 $PV = kTzV/\lambda^3$, 这与上面的压强公式(编号)重复, 没有新的信息.

若把粒子数公式 $N = Vz/\lambda^3$ (编号)代入理想气体的巨配分函数 $\Xi = \exp(zV/\lambda^3)$ (编号) 以及巨势 $\Phi = -kTzV/\lambda^3$ (编号), 得到两个个相当简洁的表达式, 可以方便记忆

$$\Xi = \exp(N) \quad (9)$$

$$\Phi = -NkT \quad (10)$$

理想气体的熵为

$$\begin{aligned} S &= -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_{V,\mu} \\ &= Vk \frac{T}{\lambda^3} \frac{\partial z}{\partial T} + kTz \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{T}{\lambda^3}\right) \\ &= Vk \frac{T}{\lambda^3} \left(-\frac{\mu z}{kT^2}\right) + kTz \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{(2\pi mk)^{3/2} T^{5/2}}{h^3}\right) \\ &= -\frac{\mu z V}{T \lambda^3} + kTz \frac{5}{2} \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \\ &= -\frac{\mu z V}{T \lambda^3} + \frac{5}{2} \frac{kTz}{\lambda^3} \\ &= Nk \left(\frac{5}{2} - \frac{\mu}{kT}\right) \end{aligned} \quad (11)$$

这里得出的熵是 μ 和 T 的函数 (从巨正则系综的物理情景来看, 得出的所有结果都应该是预先设定的参数 μ 和 T 的函数).

为了和巨正则系综比较，把式 8 代入式 11，即把粒子数人为保持不变，一切看成温度的函数。果然得到了理想气体的熵（Sackur-Tetrode 公式）

$$S = Nk \left(\ln \frac{V}{N\lambda^3} + \frac{5}{2} \right) \quad (12)$$

理解

巨正则系综法的物理情景是：让系统（体积 V ）与粒子源（化学势 μ ）和热源（温度 T ）保持平热平衡，由 μ 和 T 决定粒子数 N ，压强 P ，能量 E 等等。这与微正则系综或正则系综的物理情景不一样。但是得到的结论却是一样的。

巨正则系综法

中心思想

一系统与热源达到平衡，热源温度为 T ，化学势为 μ ，那么系统在任意一个包含 N 个粒子，能量 E 的非简并状态的概率为

$$\frac{e^{(\mu N - E)/kT}}{\Xi} \quad (1)$$

其中，巨配分函数使所有状态的概率之和为一，起到归一化的作用。

$$\Xi = \sum_N \sum_i e^{(\mu N - E_i)/kT} \quad (2)$$

推导

“能级导向”

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \exp \left(N\mu - \sum_{i=1}^{\infty} n_i \varepsilon_i \right) \beta = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* z^N \prod_{i=0}^{\infty} (e^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \prod_{i=0}^{\infty} (ze^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} \\ &= \sum_{n_1}^* \sum_{n_2}^* \dots \prod_{i=0}^{\infty} (ze^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} = \sum_{n_1}^* (ze^{-\varepsilon_1 \beta})^{n_1} \sum_{n_2}^* (ze^{-\varepsilon_2 \beta})^{n_2} \dots = \prod_i^* \sum_{n_i}^* (ze^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} \end{aligned} \quad (3)$$

系统的热力学性质

由最大概率项假设，

$$1 = \frac{\Omega e^{(\mu N - E)/kT}}{\Xi} = \frac{e^{S/k} e^{(\mu N - E)/kT}}{\Xi} \quad (4)$$

$$e^{S/k} e^{(\mu N - E)/kT} = \Xi \quad (5)$$

$$E - ST - \mu N = -kT \ln \Xi \quad (6)$$

令 $\Phi = -kT \ln \Xi$ 叫做巨势

$$\Phi = E - ST - \mu N \quad (7)$$

$$\Phi = E - ST - \mu N = F - G = E - ST - (E - ST + PV) = -PV \quad (8)$$

考慮到 $dE = T dS - P dV + \mu dN$

$$d\Phi = -P dV - S dT - N d\mu \quad (9)$$

所以

$$S = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_{V,\mu}, N = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}\right)_{V,T}, P = -\left(\frac{\partial \Phi}{\partial V}\right)_{T,\mu} \quad (10)$$

另外有一个求能级分布的公式

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* n_i \exp \left(N\mu - \sum_{i=1}^{\infty} n_i \varepsilon_i \right) \beta = -\frac{1}{\beta \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \varepsilon_i} = -kT \frac{\partial}{\partial \varepsilon_i} \ln \Xi = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_i} \quad (11)$$

量子气体（单能级巨正则系综法）

我们可以把一个包含许多粒子的系统看做热池，把每个能级 ε_i 看做一个系统。为了便于理解，可以把能级想象成一个盒子，所有处于该能级的粒子都在盒内，都具有能量 ε_i 。当 ε_i 系统中粒子数为 n_i 时，系统的总能量为 $E = n_i \varepsilon_i$ 。注意对于一个 n_i ，由于同种粒子不可区分，系统只有一种状态，所以在当前系统的巨配分函数中，对能量的求和只有一项。

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{n_i} \sum_{E_j} e^{(n_i \mu - E_j) \beta} = \sum_{n_i} e^{(n_i \mu - E) \beta} \\ &= \sum_{n_i} e^{(n_i \mu - n_i \varepsilon_i) \beta} = \sum_{n_i} [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i}\end{aligned}\tag{1}$$

系统 (ε_i 能级) 中的平均粒子数为

$$\begin{aligned}\langle n_i \rangle &= \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i} \sum_{E_j} n_i e^{(n_i \mu - E_j) \beta} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i} n_i [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i}\end{aligned}\tag{2}$$

费米子

由于泡利不相容原理，一个能级只能存在 0 或 1 个费米子（这里忽略自旋）。

$$\Xi = \sum_{n_i=0}^1 [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i} = 1 + e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}\tag{3}$$

ε_i 能级的平均粒子数为

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i=0}^1 n_i [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i} = \frac{0 + e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}}{1 + e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu) \beta} + 1}\tag{4}$$

这就是著名的费米-狄拉克分布。

波色子

任何能级都允许同时存在任意数量的玻色子，所以上面两式中对 n_i 的求和上限变为正无穷即可（见等比数列求和以及类等比数列求和）。但为了使求和收敛，必须要求 $e^{(\varepsilon_i - \mu)\beta} - 1 > 0$ ，或者 $\mu < \varepsilon_i$ 。

$$\Xi = \sum_{n_i=0}^{\infty} [e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta}]^{n_i} = \frac{1}{1 - e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta}} \quad (5)$$

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i=0}^1 n_i [e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta}]^{n_i} = [1 - e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta}] \frac{e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta}}{[1 - e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta}]^2} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)\beta} - 1} \quad (6)$$

这就是著名的波色-爱因斯坦分布。

当每个能级的平均粒子数 $\langle n_i \rangle$ 都很小时，即 $\langle n_i \rangle \ll 1$ 时， $\langle n_i \rangle = 1/(e^{(\varepsilon_i - \mu)\beta} \pm 1)$ 的分母 $\gg 1$ ，分布可以近似为

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)\beta}} = e^{(\mu - \varepsilon_i)\beta} \quad (7)$$

这就是麦克斯韦-玻尔兹曼分布，对应理想气体。由此可见，当该分布的总粒子数为

$$N = \sum_i^{\infty} \langle n_i \rangle = e^{\mu\beta} \sum_i^{\infty} e^{-\varepsilon_i\beta} = zQ_1 \quad (8)$$

为了验证该式的正确性，代入理想气体的化学势和单粒子配分函数，上式成立。

$$\mu = kT \ln \frac{N\lambda^3}{V} \quad Q_1 = \frac{V}{\lambda^3} \quad (9)$$

这种方法虽然可以简单地求出分布函数，但却不能求出其他物理量，例如量子气体的压强，熵，等。因为我们的系统只包含一个能级，而不是大量粒子。要使用标准的巨正则系综，必须把包含大量粒子的量子气体作为系统，并考虑每个粒子数对应的所有可能的能级分布。

量子气体（巨正则系综）

假设 N 个玻色子（不可区分）之间没有互相作用，每个粒子具有能级 ε_i （这里先假设每个粒子都只有 m 个能级而不是无穷多个，最后再说明 $m \rightarrow \infty$ 时成立）。化学势为 μ ，则巨分配函数为

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* e^{(N\mu - \varepsilon_i)\beta} \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* z^N \exp\left(-\beta \sum_i^m n_i \varepsilon_i\right) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \left(\prod_{i=1}^{\infty} z^{n_i}\right) \left(\prod_{i=1}^{\infty} (e^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i}\right) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \prod_{i=1}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i}\end{aligned}\tag{1}$$

其中 $\sum_{\{n_i\}}^*$ 求和时，由于同一个能级上的玻色子数量不限，限制条件仅为 $\sum_i^m n_i = N$ （对于费米子，由于不相容原理，要求 $\sum_i^m n_i = N$ 以及 $n_i \leq 1$ ）。

巨正则系综的最大优势就是可以利用关系

$$\sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* (\) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_m=0}^{\infty} (\)\tag{2}$$

于是

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \prod_{i=1}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i} \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \sum_{n_m=0}^{\infty} \prod_{i=1}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i} \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_1})^{n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_2})^{n_2} \dots \sum_{n_m=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_m})^{n_m} \\ &= \prod_{i=1}^m \sum_{n_i=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i}\end{aligned}\tag{3}$$

物理学常数定义

国际单位的定义 (SI Units)

物理单位的一个重要性质就是可测量，至少理论上可测量。以下的数值除了有特殊说明，都是精确值（无限位小数用省略号表示），不存在误差。

秒 (s) 的定义

铯原子 133 基态的超精细能级之间的跃迁辐射的电磁波周期的 $9, 192, 631, 770$ 倍。说明：我们知道原子中的电子具有不同的能级，当电子从一个能级跃迁到一个更低的能级时，会放出一个光子。光子的频率为 $\nu = \varepsilon/h$ ，其中 ε 是光子的能量， h 为普朗克常数。

米 (m) 的定义

真空中，光在 $1/299792458$ 秒内传播的距离说明：由于真空中的光速是物质和信息能传播的最快速度，且在任何参考系中都相同，所以可以作为一个精确的标准。结合秒的定义，就可以通过实验得到一米的长度。

光速 (c) 的定义

$$c = 299792458 \text{ m/s} \quad (1)$$

说明：根据米的定义，一秒中光可以在真空中传播 299792459 m 。

千克 (kg) 的定义

等于国际公斤原器的质量说明：千克是现有的唯一一个由特定的物品所定义单位。国际公斤原器是国际计量大会制造的，并复制若干份分别存放，但经过长时间后被发现和复制品存在细微误差。国际计量大会最终在 2014 年决定原则上千克应该由普朗克常数所决定，但是最终的定义再次被推迟。

牛顿 (N) 的定义

等于使 $1kg$ 物体获得 $1m/s^2$ 加速度的力.

真空磁导率 (μ_0) 的定义

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} N/A^2 \quad (2)$$

真空介电常数 (ϵ_0) 的定义

$$\epsilon_0 = 1/(c^2 \mu_0) = 8.8541878176... \times 10^{-12} F/m \quad (3)$$

说明: 其中 c 是光速, μ_0 是真空磁导率. 根据该定义, $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$.

库伦 (C) 的定义

若真空中两个相同的点电荷相距一米, 产生的相互作用力为 $1/4\pi\epsilon_0$, 则该点电荷为 1 库伦.

安培 (A) 的定义

以下两种定义等效:

1. 每秒钟经过横截面的电荷量为 1 库伦的电流就是 1 安培.
2. 两根相距一米的无限长平行细导线流入 1 安培电流后, 相互作用力是 $2 \times 10^{-7} N/m$.

第四部分

小时物理笔记

电磁场角动量分解

电磁场的动量为

$$\mathbf{p} = \epsilon_0 \int dV \mathbf{E} \times \mathbf{B} \quad (1)$$

角动量为

$$\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \epsilon_0 \int dV \mathbf{r} \times \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (2)$$

现在假设电磁场只在一定范围内不为零，且体积分的边界处场强为零。假设该范围内没有净电荷与电流，则

$$\begin{aligned} \mathbf{r} \times \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \mathbf{r} \times [\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A}(\mathbf{E} \cdot \nabla)]_{\partial A} \\ &= [(\mathbf{r} \times \nabla)(\mathbf{E} \cdot \mathbf{A}) - (\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial A} \end{aligned} \quad (3)$$

其中转微分算符 $[]_{\partial A}$ 的作用是先把方括号内的 ∇ 作为普通矢量进行计算，再把展开结果中每一项的偏微分作用在 A 的分量上。上式第一项为 $\sum_i E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i$ ，第二项为

$$-[(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial A} = -(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A}) + [(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial r} \quad (4)$$

其中第二项为 $[(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial r} = [(\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{r}] \times \mathbf{A} = \mathbf{E} \times \mathbf{A}$ ，第一项中

$$\begin{aligned} (\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A}) &= [(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial ErA} - [(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial E} \\ &= [(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial ErA} \end{aligned} \quad (5)$$

这是因为 $[(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial E} = (\nabla \cdot \mathbf{E})(\mathbf{r} \times \mathbf{A}) = 0$ 。综上，

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 \int dV \sum_i E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i + \epsilon_0 \int dV \mathbf{E} \times \mathbf{A} + \epsilon_0 \int dV [(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial ErA} \quad (6)$$

现在证明最后一项为 0。以 x 分量为例，

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}} \int dV [(\mathbf{E} \cdot \nabla)(\mathbf{r} \times \mathbf{A})]_{\partial ErA} &= \int dV \nabla \cdot [\mathbf{E}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A})] \\ &= \oint ds \mathbf{E}(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}) = 0 \end{aligned} \quad (7)$$

最后一步是因为边界处场强为零. 现在我们可以看出角动量由两部分组成

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad \mathbf{L} = \epsilon_0 \int dV \sum_i E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i \quad \mathbf{S} = \epsilon_0 \int dV \mathbf{E} \times \mathbf{A} \quad (8)$$

其中 \mathbf{L} 是轨道角动量, \mathbf{S} 是自旋角动量.

晶体衍射

米勒指数

这里只讨论长方体晶格，假设三条边分别为 a, b, c . 晶格面是通过许多格点的平面. 取一个格点为原点，平面过三条坐标轴的截距分别定义为 $a/h, b/k, c/l$. 其中 h, k, l 必须是整数. 这样，平面方程为

$$\frac{x}{a/h} + \frac{y}{b/k} + \frac{z}{c/l} = 1 \quad (1)$$

法向量为 $(h/a, k/b, l/c)/\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}$. 现在来看相邻的两平面相距多少. 截点有仍然需要落在格点上，所以只能是所有截距变为两倍. 两平面的距离为法向量点乘任何一个截距的增量矢量

$$d = \frac{1}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}} \quad \frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (2)$$

布拉格衍射公式

两个平面，不管格点在上面如何分布，若入射光和出射光和平面夹角都为 θ ，那么光程差为 $\delta = 2d \sin \theta$ ，干涉条件为

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (3)$$

Crystalline Scattering Factor

晶格中各个原子的位置用 (x, y, z) 表示，坐标为 (ax, by, cz) . 在进行布拉格衍射时，同一个 cell 里面的不同格点会产生不同平面组，即不同相位. 例如两点 (x_1, y_1, z_1) 和 (x_2, y_2, z_2) 所在的两个平面

$$\begin{aligned} d_{12} &= \frac{(h/a, k/b, l/c)}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}} \cdot [a(x_2 - x_1), b(y_2 - y_1), c(z_2 - z_1)] \\ &= \frac{(h\Delta x + k\Delta y + l\Delta z)}{\sqrt{(h/a)^2 + (k/b)^2 + (l/c)^2}} = d(h\Delta x + k\Delta y + l\Delta z) \end{aligned} \quad (4)$$

然而发生衍射时， d 对应的相位差为 2π ，所以 d_{12} 对应的相位差为

$$\delta = 2\pi(h\Delta x + k\Delta y + l\Delta z) \quad (5)$$

如果一个晶格有多个原子，每个原子的散射振幅为 f_i ，那么总振幅为

$$F = \sum_i f_i e^{2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i)} \quad (6)$$

Hartree-Fock 方法

Hartree 方法的精髓是假设多粒子波函数 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ 等于每个单粒子波函数（包括自旋）的乘积 $u_1(q_1)u_2(q_2)\dots u_N(q_N)$ (Hartree 函数)，其中不同的单粒子波函数要求正交归一。然后找到最优的单粒子波函数 u_1, u_2, \dots, u_N 使总哈密顿的平均值最小。所以该方法属于变分法。得到的能级大于精确能级。

注意 Hartree 函数并不满足全同粒子的对易关系，既不是对称也不是反对称。对于全同费米子，方法是令多粒子函数为单粒子函数（包括自旋）的 Slater 行列式。

$$\Psi(q_1, q_2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_1(q_1) & u_2(q_1) & \cdots \\ u_1(q_2) & u_2(q_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \quad (1)$$

变分法的拉格朗日乘数函数为

$$L = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \sum_{ij} \varepsilon_{ij} \langle u_i | u_j \rangle \quad (2)$$

为了化简第二项，令原基底为另一组基底的么正变换

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3)$$

可以证明第一项不变。因为

$$\begin{aligned} \Psi(q_1, q_2, \dots) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_1(q_1) & u_2(q_1) & \cdots \\ u_1(q_2) & u_2(q_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left| \mathbf{U} \begin{pmatrix} u'_1(q_1) & u'_1(q_2) & \cdots \\ u'_2(q_1) & u'_2(q_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \right| \\ &= \frac{|\mathbf{U}|}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u'_1(q_1) & u'_2(q_1) & \cdots \\ u'_1(q_2) & u'_2(q_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u'_1(q_1) & u'_2(q_1) & \cdots \\ u'_1(q_2) & u'_2(q_2) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

注意这里用到了 $|\mathbf{AB}| = |\mathbf{A}||\mathbf{B}|$ 和 $|\mathbf{U}| = e^{i\theta}$ 。这是说，平均能量关于 u 的公式不受么正变换的影响。对第二项，

$$\sum_{ij} \varepsilon_{ij} \langle u_i | u_j \rangle = \int (u'_1{}^*, u'_2{}^* \dots) \mathbf{U}^\dagger \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{U} \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} dq \quad (5)$$

若我们选择幺正变换，使得 $\mathbf{U}^\dagger \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{U} = E_i \delta_{ij}$ ，即把矩阵 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 角化（下文可知 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为对称矩阵），得

$$\sum_{ij} \varepsilon_{ij} \langle u_i | u_j \rangle = \sum_i E_i \langle u_i | u_i \rangle \quad (6)$$

现在把所有的撇号省略，拉格朗日函数为

$$L = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \sum_i E_i \langle u_i | u_i \rangle \quad (7)$$

即约束条件只需要归一化，正交会自动完成。现在来化简第一项。首先把总波函数中的行列式记为求和的形式

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{N!} (-1)^p \hat{P} \Psi_H \equiv \sqrt{N!} \hat{A} \Psi_H \quad (8)$$

其中 $\Psi_H = u_1(q_1)u_2(q_2)\dots$ 是 Hartree 函数， \hat{P} 是置换算符，相当于做 p 次双粒子置换（ p 是逆序数），行列式展开后共有 $N!$ 项。 \hat{A} 为反对称化算符，由于 \hat{H} 和 \hat{A} 存在一组共同本征矢， $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ ，另外可以证明， $\hat{A}^2 = \hat{A}$ （意义是反对称化只需要一次）（可先证明 $N = 2, 3$ ，高阶行列式同理）。

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle &= N! \langle \Psi_H | \hat{A} \hat{H} \hat{A} | \Psi_H \rangle = N! \langle \Psi_H | \hat{H} \hat{A}^2 | \Psi_H \rangle \\ &= N! \langle \Psi_H | \hat{H} \hat{A} | \Psi_H \rangle = \sum_{N!} (-1)^p \langle \Psi_H | \hat{H} \hat{P} | \Psi_H \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

我们现在考虑多电子原子（离子）问题

$$\hat{H} = \sum_i \hat{h}_i + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad \hat{h}_i = -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + \frac{Z}{r_i} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \sum_i \hat{h}_i | \Psi \rangle &= \sum_i \sum_{N!} (-1)^p \langle \Psi_H | \hat{h}_i \hat{P} | \Psi_H \rangle = \sum_i \langle \Psi_H | \hat{h}_i | \Psi_H \rangle \\ &= \sum_i \langle u_i | \hat{h}_i | u_i \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

这是因为只有当 \hat{P} 为 1 时（行列式的对角项，逆序数 $p = 0$ ）积分才不为零。同理， \hat{H} 剩下的部分为

$$\langle \Psi | \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} |\Psi\rangle = \sum_{i < j} \sum_{N!} (-1)^p \langle \Psi_H | \frac{1}{r_{ij}} \hat{P} |\Psi_H\rangle \quad (12)$$

现在 $P = 1$ 或者 $P = P_{ij}$ ($p = 1$) 时积分都可能不为零。所以

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} |\Psi\rangle &= \sum_{i < j} \langle \Psi_H | \frac{1}{r_{ij}} (1 - P_{ij}) |\Psi_H\rangle \\ &= \sum_{i < j} \langle u_i u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_i u_j\rangle - \sum_{i < j} \langle u_i u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_j u_i\rangle \\ &\equiv \sum_{i < j} J_{ij} - \sum_{i < j} K_{ij} \end{aligned} \quad (13)$$

注意这里 $|u_i u_j\rangle^\dagger$ 记为 $\langle u_i u_j|$ 而不是 $\langle u_j u_i|$ 。另外易证 $J_{ij} = J_{ji}$, $K_{ij} = K_{ji}$ (交换积分变量即可) 所以

$$L = \sum_i \langle u_i | \hat{h}_i | u_i \rangle + \sum_{i < j} \langle u_i u_j | \frac{1}{r_{ij}} \langle u_i u_j | - \sum_{i < j} \langle u_i u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_j u_i\rangle - \sum_i E_i \langle u_i | u_j \rangle \quad (14)$$

现在，类似于变分法中的过程，把任意一个 $\langle u_k|$ 变为 $\langle u_k + \delta u_k|$ ，减去上式，令为 0，得

$$\langle \delta u_k | h_k | u_k \rangle + \sum_j^{(j \neq k)} \langle \delta u_k u_j | \frac{1}{r_{jk}} |u_k u_j\rangle - \sum_j^{(j \neq k)} \langle \delta u_k u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_j u_k\rangle - E_k \langle \delta u_k | u_k \rangle = 0 \quad (15)$$

即

$$\langle \delta u_k | \left[h_k |u_k\rangle + \sum_j^{(j \neq k)} \langle u_j | \frac{1}{r_{jk}} |u_j\rangle |u_k\rangle - \sum_j^{(j \neq k)} \langle u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_k\rangle |u_j\rangle - E_k |u_k\rangle \right] = 0 \quad (16)$$

最后，由于 $\langle \delta u_k |$ 可以取任意微小函数，与之相乘的 ket 必须为零

$$h_k |u_k\rangle + \left[\sum_j^{(j \neq k)} \langle u_j | \frac{1}{r_{jk}} |u_j\rangle \right] |u_k\rangle - \sum_j^{(j \neq k)} \left[\langle u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_k\rangle \right] |u_j\rangle = E_k |u_k\rangle \quad (17)$$

这是所谓的，非线性耦合微分积分本征方程组。

注意虽然现在 trial 波函数满足全同费米子的反对称，一般却不是总自旋角动量的本征函数（其实也不是总轨道角动量的本征函数，除非把无穷个不同的 Ψ_H 求和）。为了实现这点，可以先指定总自旋角动量 $|S, M\rangle$ ，然后通过对行列式线性组合构建自旋部分为 $|S, M\rangle$ 的 trial 波函数。

例 1 氦原子

对于 He 原子的 singlet 自旋态 $(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)/\sqrt{2}$ ，可以用一个行列式构建 trial 波函数。由于自旋为反对称，轨道波函数必须为对称，对于基态，这意味着两个轨道波函数相同

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \phi(\mathbf{r}_1) \uparrow & \phi(\mathbf{r}_1) \downarrow \\ \phi(\mathbf{r}_2) \uparrow & \phi(\mathbf{r}_2) \downarrow \end{vmatrix} = \phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)/\sqrt{2} \quad (18)$$

把 $u_1 = \phi \uparrow$, $u_2 = \phi \downarrow$ 代入本征方程组得单个轨道波函数的本征方程

$$\hat{h}|\phi\rangle + \langle\phi| \frac{1}{r_{12}} |\phi\rangle |\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (19)$$

当然也可以直接把 $\Psi = \phi(\mathbf{r}_1)\phi(\mathbf{r}_2)(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)/\sqrt{2}$ 代入能量平均值公式，用分母 $\langle\phi|\phi\rangle$ 归一化或者用拉格朗日乘数法做，得到的方程与上式一样

$$\begin{aligned} L &= 2\langle\phi\phi|\hat{h}|\phi\phi\rangle + \langle\phi\phi| \frac{1}{r_{12}} |\phi\phi\rangle - \lambda[\langle\phi\phi|\phi\phi\rangle - 1] \\ &= 2\langle\phi|\hat{h}|\phi\rangle + \langle\phi\phi| \frac{1}{r_{12}} |\phi\phi\rangle - \lambda[\langle\phi\phi|\phi\phi\rangle - 1] \end{aligned} \quad (20)$$

注意拉格朗日乘数法中的优化函数可以使用限制条件化简。令增量为 0

$$2\langle\delta\phi|h|\phi\rangle + 2\langle\delta\phi\phi| \frac{1}{r_{12}} |\phi\phi\rangle - \lambda\langle\delta\phi|\phi\rangle = 0 \quad (21)$$

其中使用了 $\delta\langle\phi\phi| = \langle\delta\phi\phi| + \langle\phi\delta\phi|$ 。

$$\hat{h}|\phi\rangle + \langle\phi| \frac{1}{r_{12}} |\phi\rangle |\phi\rangle = \frac{\lambda}{2} |\phi\rangle \quad (22)$$

对于其他的自旋态，往往需要行列式的线性组合才能构造总自旋本征态，这个比较复杂，先来看另一种方法。我们可以直接指定总自旋态，如果要求轨道波函数反对称，可把 $u_i(q_i) = \phi_i(\mathbf{r}_i)$ 直接代入本征方程组即可，而当要求轨道波函数对称时，可以把以上的反对称化算符 \hat{A} 中的 $(-1)^p$ 去掉改成对称化算符 \hat{B}

$$\hat{B}|\Psi_H\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{N!} \hat{P}|\Psi_H\rangle \quad (23)$$

\hat{B} 同样满足 $[\hat{H}, \hat{B}] = 0$, $\hat{B}^2 = \hat{B}$. 以上推导全部有效 (所有负号改成正号即可), 新的本征方程组变为

$$h_k |u_k\rangle + \left[\sum_j^{(j \neq k)} \langle u_j | \frac{1}{r_{jk}} |u_j\rangle \right] |u_k\rangle + \sum_j^{(j \neq k)} \left[\langle u_j | \frac{1}{r_{ij}} |u_k\rangle \right] |u_j\rangle = E_k |u_k\rangle \quad (24)$$

例 2 氦原子

考虑 He 的 $1s2s$, 1S 态, 即自旋为 singlet $|0, 0\rangle = (\uparrow\downarrow - \uparrow\downarrow)/\sqrt{2}$. 两个空间波函数不相同. 直接把 $u_1 = \phi_{1s}$, $u_2 = \phi_{2s}$ 代入上面的对称本征方程组, 得

$$\hat{h}_1 |\phi_{1s}\rangle + \langle \phi_{2s} | \frac{1}{r_{12}} |\phi_{2s}\rangle |\phi_{1s}\rangle + \langle \phi_{2s} | \frac{1}{r_{12}} |\phi_{1s}\rangle |\phi_{2s}\rangle = E_1 |\phi_{1s}\rangle \quad (25)$$

$$\hat{h}_2 |\phi_{2s}\rangle + \langle \phi_{1s} | \frac{1}{r_{12}} |\phi_{1s}\rangle |\phi_{2s}\rangle + \langle \phi_{1s} | \frac{1}{r_{12}} |\phi_{2s}\rangle |\phi_{1s}\rangle = E_2 |\phi_{2s}\rangle \quad (26)$$

如果直接用 $|\Psi\rangle = (\phi_1\phi_2 + \phi_2\phi_1)/\sqrt{2}$, 结果相同.

本书格式规范

预备知识 本书格式规范[\[389\]](#)

蓝色的小标题

本书使用 TeXLive2016 软件中的 XeLaTeX 进行编译. 如果 Windows 中编译卡在 eu11mr.fd 上的时间较长, 说明 font config 有问题, 在 Windows 的控制台运行 “fc-cache -fv”, 重启 TeXLive, 多试几次即可. TeXWork 编辑器中 Ctrl+T 编译, Ctrl+ 单击跳转到对应的 pdf 或代码, 在 pdf 中 Alt+ 左箭头返回上一个位置. 代码中\beq+Tab 生成公式环境, \sub+Tab 生成 subsection. Ctrl+F 进行查找, Ctrl+G 查找下一个. 菜单中的 Edit>Preference 设置默认字体为 Microsoft YaHei UI (11pt), 默认编译器为 XeLaTeX, 编码选择 UTF-8.

搜索文件夹内所有文档的内容用 FileSeek 软件, 搜索空格用 “\空格”, 搜索 “\$” 用 “\\$”, 以此类推. 对比两个文档或文件夹用 WinMerge 软件.

画图用 Adobe Illustrator 和 Autodesk Graphics, 用 MathType 在图中添加公式, 希腊字母粗体正体矢量用从 Symbol 字体中插入, 更简单的方法是, 先输入希腊字母, 选中, 然后在 Style 里面选 Vector-Matrix.

黑色的小标题

词条标签必须限制在 6 个字符内, 必须记录在 “词条标签对照表” 中, 如果不是超纲词条, 在主文件中用 entry 命令, 否则用 Entry 命令. 词条的文件名和标签名相同. 词条文件的首行必须注释词条的中文名, 非超纲词条放在 contents 文件夹, 超纲词条放在 contents1 文件夹. 引用词条用 upref 命令, “预备知识” 用 pentry 命令, “应用实例” 用 eentry 命令, 拓展阅读用 rentry 命令. 总文件 PhysWiki.tex 编译较慢, 可以先使用 debug.tex 编译, 然后再把 entry 或 Entry 指令复制到 PhysWiki.tex 中.

正文必须使用中文的括号, 逗号, 引号, 冒号, 分号, 问号, 感叹号, 以及全角实心的句号. 所有的标点符号前面不能有空格, 后面要有空格. 行内公式用单个美元符号, 且两边要有空格, 例如 $a^2 + b^2 = c^2$, 后面有标点符号的除

外。方便的办法是先全部使用中文标点，最后再把所有空心句号替换成全角实心句号。

公式的 label 必须要按照“词条标签 _eq 编号”的格式，只有需要引用的公式才加标签，编号尽量与显示的编号一致，但原则上不重复即可。图表的标签分别把 eq 改成 fig 和 tab 即可，例题用 ex. 但凡是有 caption 命令的，label 需要紧接其后。

$$(a + b)^n = \sum_{i=0}^n C_n^i a^i b^{n-i} \quad (n \text{为整数}) \quad (1)$$

引用公式和图表都统一使用 autoref 命令，注意前面不加空格后面要加空格，例如式 1。如果要引用其他词条中的公式，可以引用“其他词条^[389]”的式 1 也可以用“式 1^[389]”，为了方便在纸质书上使用，词条页码是不能忽略的。

公式中的空格从小到大如 $a b c d e$ ，微分符号如 dx ，自然对数底如 e ，双重极限如

$$\lim_{\substack{\Delta x_i \rightarrow 0 \\ \Delta y_i \rightarrow 0}} \sum_{i,j} f(x_i, y_i) \Delta x_i \Delta y_j \quad (2)$$

导数和偏导尽量用 Physics 宏包里面的

$$\frac{d}{dx} \quad \frac{df}{dx} \quad \frac{d^2f}{dx^2} \quad d^2f/dx^2 \quad \frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial f}{\partial x} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad \partial^2 f/\partial x^2 \quad (3)$$

复数如 $u + iv$ ，复共轭如 a^* ，行内公式如 a/b ，不允许行内用立体分式。公式中的绝对值如 $|a|$ ，矢量如 \mathbf{a} ，单位矢量如 $\hat{\mathbf{a}}$ ，矢量点乘如 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ （不可省略），矢量叉乘如 $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 。量子力学算符如 \hat{a} ，狄拉克符号如 $\langle a |, |b \rangle, \langle a | b \rangle$ 。梯度散度旋度拉普拉斯如 ∇V , $\nabla \cdot \mathbf{A}$, $\nabla \times \mathbf{A}$, $\nabla^2 V$ ，但最好用 ∇V , $\nabla \cdot \mathbf{A}$, $\nabla \times \mathbf{A}$, $\nabla^2 V$ 。单独一个粗体的 ∇ 用 $\boldsymbol{\nabla}$ 。行列式，矩阵 \mathbf{A} ，转置 \mathbf{A}^T ，厄米共轭 \mathbf{A}^\dagger 如

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{vmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}^T \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}^\dagger \quad (4)$$

行内的列矢量用行矢量的转置表示，如 $(1, 2, 3)^T$ 。

行间公式换行及对齐用 aligned 环境，或用自定义的 ali 命令

$$\begin{aligned} (a - b)^2 &= a^2 + b^2 - 2ab \\ &= a^2 + b^2 + 2ab - 4ab \\ &= (a + b)^2 - 4ab \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} d + e + f &= g \\ a + b &= c \end{aligned} \tag{6}$$

左大括号用自定义的 `leftgroup` 命令，里面相当于 `aligned` 环境

$$\left\{ \begin{array}{l} d + e + f = g \\ a + b = c \end{array} \right. \tag{7}$$

希腊字母如下

$$\begin{aligned} \alpha(a), \beta(b), \chi(c), \delta(d), \epsilon/\varepsilon(e), \phi(f), \gamma(g), \eta(h), \iota(i), \varphi(j), \kappa(k), \lambda(l), \mu(m), \\ \nu(n), o(o), \pi(p), \theta(q), \rho(r), \sigma(s), \tau(t), v(u), \varpi(v), \omega(w), \xi(x), \psi(y), \zeta(z) \end{aligned} \tag{8}$$

以下是 script 字母，只有大写有效。所谓大写 ϵ 其实是花体的 E .

$$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C}, \mathcal{D}, \mathcal{E}, \mathcal{F}, \mathcal{G}, \mathcal{H}, \mathcal{I}, \mathcal{J}, \mathcal{K}, \mathcal{L}, \mathcal{M}, \mathcal{N}, \mathcal{O}, \mathcal{P}, \mathcal{Q}, \mathcal{R}, \mathcal{S}, \mathcal{T}, \mathcal{U}, \mathcal{V}, \mathcal{W}, \mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z} \tag{9}$$

另外，电介质常数一律用 ϵ 而不是 ε .

现在来引用一张图片，图片必须以 `eps` 以及 `pdf` 两种格式放在 `figures` 文件夹中，代码中使用 `pdf` 图片。图片宽度一律用 `cm` 为单位。在图 1 中，`label` 只

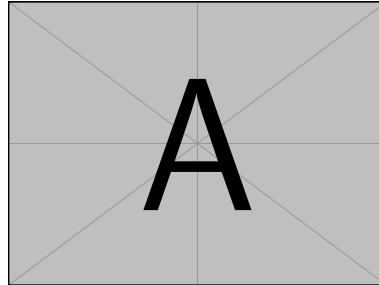


图 1: 例图

能放在 `caption` 的后面，否则编号会出错。由于图片是浮动的，避免使用“上图”，“下图”等词。

再来看一个表格，如表 1。注意标签要放在 `caption` 后面，使用 `tb` 命名。

下面我们举一个例子并引用

例 1 名称

在例子中，我们的字体可以自定义，包括公式的字号会保持与内容一致。

$$(a + b)^n = \sum_{i=0}^n C_n^i a^i b^{n-i} (n \text{ 为整数}) \tag{10}$$

表 1: 极限 e 数值验证

x	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
$(1+x)^{1/x}$	2.59374	2.70481	2.71692	2.71815	2.71827	2.71828

引用例子同样使用 autoref, 如[例 1](#).

以下给出一段 Matlab 代码, 代码必须有“.m”和“.tex”两个版本, 放在 codes 文件夹中.

Matlab 代码

显示 Command Window 中的代码

```
>> 1.2/3.4 + (5.6+7.8)*9 -1
ans = 119.9529
>> 1/exp(1)
ans = 0.3679
>> exp(-1i*pi)+1
ans = 0
```

显示 m 文件中的代码

代码必须以.tex 文件格式放在 code 文件夹中的中, 并用 input 命令导入正文。.tex 代码文件的命名与图片命名相同。禁止在正文中直接写代码。

```
1 % 验证二项式定理(非整数幂)
2 u = -3.5;
3 x = 0.6; % |x|<1 使级数收敛
4 N = 100; % 求和项数
5 Coeff = 1; % x^ii 项前面的系数
6 result = 1; % 求和结果
7 for ii = 1:N
8     Coeff = Coeff*(u-ii+1) / ii;
9     result = result + Coeff * x^(ii);
10 end
```

```
11 disp('直接计算结果为')  
12 format long % 显示全部小数位  
13 disp((1+x)^u)  
14 disp('求和结果为')  
15 disp(result)  
16 format short % 恢复默认显示
```

应用举例 本书格式规范[\[389\]](#)

拓展阅读 本书格式规范[\[389\]](#)