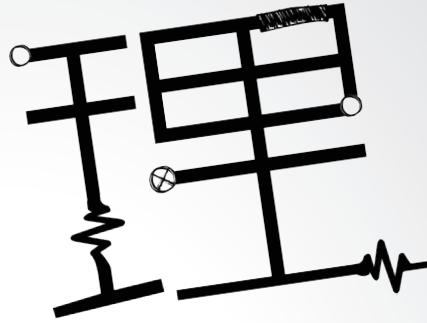
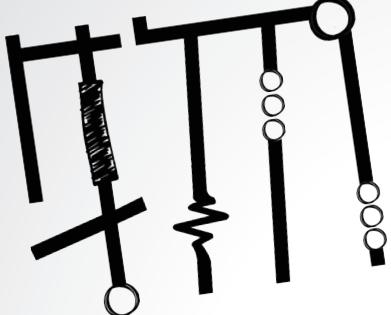


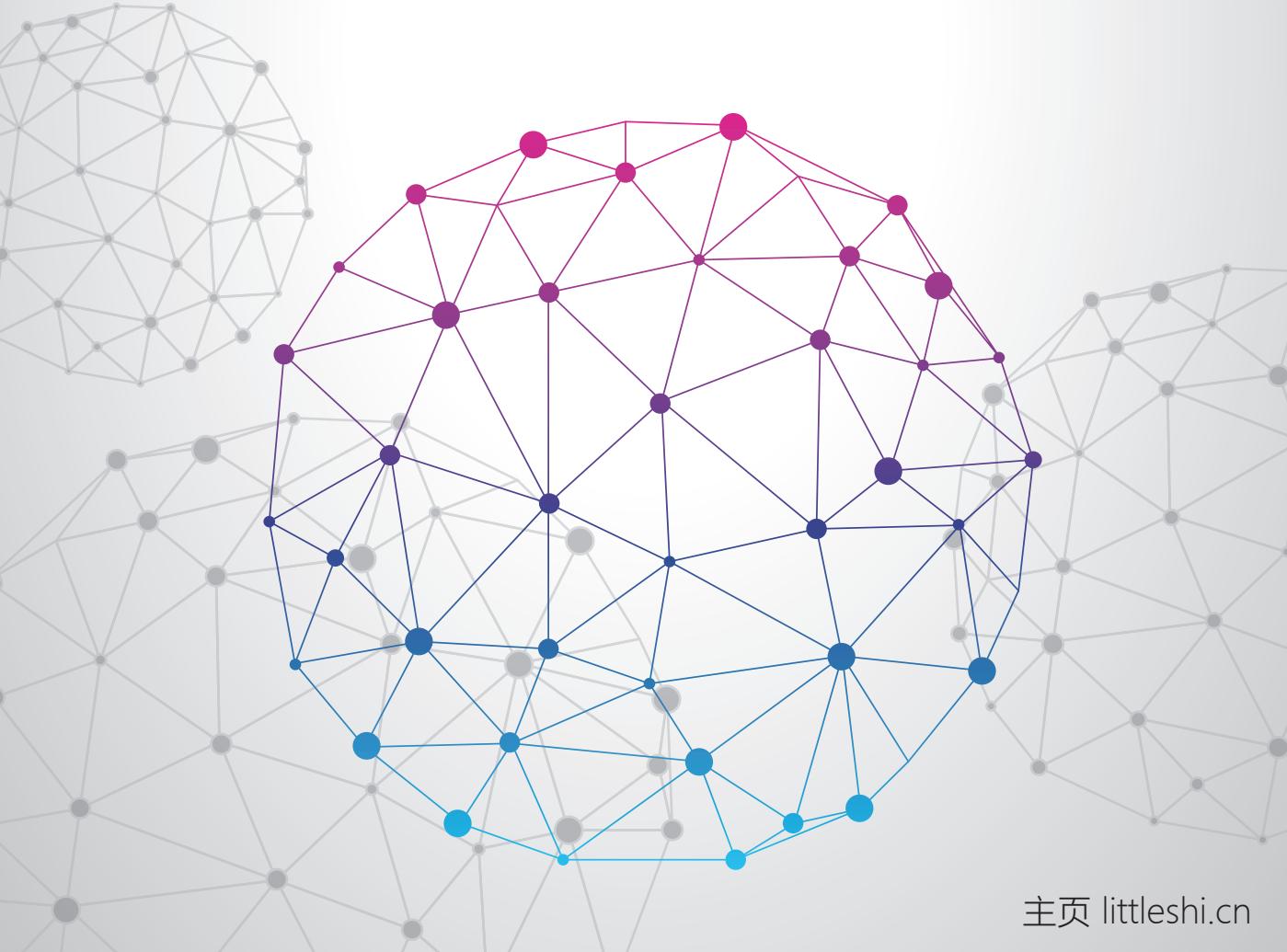
小时



百科

力学与相关数学

时宏宇 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大量的时间和精力，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本书网站 littleshicn。

关于本书

1. 内容

与网络上的百科（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。本书面向的读者是：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，想自学大学物理的人。2. 正在上相关大学物理课程的人（作为参考书或预习使用）。3. 已学过本书内容，但需要快速查阅相关内容的人。

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，少量习题，不设物理学史等拓展内容，因此不能代替相关课程的教材。

全书分为三个部分，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，概率与统计五章。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¹，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

¹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

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。

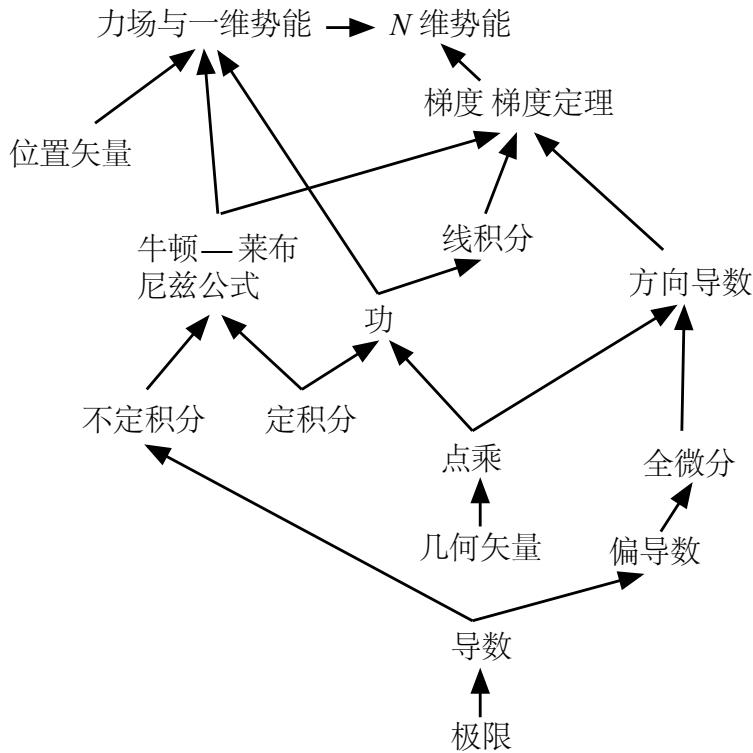


图 1: 由“预备知识”画出的知识结构图（目标词条为“力场 势能^[181]”）

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^[38]”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^[38]”的格式，右上角的方括号中是公式所在词条的起始页码。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。下载链接见本书网站 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²，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（狭义相对论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

²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³。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力学的关系。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。

³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] 三角恒等式 [5] 双曲函数 [6] 充分必要条件 [8] 极坐标系 [9] 柱坐标系 [11] 球坐标系 [12] 球坐标与直角坐标的转换 [14] 圆锥曲线的极坐标方程 [15] 椭圆的三种定义 [17] 双曲线的三种定义 [19] 抛物线的三种定义 [21] 复数 [22] 复变函数 [25] 指数函数（复数） [27] 三角函数（复数） [28]

第二章 一元微积分

微积分导航 [31] 极限 [32] 小角正弦极限 [35] 自然对数底 [36] 切线与割线 [37] 导数 [38] 求导法则 [40] 反函数求导 [42] 基本初等函数的导数 [43] 导数与函数极值 [47] 用极值点确定函数图像 [48] 一元函数的微分 [49] 复合函数求导（链式法则） [51] 泰勒展开 [53] 导数与差分 [56] 不定积分 [57] 换元积分法 [58] 分部积分法 [60] 积分表 [62] 定积分 [67] 牛顿—莱布尼兹公式 [71] 常微分方程 [73] 一阶线性微分方程 [74] 二阶常系数齐次微分方程 [75] 二阶常系数非齐次微分方程 [77] 正交函数系 [80] 傅里叶级数（三角） [81] 傅里叶级数（指数） [85]

第三章 线性代数

线性代数导航 [89] 几何矢量 [90] 矢量点乘 [94] 正交归一基底 [97] 右手定则 [98] 矢量叉乘 [99] 矢量叉乘分配律的几何证明 [102] 连续叉乘的化简 [103] 行列式 [104] 三矢量的混合积 [106] 平面旋转变换 [108] 线性变换 [109] 矩阵 [110] 逆矩阵 [115] 平面旋转矩阵 [116] 空间旋转矩阵 [118] 绕轴旋转矩阵 [118]

第四章 多元微积分

偏导数 [122] 二元函数的极值 [123] 最小二乘法 [124] 全微分 [126] 复合

函数的偏导 链式法则 [128] 全导数 [129] 矢量的导数 求导法则 [130] 一元矢量函数的积分 [132] 方向导数 [134] 重积分 [136] 极坐标系中单位矢量的偏导 [139] 正交曲线坐标系 [140] 曲线坐标系中的重积分 [142] 矢量场 [144] 线积分 [145] 曲面积分 通量 [147] 梯度 梯度定理 [149] 散度 散度定理 [154] 旋度 斯托克斯定理 [157]

第五章 概率与统计

随机变量的变换 [162]

第二部分 力学

第一章 质点

位置矢量 位移 [166] 速度 加速度 (一维) [167] 速度 加速度 [169] 圆周运动的速度 [170] 圆周运动的加速度 [172] 匀加速运动 [175] 极坐标中的速度和加速度 [176] 牛顿运动定律 惯性系 [177] 功 功率 [178] 动能 动能定理 (单个质点) [180] 力场 势能 [181] 机械能守恒 (单个质点) [185] 动量 动量定理 (单个质点) [185] 角动量 角动量定理 角动量守恒 (单个质点) [186] 简谐振子 [187] 受阻落体 [189] 单摆 [190] 傅科摆 [192] 惯性力 [193] 离心力 [196] 科里奥利力 [196] 地球表面的科里奥利力 [200]

第二章 质点系与刚体

常见物理量 [203] 自由度 [203] 质点系 [204] 质心 质心系 [205] 刚体 [207] 二体系统 [209] 二体碰撞 [210] 质点系的动量 [212] 动量定理 动量守恒 [213] 质点系的动能 柯尼西定理 [214] 力矩 [215] 刚体的静力平衡 [217] 角动量 [218] 角动量定理 角动量守恒 [219] 刚体的绕轴转动 转动惯量 [222] 平行轴定理与垂直轴定理 [224] 常见几何体的转动惯量 [225] 刚体的平面运动方程 [228] 浮力 [229]

第三章 振动与波动

振动的指数形式 [232] 受阻简谐振子 [233] 简谐振子受迫运动 [235] 平面波 [236] 一维波动方程 [239]

第四章 中心力场问题

万有引力 引力势能 [243] 无量纲的物理公式 [244] 球体的引力场 [246] 中心力场问题 [249] 开普勒问题 [252] 开普勒三定律 [255] 拉普拉斯—龙格—楞次矢量 [256] 轨道方程 比耐公式 [257] 开普勒第一定律的证明 [258] 开普勒第二和第三定律的证明 [260] 反开普勒问题 [261] 散射 [262] 卢瑟福散射 [263]

第三部分 计算物理

第一章 Matlab 及其他工具

计算物理导航 [266] Matlab 简介 [267] Matlab 的变量与矩阵 [270] Matlab 的判断与循环 [282] Matlab 的函数 [286] Matlab 画图 [290] Matlab 的程序调试及其他功能 [292]

第二章 数值验证及常用算法

二项式定理（非整数幂）的数值验证 [296] 二分法 [297] 多区间二分法 [298] 冒泡法 [301] Nelder-Mead 算法 [303] 最小二乘法的数值计算 [307] 数值积分（梯形法） [309]

第三章 微分方程

简谐振子受迫运动的简单数值计算 [312] 天体运动的简单数值计算 [313] 常微分方程（组）的数值解 [317] 中点法解常微分方程（组） [318] 四阶龙格库塔法 [321]

第四部分 其他分册预览

第一章 数学

堆放排列组合 [328] 选择的展开定理 [328] 中心极限定理 [329] 二维随机走动 [330] 狄拉克 δ 函数 [331] 雅可比行列式 [333] 高斯积分 [334] 多元泰勒展开 [335] Γ 函数 [335] 高斯分布（正态分布） [336] 拉格朗日乘数

法 [337] 多维球体的体积 [340] 矢量空间 [343] 代数矢量 [345] 矩阵与矢量空间 [348] 逆矩阵 [349] 酉矩阵 [350] 傅里叶变换（三角） [352] 傅里叶变换（指数） [352] 离散傅里叶变换 [353] 离散正弦变换 [360] 证明闭合曲面的法向量面积分为零 [361] 平均值的不确定度 [361] 超定线性方程组 [363] 海森矩阵 [364] 幂函数（复数） [364] 超几何函数 [365] 库仑函数 [366]

第二章 偏微分方程和特殊函数

一种 ∇ 算符的运算方法 [370] 柱坐标系中的拉普拉斯方程 [371] 球坐标系中的梯度散度旋度及拉普拉斯算符 [372] 球坐标系中的拉普拉斯方程 [373] 球坐标系中的亥姆霍兹方程 [375] 勒让德多项式的生成函数 [376] 贝赛尔函数 [376] 球贝塞尔函数 [378] 球谐函数 [379] 球面波的归一化 [380] 平面波的球谐展开 [382]

第三章 理论力学

拉格朗日方程 [385] 哈密顿原理 [391] 哈密顿正则方程 [392] 闭合轨道的条件 [394] 经典力学笔记 [395]

第四章 电动力学

电流 [400] 电荷守恒 电流连续性方程 [400] 电势 电势能 [401] 导体 [402] 电容 [404] 电场的能量 [406] LC 振荡电路 [407] 比奥萨伐尔定律 [407] 安培环路定理 [410] 洛伦兹力 [411] 磁场的能量 [412] 磁通量的定义 [413] 磁旋比 玻尔磁子 [414] 安培力 [414] 磁场中闭合电流的合力 [416] 磁场中闭合电流的力矩 [416] 电磁场的动量守恒 动量流密度张量 [418] 电场的高斯定理 [421] 法拉第电磁感应定律 [426] 电磁场的能量守恒 坡印廷矢量 [427] 麦克斯韦方程组（介质） [430] 非齐次亥姆霍兹方程 推迟势 [430] 电场波动方程 [433] 真空中的平面电磁波 [433] 介质中的波动方程 [434] 菲涅尔公式 [435] 盒中的电磁波 [436] 拉格朗日电磁势 [437]

第五章 量子力学

原子单位 [441] 电子轨道与元素周期表 [444] 玻尔原子模型 [446] 类氢原子的约化质量 [449] 康普顿散射 [450] 概率流密度 [450] 能量归一化 [452]

氢原子基态的波函数 [453] 算符对易与共同本征函数 [454] 算符的矩阵表示 [457] 无限深势阱 [460] 有限深球势阱 [462] 升降算符 [462] 简谐振子（升降算符） [463] 简谐振子升降算符归一化 [466] 简谐振子（级数） [466] 高斯波包 [467] 轨道角动量 [469] 轨道角动量升降算符归一化 [471] 自旋角动量 [472] 直积空间 [473] 角动量加法 [475] 球坐标和柱坐标中的径向方程 [476] 量子力学中的变分法 [478] 数值解一维薛定谔方程（试射法） [479] 氢原子的波函数 [480] 含时微扰理论 [481] 几种含时微扰 [484] 含连续态的微扰理论 [485] 量子散射 分波展开 [486] 波恩近似（散射） [488] 质心系中的多粒子问题 [490] 三维简谐振子（球坐标） [490] 库仑波函数 [492] 量子力学的基本假设 [494] 带电粒子的薛定谔方程 [495]

第六章 量子力学与量子场论

本章导航 [498] 基本概念 [498] 全同粒子的统计 [512] 近似理论：微扰 [515] 角动量 [521] 冷原子基本知识 [526] 两个原子间的相互作用 [534] Feshbach 共振 [542] BCS-BEC Crossover 的平均场描述 [544] BEC 超流 [548]

第七章 热学与统计力学

统计力学公式大全 [554] 分子平均碰撞数 [557] 相空间 [558] 理想气体的状态密度（相空间） [559] 理想气体单粒子能级密度 [560] 理想气体（微正则系综法） [560] 正则系综法 [561] 理想气体（正则系综法） [562] 理想气体（巨正则系综法） [565] 等间隔能级系统（正则系综） [567] 巨正则系综法 [568] 量子气体（单能级巨正则系综法） [570] 量子气体（巨正则系综） [571] 物理学常数定义 [572]

第五部分 小时物理笔记

第一章 摘选

电磁场角动量分解 [577] 晶体衍射 [578] Hartree-Fork 方法 [579] FEDVR 算法 [583] Lanczos 算法 [587] Crank-Nicolson TDSE 笔记 [592] FROG [594] Crank-Nicolson 算法（一维） [597] 虚时间法求基态波函数 [598] 函数求值 [598]

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
- $(a+b)^n$ 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. 把它们相加得 $C_n^i a^i b^{n-i}$. 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^[53] 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^[296].

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

三角恒等式

预备知识 三角函数

这里列出几个高中常见的三角函数恒等式，推导从略。以下用到的两个高中不常见的三角函数分别为 $\csc x = 1/\sin x$, $\sec x = 1/\cos x$, 分别读作 cosecant 和 secant

勾股定理

$$\sin^2 x + \cos^2 x = 1 \quad (1)$$

等式两边同除 $\cos^2 x$ 得

$$\tan^2 x + 1 = \sec^2 x \quad (2)$$

两角和公式

$$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y \quad (3)$$

$$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y \quad (4)$$

二倍角公式

令式 3 中 $y = x$ 取上号得

$$\sin 2x = 2 \sin x \cos x \quad (5)$$

$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x \quad (6)$$

降幂公式

结合式 6 和 $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$ 可以得到

$$\sin^2 x = \frac{1}{2}(1 - \cos 2x) \quad (7)$$

$$\cos^2 x = \frac{1}{2}(1 + \cos 2x) \quad (8)$$

和差化积公式

$$\sin x + \sin y = 2 \sin\left(\frac{x+y}{2}\right) \cos\left(\frac{x-y}{2}\right) \quad (9)$$

$$\sin x - \sin y = 2 \sin\left(\frac{x-y}{2}\right) \cos\left(\frac{x+y}{2}\right) \quad (10)$$

$$\cos x + \cos y = 2 \cos\left(\frac{x+y}{2}\right) \cos\left(\frac{x-y}{2}\right) \quad (11)$$

$$\cos x - \cos y = -2 \sin\left(\frac{x+y}{2}\right) \sin\left(\frac{x-y}{2}\right) \quad (12)$$

这里介绍一种推导方法可方便记忆。以式 11 为例, $\cos x, \cos y$ 和 $\cos x + \cos y$ 分别等于图 1 中矢量 \mathbf{A}, \mathbf{B} (令它们的模长为 1) 和 $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ 在水平方向的投影长度, 而 $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ 在水平方向的投影长度等为 $|\mathbf{A} + \mathbf{B}| \cos[(x+y)/2]$, 其中 $|\mathbf{A} + \mathbf{B}| = 2 \cos[(y-x)/2]$, 代入可得式 11. 利用 $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ 在竖直方向的投影可得式 9, 把式 9 和式 11 中的 y 分别替换成 $-y$ 和 $y + \pi$ 可推导出式 10 和式 12.

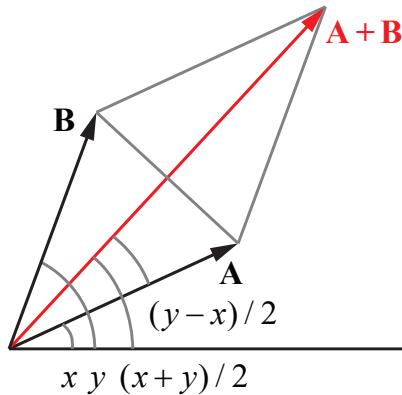


图 1: 和差化积公式推导

双曲函数

预备知识 指数函数

这里介绍三种双曲函数：双曲正弦函数，双曲余弦函数和双曲正切函数，他们的定义分别为

$$\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (1)$$

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad (2)$$

$$\tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (3)$$

其中 e 是一个高等数学中常见的常数，叫做自然对数底^[36]。这三个函数的图像如图 1。

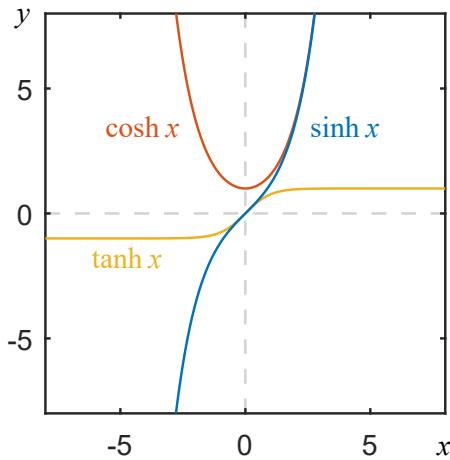


图 1: 三种双曲函数的图像

注意 $\sinh x$ 和 $\tanh x$ 是奇函数， $\cosh x$ 是偶函数。

例 1 反双曲正弦函数

要求 $\sinh x$ 的反函数，我们令

$$x = \sinh y = \frac{e^y - e^{-y}}{2} \quad (4)$$

整理成关于 e^y 的二次方程，得

$$(e^y)^2 - 2xe^y - 1 = 0 \quad (5)$$

解出 e^y 为

$$e^y = x \pm \sqrt{x^2 + 1} \quad (6)$$

由于 $e^y > 0$, 上式取正号. 两边取自然对数, 得

$$y = \sinh^{-1} x = \ln\left(x + \sqrt{x^2 + 1}\right) \quad (7)$$

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 : 四边形 $ABCD$ 是一个正方形.

命题 B : 四边形 $ABCD$ 的四条边相等.

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 可以得出四边形任意两条临边垂直. 这些多出来的信息并不一定是得到 B 所必须的, 因为还有许多其他的四边形四条边相等但并不是正方形.

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 (四条边不全相等的四边形一定不是正方形). 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。以上两个例子中的前提如：我们讨论的是欧几里得几何中的平面四边形和三角形。
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

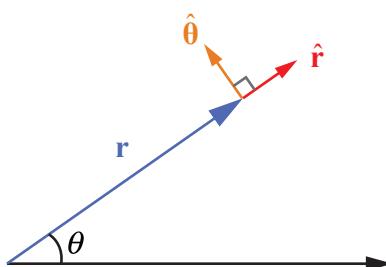


图 1: 极坐标系和两个单位矢量

在平面上取一个点作为原点，过原点作一条轴称为极轴，并选定极轴的正方向，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 ρ ）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。 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。

为了表示一个坐标对应的单位矢量，我们一般把坐标变量名记为粗体并在上方加一个标记。例如直角坐标系中， $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ （有时也记为 $\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$ ）代表 x, y, z 轴方向的单位矢量。在极坐标中，定义 $\hat{\mathbf{r}}$ 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 $\hat{\mathbf{r}}$ 逆时针旋转 $\pi/2$ 的方向）。 $\hat{\mathbf{r}}$ 与 $\hat{\theta}$ 互相垂直，构成一对单位正交基底，平面上的任意矢量都可以正交分解到这两个方向上。我们通常把 $\hat{\mathbf{r}}$ 的方向叫做径向，把 $\hat{\theta}$ 的方向叫做法向。要注意极坐标中的两个单位矢量是 θ 的函数，对于不同的 θ ，它们的方向也不同。

习题 1

试证明极坐标方程 $r = r_0 / \cos(\theta - \theta_0)$ 和 $r = 2R \cos(\theta - \theta_0)$ 分别表示一条直线和一个圆。

与直角坐标的转换

要在极坐标系的基础上建立一个直角坐标系，习惯的做法是取原点相同，且令 x 轴与极轴重合， y 轴取 $\theta = \pi/2$ 的方向。这样将 \mathbf{r} 用 $\hat{\mathbf{x}}$ 和 $\hat{\mathbf{y}}$ 展开，就得到

$$\mathbf{r} = r \cos \theta \hat{\mathbf{x}} + r \sin \theta \hat{\mathbf{y}} \quad (1)$$

即

$$\begin{cases} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \end{cases} \quad (2)$$

这样就从极坐标转换成为直角坐标。

要从直角坐标转换为极坐标，首先由勾股定理有 $r^2 = x^2 + y^2$ 。使用反正切函数，我们可以表示 $x > 0$ 或 $\theta \in (-\pi/2, \pi/2)$ 时的 θ ，即 $\theta = \arctan(y/x)$ 。为了表示任意情况，本书定义一个值域为 $(-\pi, \pi]$ 的新函数 $\text{Arctan}(y, x)$ ，可以把直角坐标中除原点外的任意一点对应的极角表示出来。这个函数可以用 \arctan

函数定义如下

$$\text{Arctan}(y, x) \equiv \begin{cases} \arctan(y/x) & (x > 0) \\ \arctan(y/x) + \pi & (x < 0, y \geq 0) \\ \arctan(y/x) - \pi & (x < 0, y < 0) \\ \pi/2 & (x = 0, y > 0) \\ -\pi/2 & (x = 0, y < 0) \\ \text{无定义} & (x = 0, y = 0) \end{cases} \quad (3)$$

这样，从直角坐标转到极坐标的转换就可以表示为

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \theta = \text{Arctan}(y, x) \end{cases} \quad (4)$$

柱坐标系

预备知识 极坐标系^[9]

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。柱坐标系相当于在极坐标系的基础上增加了一个垂直轴。

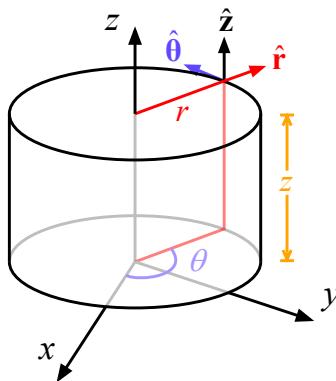


图 1: 定义柱坐标系

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. 其中 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}$ 与极坐标系中的定义相同, $\hat{\mathbf{z}}$ 是直角坐标系 z 轴的单位矢量, 注意三个单位矢量两两垂直, 构成一组单位正交基底, 任何矢量可以在这组基底上展开. 再次强调, 与直角坐标系不同的是, $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}$ 并不是常矢量, 而是坐标 θ 的函数.

柱坐标与直角坐标间的转换类比式 2^[9] 和式 4^[9] 即可

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

球坐标系

预备知识 位矢^[166], 矢量的叉乘^[99]

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^[166] 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.

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 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}, \hat{\phi}$ (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

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

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 $\hat{\mathbf{r}}(\theta, \phi)$, $\hat{\theta}(\theta, \phi)$, $\hat{\phi}(\phi)$. 例如 P 的球坐标为 $(1, \pi/2, 0)$, 直角坐标为

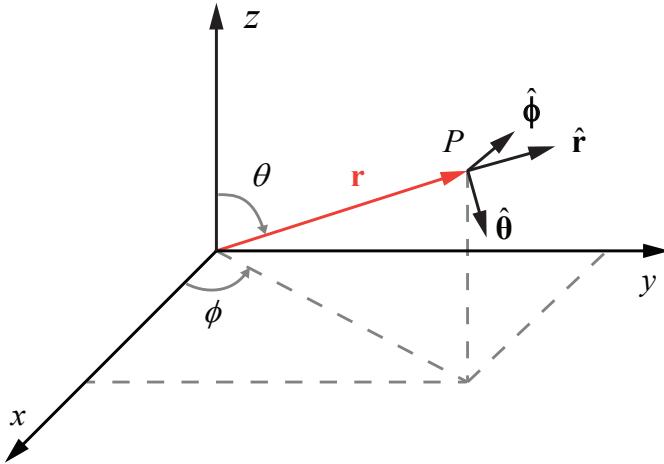


图 1: 球坐标系

$(1, 0, 0)$ 时, $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\theta} = -\hat{\mathbf{z}}$, $\hat{\phi} = \hat{\mathbf{y}}$. 但是球坐标为 $(1, \pi/2, \pi/2)$, 直角坐标为 $(0, 1, 0)$ 时, $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{y}}$, $\hat{\theta} = -\hat{\mathbf{z}}$, $\hat{\phi} = -\hat{\mathbf{x}}$. 一般地, 对于球坐标为 (r, θ, ϕ) 的点 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}, \hat{\phi}$ 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^[14]. 另外注意改变 r 时 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}, \hat{\phi}$ 都保持不变, 且 $\hat{\phi}(\phi)$ 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 $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\theta} = \hat{\phi}$ (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^[99]). 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^[166] 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

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

两方向的夹角

预备知识 点乘^[94]

若已知球坐标系中两个方向分别为 $(1, \theta_1, \phi_1)$ 和 $(1, \theta_2, \phi_2)$ 如何求它们之间的夹角 α 呢？我们可以先计算两个单位矢量的直角坐标，然后对它们进行点乘即可得到两矢量夹角的余弦值。由，两矢量的直角坐标分别为

$$(\cos \theta_1 \cos \phi_1, \cos \theta_1 \sin \phi_1, \sin \theta_1) \quad (\cos \theta_2 \cos \phi_2, \cos \theta_2 \sin \phi_2, \sin \theta_2) \quad (3)$$

利用三角恒等式，得

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \cos \theta_1 \cos \phi_1 \cos \theta_2 \cos \phi_2 + \cos \theta_1 \sin \phi_1 \cos \theta_2 \sin \phi_2 + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \\ &= \cos \theta_1 \cos \theta_2 (\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \sin \phi_1 \sin \phi_2) + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \\ &= \cos \theta_1 \cos \theta_2 \cos(\phi_2 - \phi_1) + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \end{aligned} \quad (4)$$

球坐标与直角坐标的转换

预备知识 球坐标系的定义^[12]

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 $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$, 这就得到了式 1.

在直角坐标系中, 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^[9]

结论

圆锥曲线的极坐标方程为

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

其中 e 是离心率, p 是半通径.

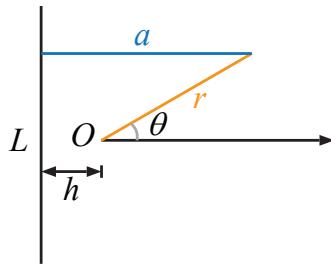


图 1: 由离心率定义圆锥曲线

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 r , 到 L 的（垂直）距离为 a , 令常数 $e > 0$, 则所有满足

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

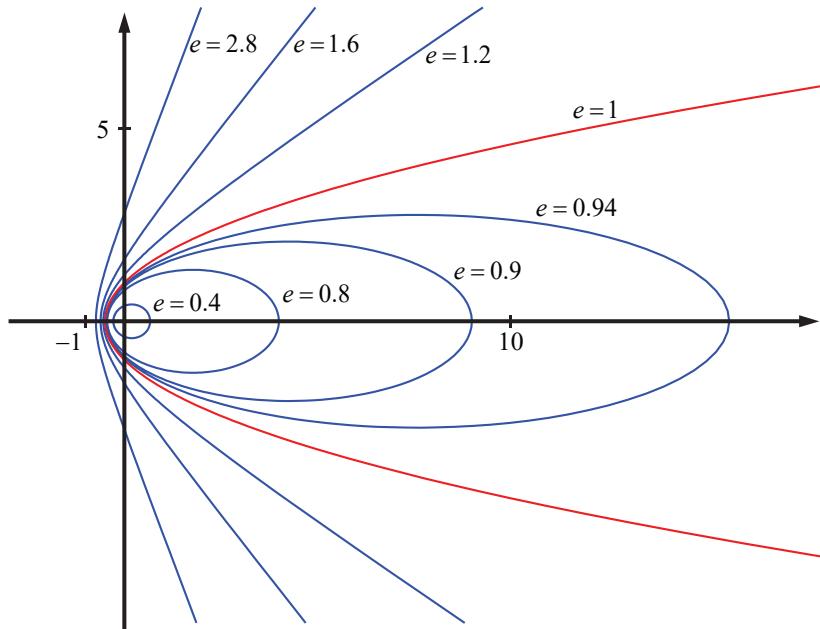
的点组成的曲线就是圆锥曲线. e 是常数, 叫做离心率, O 是焦点, L 是准线. 当 $0 < e < 1$ 时, 曲线是椭圆, $e = 1$ 时是抛物线, $e > 1$ 时是双曲线.

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

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

变形, 得

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

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 $r(\pi/2) = p$. 代入式 4 得 $p = eh$. 所以式 4 又可以写为

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

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.

式 5 中一种比较特殊的情况是当圆锥曲线为双曲线 ($e > 1$) 且 $1 - e \cos \theta < 0$ 时 r 取负值, 会产生双曲线的左半支 (即离焦点较远的一支, 图中未画出). 左半支上的任意一点同样满足式 2. 若只需要在极坐标中表示较远的一支, 我们可以将式 5 中的 r 替换为 $-r$, θ 替换为 $\theta + \pi$, 这样, 就得到了这支双曲线的正常极坐标方程 ($r > 0$)

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

椭圆的三种定义

预备知识 圆锥曲线的极坐标方程^[15]

第二种定义

我们已经知道用焦点和准线如何定义椭圆，但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，且令 x 轴指向另一个焦点，则有

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad \cos \theta = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (1)$$

代入椭圆的极坐标方程式 1^[15] 得

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

两边平方并整理得

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

由此可见，如果我们把椭圆左移 $ep/(1 - e^2)$ ，椭圆将具有

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

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

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

式 3 和式 4 对比系数得

$$a = \frac{p}{1 - e^2} \quad b = \frac{p}{\sqrt{1 - e^2}} \quad (6)$$

以上两式可以将椭圆的极坐标方程转为直角坐标方程。另外易证

$$a^2 = b^2 + c^2 \quad (7)$$

若要从直角坐标方程变回极坐标方程，将式 5 式 6 逆转得

$$e = \frac{c}{a} \quad p = \frac{b^2}{a} \quad (8)$$

第三种定义

椭圆的第三种定义是，椭圆上任意一点到两焦点的距离之和等于 $2a$. 现在我们来证明前两种定义下的椭圆满足这个条件. 由直角坐标方程可知对称性，可在椭圆的两边做两条准线，令椭圆上任意一点到两焦点的距离分别为 r_1 和 r_2 ，到两准线的距离分别为 d_1 和 d_2 ，则有

$$e = \frac{r_1}{d_1} = \frac{r_2}{d_2} = \frac{r_1 + r_2}{d_1 + d_2} \quad (9)$$

所以

$$r_1 + r_2 = e(d_1 + d_2) = 2e(c + h) = 2\frac{c}{a}\left(c + \frac{b^2}{c}\right) = 2a \quad (10)$$

证毕.

双曲线的三种定义

预备知识 圆锥曲线的极坐标方程^[15]

第二种定义

我们已经知道用焦点和准线如何定义双曲线，双曲线的极坐标方程为 ($e > 1$)

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

以与极坐标系相同的原点建立直角坐标系，要把以上方程变到直角坐标系中，将 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\cos \theta = x / \sqrt{x^2 + y^2}$ 代入得

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

两边平方且化简得

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

把双曲线沿 x 轴正方向移动 c ，可得以下形式

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

这就是双曲线的第二种定义，从上式容易看出，双曲线的两支是左右对称的。以上两式对比系数得

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

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

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。

第三种定义

双曲线的另一种定义是，曲线上任意一点到两个焦点距离之差等于 $2a$ 。这里证明前两种定义满足该性质。由对称性，我们不妨只考虑右支上的某点，令其到右焦点和右准线的距离分别为 r_1 和 d_1 ，到左焦点和左准线的距离分别为 r_2 和 d_2 。由离心率的定义，有

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

由于两准线之间的距离恒为 $2a^2/c$ ，上式变为

$$r_2 - r_1 = e(d_2 - d_1) = 2a \quad (9)$$

证毕。

渐近线

当 x, y 都无穷大时，式 4 中的 1 可以忽略不计，有 $y/x = \pm b/a$ ，渐近线与 x 轴夹角为

$$\theta_0 = \arctan(b/a) \quad (10)$$

两条渐近线到两个焦点的距离都为

$$c \sin \theta_0 = c \cdot b/c = b \quad (11)$$

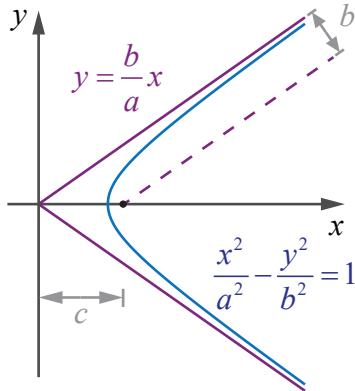


图 1: 双曲线的渐近线

事实上这么推导渐近线并不严谨，在学习了高数的相关内容（见“泰勒展开^[53]”）后，由式 4 得

$$y = \frac{bx}{a} \sqrt{1 - \frac{a^2}{x^2}} \quad (12)$$

把根号部分关于 a^2/x^2 进行泰勒展开，有

$$y = \frac{b}{a}x - \frac{ab}{2x} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x^3}\right) \quad (13)$$

所以当 $x \rightarrow \infty$ 时，就有渐进线 $y = bx/a$. 之所以要这样做，是为了防止式 13 右边出现常数项. 如果存在常数项 λ ，那么双曲线的渐近线就是 $y = bx/a + \lambda$ 了.

抛物线的三种定义

预备知识 圆锥曲线的极坐标方程^[15]

第二种定义

我们已经知道用焦点和准线如何定义抛物线，抛物线的极坐标方程为

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

以与极坐标系相同的原点建立直角坐标系，要把以上方程变到直角坐标系中，将 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\cos \theta = x / \sqrt{x^2 + y^2}$ 代入得

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

两边平方并化简得到

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

把双曲线沿 x 轴正方向移动 $p/2$, 可得标准抛物线方程

$$y^2 = 2px \quad (4)$$

所以抛物线的焦距为 $f = p/2$. 与椭圆和双曲线不同的是，所有的抛物线的形状都相似（形状相同，大小不同），这是因为抛物线有固定的离心率（离心率决定圆锥曲线的形状，焦距或准线决定大小）.

第三种定义

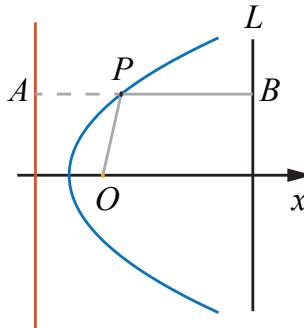


图 1: 抛物线的第三种定义

在 x 轴正半轴作一条与准线平行的直线 L , 则抛物线上一点 P 到其焦点的距离 r 与 P 到 L 的距离之和不变.

如图 1, 要证明由焦点和准线定义的抛物线满足该性质, 只需过点 P 作从准线到直线 L 的垂线段 AB , 由于 r 等于线段 PA 的长度, 所以 r 加上 PB 的长度等于 AB 的长度, 与 P 的位置无关. 证毕.

预备知识 几何矢量^[90], 三角恒等式^[5]

我们首先定义虚数单位 i 满足 $i^2 = -1$, 则任何一个复数 z 可以表示为¹

$$z = x + iy \quad (1)$$

其中 x, y 为任意实数, 分别被称为复数 z 的实部 (real part) 和虚部 (imaginary part), 记为 $\text{Re}[z]$ 和 $\text{Im}[z]$.

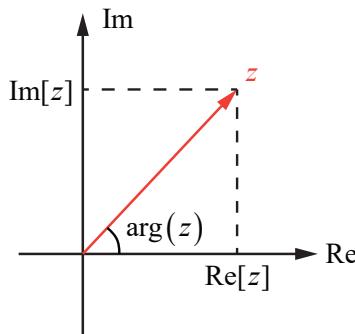


图 1: 复平面与复数

如图 1, 一个复数可以看做复平面上的一个点 (或矢量), 该矢量在复平面的实轴和虚轴方向的分量分别等于其实部和虚部. 复数的模长定义为对应矢量的模长, 即

$$|z| = \sqrt{\text{Re}[z]^2 + \text{Im}[z]^2} \quad (2)$$

另外我们把矢量与实轴的夹角称为幅角, 记为 $\arg(z)$. 我们可以通过实部和虚部计算幅角

$$\arg(z) = \arctan(\text{Im}[z]/\text{Re}[z]) \quad (3)$$

也可以通过模长和幅角来计算实部与虚部

$$\text{Re}[z] = |z| \cos(\arg z) \quad \text{Im}[z] = |z| \sin(\arg z) \quad (4)$$

在“指数函数 (复数)^[27]”中我们将看到, 任意复数也可以通过欧拉公式表示为以下形式

$$z = A(\cos \theta + i \sin \theta) = Ae^{i\theta} \quad (5)$$

其中 $A = |z|$, $\theta = \arg z$.

¹为了与变量 i 区分, 本书中虚数单位使用正体的 i .

基本运算

共轭

一个复数的共轭等于一个实部相同，虚部相反的复数

$$z^* = \operatorname{Re}[z] - i \operatorname{Im}[z] \quad (6)$$

所以共轭运算不改变复数的模长，但将其幅角变为相反数.

加和减

复数的加减就是把两个复数的实部与虚部分别相加减（为了书写方便，这里把复数 z_i 的实部虚部记为 x_i, y_i ）

$$z_1 \pm z_2 = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2) \quad (7)$$

在复平面上，这相当于把两个复数对应的矢量进行矢量相加减. 显然，复数的加法满足交换律，分配律和结合律.

特殊地，将一个复数与其复共轭加减可得

$$\operatorname{Re}[z] = \frac{1}{2}(z + z^*) \quad \operatorname{Im}[z] = \frac{1}{2}(z - z^*) \quad (8)$$

乘法

两个复数相乘定义为（注意应用 $i^2 = -1$ ）

$$z_1 z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + x_2 y_1) \quad (9)$$

可以证明复数相乘后，乘积的模长等于两复数模长之积，乘积的幅角等于两复数的幅角之和，即

$$|z_1 z_2| = |z_1| |z_2| \quad (10)$$

$$\arg(z_1 z_2) = \arg(z_1) + \arg(z_2) \quad (11)$$

证明如下：令 $A_i = |z_i|$, $\theta_i = \arg z_i$, 则

$$\begin{aligned} z_1 z_2 &= (A_1 \cos \theta_1 + i A_1 \sin \theta_1)(A_2 \cos \theta_2 + i A_2 \sin \theta_2) \\ &= A_1 A_2 (\cos \theta_1 \cos \theta_2 - \sin \theta_1 \sin \theta_2) + i A_1 A_2 (\cos \theta_1 \sin \theta_2 + \cos \theta_2 \sin \theta_1) \\ &= A_1 A_2 [\cos(\theta_1 + \theta_2) + i \sin(\theta_1 + \theta_2)] \end{aligned} \quad (12)$$

其中最后一步用到了两角和公式式 3^[5]. 容易看出，最后得到的是一个模长为 $A_1 A_2$, 幅角为 $\theta_1 + \theta_2$ 的复数.

不难证明复数的乘法满足交换律和结合律.

特殊地，一个复数乘以其复共轭可得其模长的平方.

$$zz^* = x^2 + y^2 = |z|^2 \quad (13)$$

除法

令 $z_1 = zz_2$, 则两个复数相除可以记为

$$z = \frac{z_1}{z_2} = \frac{x_1 + iy_1}{x_2 + iy_2} \quad (14)$$

但我们可以将结果的实部与虚部分开，于是我们可以在等式两边同时乘以 z_2^* , 即 $z_1 z_2^* = zz_2 z_2^*$, 或

$$z = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{(x_1 + iy_1)(x_2 - iy_2)}{(x_2 + iy_2)(x_2 - iy_2)} = \frac{x_1 x_2 + y_1 y_2}{x_2^2 + y_2^2} + i \frac{x_2 y_1 - x_1 y_2}{x_2^2 + y_2^2} \quad (15)$$

这个步骤叫做分母有理化.

复变函数

预备知识 复数^[22]

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 $w = e^z = e^x \cos y + i e^x \sin y$ 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^[22], 三角恒等式^[5], 导数^[38]

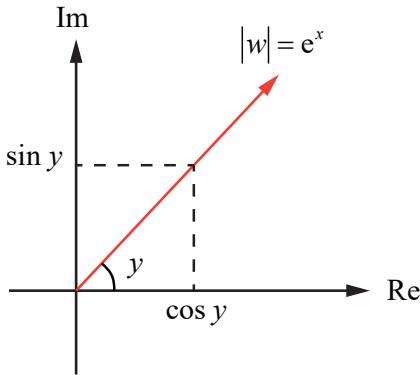


图 1: 复数域中的指数函数

复数域中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, 如图 1

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

当指数为纯虚数时, 式 1 变为著名的欧拉公式

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad (3)$$

虽然这里的 x 一般是实数 (物理中应用得最多的情况), 但根据复数域三角函数的定义^[28], 对于任何复数 z , 都有欧拉公式

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

将 “三角函数 (复数)^[27]” 中的式 1 和式 2 代入即可证明.

根据式 1 的定义结合两角和公式 (式 3^[5]), 容易证明 e^z 同样满足

$$e^{z_1+z_2} = e^{z_1}e^{z_2} \quad (5)$$

虽然我们还没有系统地学习复变函数求导的概念，但我们可以根据式3求出一个物理中常见的导数公式

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}e^{iax} &= -a \sin(ax) + ia \cos(ax) \\ &= ia[\cos(ax) + i \sin(ax)] \\ &= iae^{iax}\end{aligned}\tag{6}$$

进一步拓展，令复常数 $z = a + ib$ 得

$$\frac{d}{dx}e^{zx} = \frac{d}{dx}(e^{ax}e^{ibx}) = (a + ib)e^{(a+ib)x} = ze^{zx}\tag{7}$$

可见 e^z 的许多性质与实数域的 e^x 类似.

三角函数（复数）

预备知识 指数函数（复数）[\[27\]](#)

定义

复数域的正弦函数为

$$\sin z = \frac{e^{iz} - e^{-iz}}{2i}\tag{1}$$

复数域的余弦函数为

$$\cos z = \frac{e^{iz} + e^{-iz}}{2}\tag{2}$$

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（暂不介绍解析的概念）。

与实数函数的“兼容性”

“兼容性”在这里指若将一个复变函数的自变量取实数，那么结果与使用同名的实数函数相同。例如将式1中的复数 z 取实数 x ，得

$$\sin z = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}\tag{3}$$

根据欧拉公式^[27],

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

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

代入得

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

同理可证 $\cos z = \cos x$. 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

$$\sin(z_1 + z_2) = \sin z_1 \cos z_2 + \cos z_1 \sin z_2 \quad (7)$$

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

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

$$\sin z = \sin(x + iy) = \sin x \cos iy + \cos x \sin iy \quad (9)$$

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

其中

$$\cos(iy) = \frac{e^{-y} + e^y}{2} = \cosh y \quad (11)$$

$$\sin(iy) = \frac{e^{-y} - e^y}{2i} = i \frac{e^y - e^{-y}}{2} = i \sinh y \quad (12)$$

代入得

$$\sin z = \sin(x + iy) = \sin x \cosh y + i \cos x \sinh y \quad (13)$$

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

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).

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，微分方程和无穷级数。

本章介绍后面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

极限^[32]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^[38]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^[172]。学习了矢量求导^[130]以后，就不必再使用这种不成熟的“几何微元法”，而是直接按照矢量求导法则^[172]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。

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。

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^[67]。

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^[187]（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）来描述的。

极限

数列的极限

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 π 的前 n 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 , 它们的“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.

数列极限的定义: 对于任意给定的 ε (无论它有多么小), 总存在 N , 当 $n > N$ 时, 就有 $|a_n - A| < \varepsilon$ (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 $\forall \varepsilon$, $\exists N$, 当 $n > N$ 时, 有 $|a_n - A| < \varepsilon$ ”.

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 $\varepsilon = 10^{-3}$), 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 $\varepsilon = b \times 10^{-q}$ ($b > 1$), 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 $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \pi$.

函数的极限

类比数列的极限，我们也可以定义函数在正无穷的极限 $\lim_{x \rightarrow +\infty} f(x) = A$ ，即“对 $\forall \varepsilon, \exists X$ ，当 $x > X$ 时，有 $|f(x) - A| < \varepsilon$ ”。

与数列不同的是，对于函数我们还可以定义函数在负无穷的极限 $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x)$ （把以上定义的 $>$ 号改成 $<$ 号即可）。

另外可以定义 $f(x)$ 在 x_0 处的极限 A ，即“对 $\forall \varepsilon, \exists \delta$ ，当 $|x - x_0| < \delta$ 时，有 $|f(x) - A| < \varepsilon$ ”。

例 2

求函数在某个值处的极限时，通常可以直接代入数值计算，如

$$\lim_{x \rightarrow 1} 2x + 1 = 3 \quad \lim_{x \rightarrow 2} \frac{x+1}{x+2} = \frac{3}{4} \quad (3)$$

当无穷大与常数相加时，可以忽略常数，如

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{x+1}{2x+2} = \lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{x}{2x} = \frac{1}{2} \quad (4)$$

无穷小的阶

如果令 $x \rightarrow 0$ ，我们就说 x 是无穷小。但一些无穷小会更快地趋近于 0，若 x 的某个函数 $\alpha(x)$ 满足

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\alpha(x)}{x} = 0 \quad (5)$$

那 $\alpha(x)$ 就是 x 的高阶无穷小。若

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\alpha(x)}{x^n} \neq 0 \quad (6)$$

则称 $\alpha(x)$ 为 x 的 n 阶无穷小。例如， cx^n （ c 为常数）就是 x 的 n 阶无穷小，记为 $\mathcal{O}(x^n)$ 。

在求极限时，若高阶无穷小与低阶无穷小相加，通常可以忽略高阶无穷小。另外由定义不难推出

$$\mathcal{O}(x^n)x^m = \mathcal{O}(x^{n+m}) \quad (m > -n) \quad (7)$$

在物理中，当我们用一个函数 $g(x)$ 来近似另一个函数 $f(x)$ 并记为 $f(x) = g(x) + \mathcal{O}(h^{n+1})$ 时（这里 x 是函数的自变量， h 是函数表达式中一个较小的常数），就说 $g(x)$ 精确到 $\mathcal{O}(h^n)$ 。

小角正弦极限

预备知识 极限^[32]

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）。

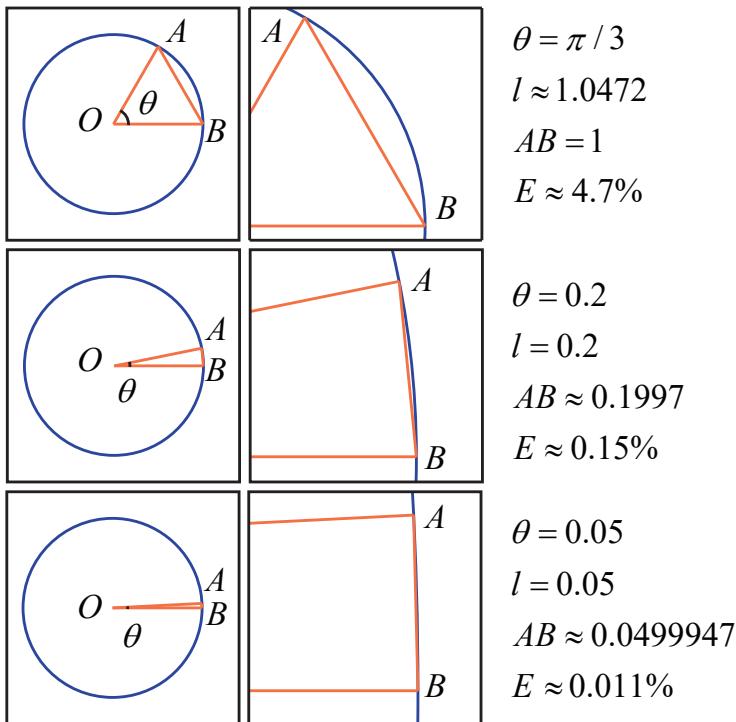


图 1：单位圆中，随着角度不断减小，弧长与线段长度的相对误差也不断减小

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^[32] 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^[32]

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^[32]

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

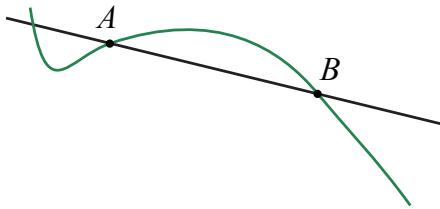


图 1: 割线

点靠近，割线的位置逐渐趋于不变，割线位置的极限^[32] 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。

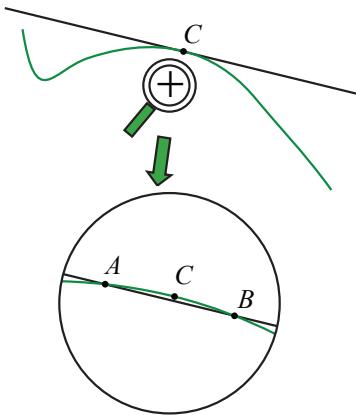


图 2: 割线的极限是切线

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，而不要求它们谁更趋近。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^[32]

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^[37]。

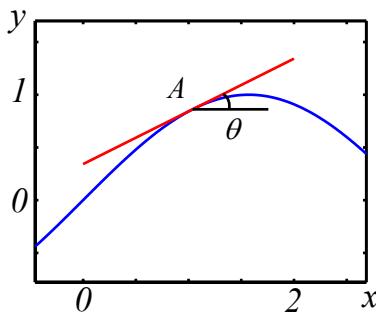


图 1: 点 A 的切线

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 的某一开区间内的每一点都可导，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）

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

在物理中，常常在物理量上方加一点表示对时间求导（注意仅限于对时间求导），例如 $\dot{f}(t) = df(t)/dt$ 。

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。

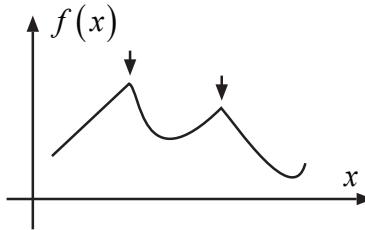


图 2: 棱角处不可导

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），竖直边的边长为 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 。

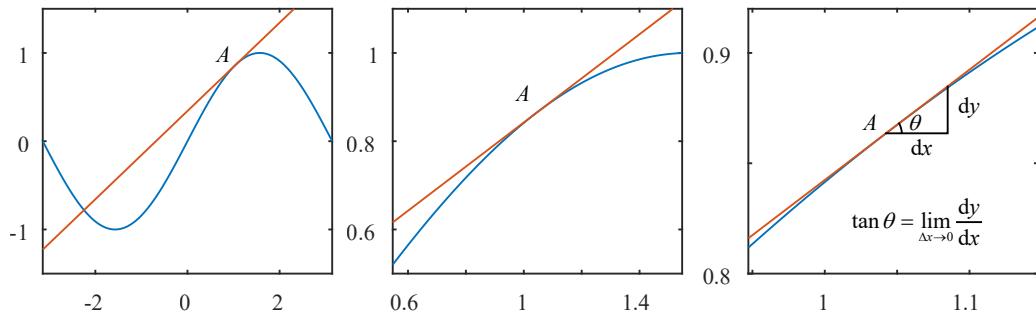


图 3: 将切点放大，会发现切线和曲线在切点附近“重合”

由上面的讨论可得，当 x 增加一小段 Δx 时， y 轴的增量约为 $\Delta y \approx f'(x)\Delta x$ ，且当 Δx 越小，这条式子就越精确成立，记为 $dy = f'(x)dx$ 。这个关系就叫函数的微分。

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^[32]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，它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^[43]，求导法则，高阶导数

求导法则

预备知识 导数^[38]，基本初等函数的导数^[43]

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）[\[51\]](#)”

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

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

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

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

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[\[38\]](#)得

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

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^[38]

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

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

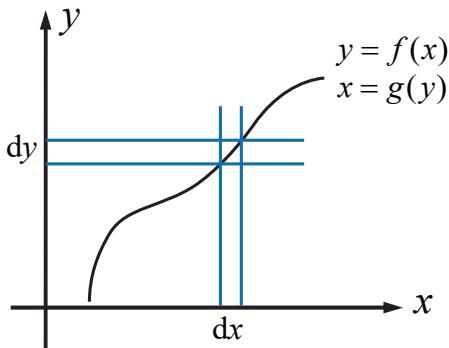


图 1: 在同一点处, $f' = \frac{dy}{dx}$, $g' = \frac{dx}{dy}$, 互为倒数

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.

基本初等函数的导数

预备知识 导数^[38]

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

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

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^[35] 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^[40], 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^[42]

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

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^[40], $(a^x)' = (\ln a)a^x$

导数与函数极值

预备知识 导数^[38]

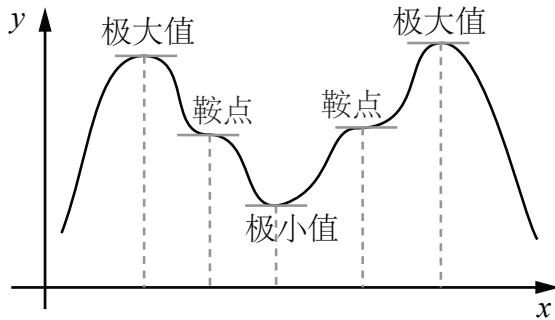


图 1: 导数为零的三种点

如图 1, 若一个一元函数 $y = f(x)$ 在某区间内处处可导 (即对区间内的任何 x 导数 $f'(x)$ 都存在), 若区间内存在某些 x_i 能使 $f'(x_i) = 0$ (即在这些点处函数曲线的斜率为零), 这样的点被称为驻点.

而从函数曲线来看, 驻点又分为三类: 极大值, 极小值, 鞍点. 我们以 x_i 为中心取一个小区间, 如果这个区间足够小, 那么容易看出对于极大值点, $f'(x)$ 在小区间内递减, 对于鞍点, $f'(x)$ 在小区间内恒为非负或恒为非正, 对于极小值点, $f'(x)$ 在小区间内递增. 所以为了判断驻点的类型, 我们可以在驻点处求函数的二阶导数 $f''(x_i)$. 假设二阶偏导存在, 如果 $f''(x_i) < 0$, 那么 x_i 是极大值点, 如果 $f''(x_i) = 0$, 则 x_i 是鞍点, 如果 $f''(x_i) > 0$, x_i 是极小值点.

另外, 若某个极小值点是整个考察区间中函数值最小的点, 它就被称为最小值点, 若某个极大值点是该区间中函数值最大的点, 它就被称为最大值点.

例 1

二次函数 $f(x) = ax^2 + bx + c$ 的导函数为 $f'(x) = 2ax + b$, 所以唯一的驻点为 $-b/(2a)$. 函数的二阶导数是一个常数 $f''(x) = 2a$, 所以当 $a > 0$ 时驻点是唯一的极小值点, 即最小值点. 同理, 当 $a < 0$ 时驻点是最大值点.

例 2

函数 $f(x) = x + a/x$ ($a > 0$) 的一阶导函数为 $f'(x) = 1 - a/x^2$, 若我们只

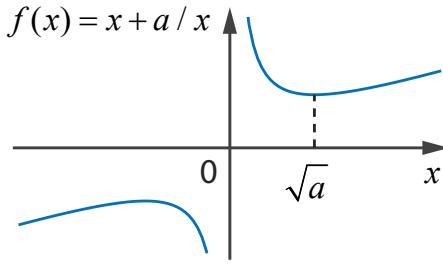


图 2: 例 2 函数图

考察区间 $(0, +\infty)$, 唯一的驻点为 $x = \sqrt{a}$. 函数的二阶导函数 $f''(x) = 2a/x^3$ 在驻点处的值为 $2/\sqrt{a} > 0$, 所以该驻点为当前区间的最小值点 (图 2).

例 3

函数 $f(x) = x^3$ 的一阶导函数为 $f'(x) = 3x^2$, 唯一的驻点为 $x = 0$. 函数的二阶导函数 $f''(x) = 6x$ 在驻点处的值为 0, 所以该驻点是一个鞍点.

用极值点确定函数图像

预备知识 导数与函数的极值^[47]

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

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

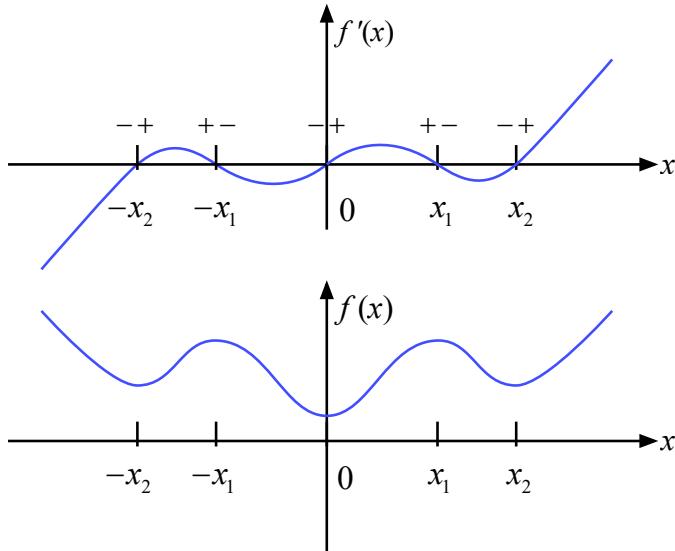
先对函数求导, 得

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

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 ,

图 1: 导数 $f'(x)$ 与原函数 $f(x)$

$x_1 < x_2$. 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^[38]

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 $\mathrm{d}x$, 函数值会相应增加无穷小量 $\mathrm{d}y$. 根据导数的定义^[38] $f'(x) = \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}$, 我们将 $\mathrm{d}y$ 与 $\mathrm{d}x$ 的关系记为

$$\mathrm{d}y = f'(x) \mathrm{d}x \quad (1)$$

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 $\mathrm{d}x \rightarrow 0$ 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。

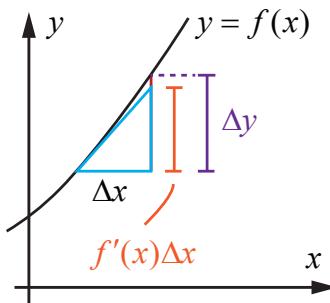


图 1: 微分近似用函数曲线的切线增量 $f'(x)\Delta x$ 来近似函数增量 Δy

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

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

例 2 细圆环的面积和薄球壳的体积

圆的面积关于其半径的函数为 $A(r) = \pi r^2$ ，对该式进行微分得 $\mathrm{d}A = 2\pi r \mathrm{d}r$ 。注意到 $2\pi r$ 为 r 对应的周长，所以该微分式的意义就是，半径为 r ，宽度为 $\mathrm{d}r$ 的圆环的面积等于该圆环的周长乘以圆环的宽度。

球的体积关于其半径的函数为 $V(r) = 4\pi r^3/3$ ，求微分得 $\mathrm{d}V = 4\pi r^2 \mathrm{d}r$ 。注意到 $4\pi r^2$ 为 r 对应的球表面积，所以该微分式的意义是，半径为 r ，厚度为 $\mathrm{d}r$ 的球壳的体积等于该球壳的表面积乘以球壳厚度。

复合函数求导（链式法则）

预备知识 微分^[49]

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^[49]

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

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^[43],

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

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

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

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.

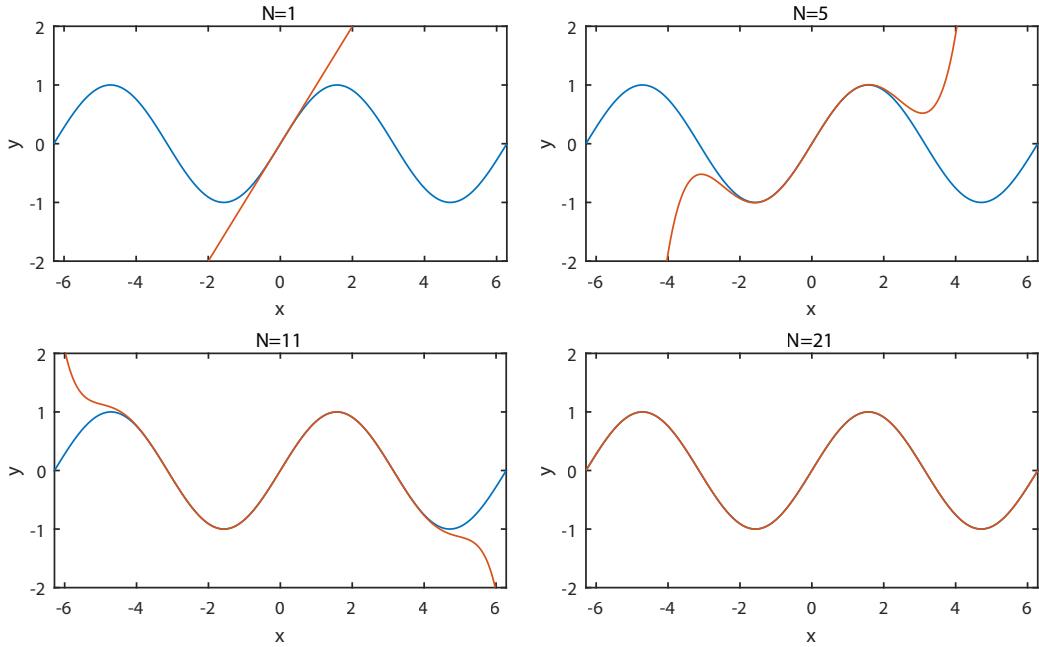


图 1: $\sin x$ 在原点处的泰勒展开的前 N 项求和. 容易看出, 求和的项数越多, 多项式 (橙) 与 $\sin x$ (蓝) 吻合得越好.

系数公式的推导

我们假设当项数 $N \rightarrow \infty$ 时, 存在唯一的多项式在某区间内处处趋于无穷可导函数 $f(x)$ ⁸, 即

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x - x_0)^n \quad (4)$$

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

$$f'(x_0) = c_1 + \sum_{n=2}^{\infty} n c_n (x - x_0)^{n-1} \Big|_{x=x_0} = c_1 \quad (5)$$

如果对式 4 两边在 x_0 处求二阶导数, 得

$$f''(x_0) = 2c_2 + \sum_{n=3}^{\infty} n(n-1)c_n (x - x_0)^{n-2} \Big|_{x=x_0} = 2c_2 \quad (6)$$

⁸这叫做多项式的完备性, 本书不证明.

即 $c_2 = f''(x_0)/2!$. 以此类推, 如果对式 4 两边在 x_0 处求 m 阶导数得

$$f^{(m)}(x_0) = m!c_m + \sum_{n=m+1}^{\infty} \frac{n!}{(n-m)!} c_n (x - x_0)^{n-m} \Big|_{x=x_0} = m!c_m \quad (7)$$

所以系数公式为

$$c_m = \frac{1}{m!} f^{(m)}(x_0) \quad (8)$$

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

$$\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 \dots \quad (9)$$

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \frac{1}{6!}x^6 \dots \quad (10)$$

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 \dots \quad (11)$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}x^3 - \frac{1}{4}x^4 \dots \quad (12)$$

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

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3 \dots \quad (14)$$

泰勒展开与近似

事实上, 泰勒展开可以看成是微分近似^[49] 的一种高阶拓展. 微分近似中, 在某点 x_0 附近有

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) \quad (15)$$

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. 如果我们将 $f(x)$ 近似到其泰勒展开的 x^n 项, 我们称这个近似精确到第 n 阶, 因为它的误差小于或等于 $n + 1$ 阶无穷小^[32] $\mathcal{O}(x^{n+1})$.

导数与差分

预备知识 泰勒展开^[53]

我们在导数的定义^[38] 中已经知道⁹

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + h/2) - f(x - h/2)}{h} \quad (1)$$

在一些应用（如数值计算）中，我们只能把 h 取一个很小的数值（如 10^{-10} ）而并非无穷小，这就需要我们估计用上式右边的差分来代替 $f'(x)$ 有多精确。为了估算误差，我们可以将 $f(x \pm h/2)$ 展开为关于 h 的泰勒级数

$$f(x \pm h/2) = f(x) \pm f'(x) \frac{h}{2} + \frac{1}{2} f''(x) \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \mathcal{O}(h^3) \quad (2)$$

代入式 1 得

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(x)h + \mathcal{O}(h^3)}{h} = f'(x) + \mathcal{O}(h^2) \quad (3)$$

所以用差分代替一阶导数可以精确到 h 的二阶无穷小 $\mathcal{O}(h^2)$ 。

能否用类似的方法来表示二阶导数呢？根据二阶导数的定义，我们需要用双重极限来表示

$$\begin{aligned} f''(x) &= \lim_{l \rightarrow 0} \frac{f'(x + l/2) - f'(x - l/2)}{l} \\ &= \lim_{l \rightarrow 0} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{lh} [f(x + l/2 + h/2) - f(x + l/2 - h/2) \\ &\quad - f(x - l/2 + h/2) + f(x - l/2 - h/2)] \end{aligned} \quad (4)$$

但我们希望只用一个极限来表示二阶导数。然而我们不确定 h 是否需要是 l 的高阶无穷小。我们不妨来试试令 $l = h$ ，即

$$f''(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + h) - 2f(x) + f(x - h)}{h^2} \quad (5)$$

要验证该式成立与否，将 $f(x \pm h)$ 关于 h 做泰勒展开得

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{1}{2} f''(x)h^2 \pm \frac{1}{6} f'''(x)h^3 + \mathcal{O}(h^4) \quad (6)$$

⁹以下假设 $f(x)$ 在某区间内处处可导。

代入式 5 右边得

$$f''(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f''(x)h^2 + \mathcal{O}(h^4)}{h^2} = f''(x) + \mathcal{O}(h^2) \quad (7)$$

这就验证了式 5 的正确性. 另外我们得知用差分来近似二阶导数 $f''(x)$ 同样是精确到二阶无穷小 $\mathcal{O}(h^2)$.

不定积分

预备知识 导数^[38], 基本初等函数的导数^[43]

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. C 叫做**积分常数**.

证明: 由于常数导数^[38] 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 $y = F(x)$ 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.

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^[58]，包括第一类换元法和第二类换元法.
3. 分部积分法^[60]
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^[62] 中的常用积分部分.

换元积分法

预备知识 不定积分^[57]，复合函数求导^[51]

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

$$\int a \sin(ax + b) dx \quad (3)$$

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

$$F[u(x)] + C = -\cos(ax + b) + C \quad (4)$$

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

$$\int f(ax + b) dx = \frac{1}{a} F(ax + b) + C \quad (5)$$

该式使用频率很高，需要熟练掌握。类似例子还有

$$\int \frac{1}{ax + b} dx = \frac{1}{a} \ln(ax + b) + C \quad \int e^{ax+b} dx = \frac{1}{a} e^{ax+b} + C \quad (6)$$

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^[49]）

$$\begin{aligned} \int f[u(x)]u'(x) dx &= \int f[u(x)] d[u(x)] = \int f(u) du = F(u) + C \\ &= F[u(x)] + C \end{aligned} \quad (7)$$

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 7, 即可化简积分.

$$\int f(x) dx = \int f[x(t)] d[x(t)] = \int f[x(t)]x'(t) dt \quad (8)$$

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

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \quad (9)$$

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¹⁰. 上面积分变为

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \int \frac{d \sin t}{\sqrt{1-\sin^2 t}} = \int \frac{\cos t dt}{\cos t} = \int 1 dt = t + C = \arcsin x + C \quad (10)$$

验证: 根据反函数求导法则^[42]

$$\arcsin' x = \frac{1}{\cos(\arcsin x)} = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \quad (11)$$

分部积分法

预备知识 不定积分^[57], 牛顿—莱布尼兹公式^[71]

结论

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

$$\int_a^b F(x)g(x) dx = F(x)G(x) \Big|_a^b - \int_a^b f(x)G(x) dx \quad (2)$$

¹⁰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.

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

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

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

多次分部积分

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¹¹ $g^{[n]}(x)$. 则分部积分式 6 可记为

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

¹¹这是我自己的符号

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。

积分表

预备知识 不定积分^[57]

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^[43]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^[58]，表中任何积分都可以拓展为

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

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

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

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

$$\int \sec x \, dx = \ln |\tan x + \sec x| + C \quad (\text{例 11}) \quad (15)$$

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

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

$$\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \, dx = \arcsin(x) + C \quad (\text{例 10}) \quad (18)$$

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \, dx = \ln \left(x + \sqrt{1+x^2} \right) + C = \sinh^{-1} x + C \quad (\text{例 12}) \quad (19)$$

例 1

$$\int a^x \, dx \quad (20)$$

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

$$\int e^{\ln(a)x} \, dx = \frac{1}{\ln a} e^{\ln(a)x} + C = \frac{1}{\ln a} a^x + C \quad (21)$$

例 2

$$\int \tan x \, dx \quad (22)$$

这个积分用第一类换元积分法 (式 2^[58])

$$\int f[u(x)]u'(x) \, dx = F[u(x)] + C \quad (23)$$

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

$$\int \tan x \, dx = \int f[u(x)]u'(x) \, dx = F[u(x)] + C = -\ln|\cos x| + C \quad (24)$$

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

$$\int \cot x \, dx = F[u(x)] + C = \ln|\sin x| + C \quad (25)$$

例 4

$$\int \sin^2 x \, dx \quad (26)$$

用降幂公式 (式 7^[5]) 和不定积分的线性 (式 4^[57]) 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

$$\begin{aligned} \int \sin^2 x \, dx &= \int \frac{1}{2} \, dx - \frac{1}{2} \int \cos 2x \, dx \\ &= \frac{x}{2} - \frac{1}{4} \sin(2x) = \frac{1}{2}(x - \sin x \cos x) + C \end{aligned} \quad (27)$$

例 5

$$\int \cos^2 x \, dx \quad (28)$$

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

$$\begin{aligned} \int \cos^2 x \, dx &= \int \frac{1}{2} \, dx + \frac{1}{2} \int \cos(2x) \, dx \\ &= \frac{x}{2} + \frac{1}{4} \sin(2x) = \frac{1}{2}(x + \sin x \cos x) + C \end{aligned} \quad (29)$$

例 6

$$\int \frac{1}{x} dx \quad (30)$$

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

$$\int \frac{1}{x} dx = \ln|x| + C \quad (31)$$

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

$$\int \frac{1}{x} dx = \begin{cases} \ln x + C_1 & (x > 0) \\ \ln(-x) + C_2 & (x < 0) \end{cases} \quad (32)$$

其中 C_1 和 C_2 是两个不相同的待定常数.

例 7

$$\int x e^x dx \quad (33)$$

使用用分部积分式 1^[60]

$$\int F(x)g(x) dx = F(x)G(x) - \int f(x)G(x) dx \quad (34)$$

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

$$\int x e^x dx = x e^x - \int 1 \cdot e^x dx = e^x(x - 1) + C \quad (35)$$

例 8

$$\int \ln x dx \quad (36)$$

方法一： 使用第二类换元法^{8[58]}

$$\int f(x) dx = \int f[x(t)] d[x(t)] = \int f[x(t)]x'(t) dt \quad (37)$$

令¹² $x = e^t$, 求导得 $x'(t) = e^t$, 换元得

$$\int \ln x \, dx = \int \ln(e^t) e^t \, dt = \int t e^t \, dt \quad (38)$$

由例 7 中的分部积分得

$$\int \ln x \, dx = e^t(t - 1) + C = e^{\ln x}(\ln x - 1) + C = x(\ln x - 1) + C \quad (39)$$

方法二：直接使用分部积分法式 1^[60], 对常数 1 积分, 对 $\ln x$ 求导, 得

$$\int \ln x \, dx = x \ln x - \int x \cdot \frac{1}{x} \, dx = x \ln x - x + C \quad (40)$$

例 9

$$\int \sqrt{a^2 - x^2} \, dx \quad (41)$$

使用第二类换元法式 8^[58], 令 $x = a \sin t$ 得

$$\int a \cos t \, d(a \sin t) = a^2 \int \cos^2 t \, dt \quad (42)$$

将例 5 的结论代入得 $a^2(t + \sin t \cos t) + C$, 再将 $t = \arcsin(x/a)$ 代入得

$$\int \sqrt{a^2 - x^2} \, dx = \frac{1}{2} \left(x \sqrt{a^2 - x^2} + a^2 \arcsin \frac{x}{a} \right) + C \quad (43)$$

例 10

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

使用第二类换元法式 8^[58], 令 $x = \sin t$ 得

$$\int \frac{1}{\sqrt{1 - \sin^2 t}} \, d(\sin t) = \int dt = t + C = \arcsin x + C \quad (45)$$

例 11

$$\int \sec x \, dx \quad (46)$$

¹²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.

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^[58]) , 令 $u(x) = \sec x + \tan x$, 再使用式 3 即可

$$\begin{aligned}\int \sec x \, dx &= \int \frac{\sec^2 x + \sec x \tan x}{\sec x + \tan x} \, dx = \int \frac{u'(x)}{u} \, dx = \int \frac{1}{u} \, du \\ &= \ln |u| + C = \ln |\sec x + \tan x| + C\end{aligned}\quad (47)$$

例 12

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \, dx \quad (48)$$

使用第二类换元法式 8^[58], 令 $x = \tan t$, 再利用“三角恒等式^[5]”的式 2 和式 3 得

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+\tan^2 t}} d(\tan t) = \int \frac{1}{\sec t} \sec^2 t \, dt = \ln |\tan t + \sec t| + C \quad (49)$$

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

$$\int \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \, dx = \ln(x + \sqrt{1+x^2}) + C \quad (50)$$

注意上式中 \ln 后面的绝对值符号消失是因为 $x + \sqrt{1+x^2} \geqslant 0$ 恒成立. 另外由“双曲函数^[6]”中例 1 可知上式又等于 $\sinh^{-1} x + C$.

定积分

预备知识 导数^[38], 极限^[32]

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.

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

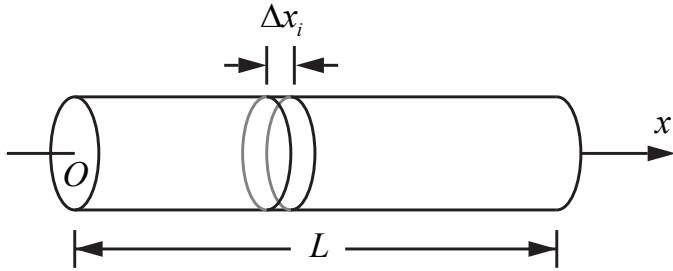


图 1: 密度不均匀的绳子

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。所以 $\int \rho(x) dx$ 可以用来表示右图阴影部分的面积。

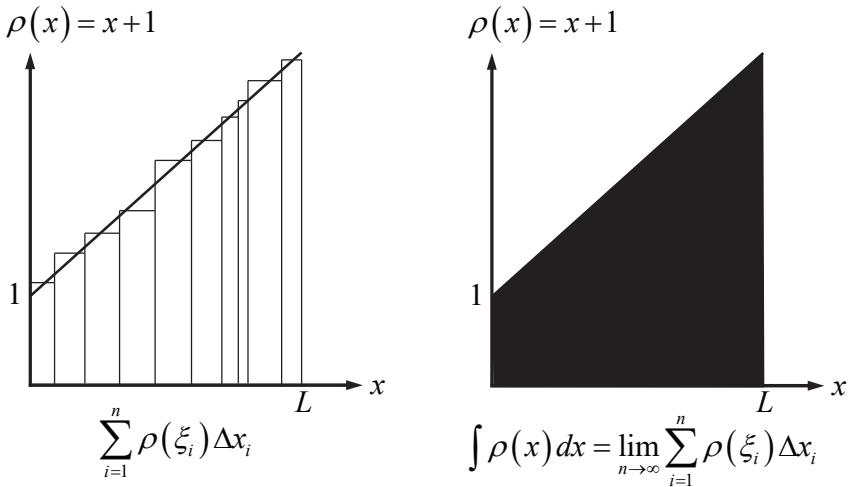


图 2: 定积分可以理解为曲线下面的面积，并看做由无限多个无穷窄的矩形组成。

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^[71] 即可马上求解。

例 2 求圆的面积

在直角坐标系中，圆的方程为 $x^2 + y^2 = R^2$ ，上半圆的方程可看做 y 关于

x 的函数

$$y = f(x) = \sqrt{R^2 - x^2} \quad (x \in [-R, R]) \quad (6)$$

将该式定积分再乘以 2 即可得到圆的面积

$$S = 2 \int_{-R}^R f(x) dx = 2 \int_{-R}^R \sqrt{R^2 - x^2} dx \quad (7)$$

我们还可以用另一种方法验证圆的面积公式。把原划分成许多微小圆环，由[例 2^{\[49\]}](#)，每个微小圆环的面积为 $2\pi r dr$ ，所以圆的面积可以用定积分表示为

$$S = \int_0^R 2\pi r dr \quad (8)$$

以上两个定积分的结果都为 πR^2 ，过程见“牛顿—莱布尼兹公式^[71]”的[例 2](#)。

例 3 球体的表面积

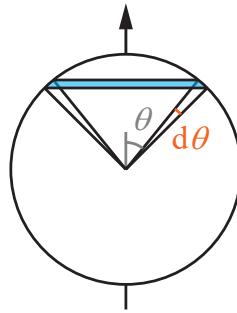


图 3: 将球的表面划分成许多细圆环，每个对应的极角为 $d\theta$

以球心为原点建立球坐标系，我们可以把球体的表面根据不同的 θ 划分成许多细圆环（如图 3），每个圆环的面积等于周长乘以宽度，即

$$dS = 2\pi R \sin \theta \cdot R d\theta \quad (9)$$

所以球的表面积可以用定积分记为

$$S = \int_0^\pi 2\pi R \sin \theta \cdot R d\theta = 2\pi R^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \quad (10)$$

虽然我们还不会计算这个定积分（见“牛顿—莱布尼兹公式^[71]”），但现在可以用一种巧妙的方法来简化问题。让我们来计算每个细圆环在极轴方向

投影的长度. 我们不妨把极轴叫做 z 轴, 则对某个细圆环有 $z = R \cos \theta$, 微分得 $dz = -R \sin \theta d\theta$, 将该式消去式 9 中的 $d\theta$ 得

$$dS = -2\pi R dz \quad (11)$$

这说明无论细圆环的位置如何, 其面积与其在 z 轴投影的长度的比值恒为 2π . 至于上式中的负号, 是因为我们假设了正的 $d\theta$ 对应正的面积, 而正的 $d\theta$ 却对应负的 dz . 由于面积恒为正值, 我们可以取绝对值将负号去掉. 这样, 球的表面积就可以用定积分表示为

$$S = \int_{-R}^R 2\pi R dz \quad (12)$$

由于被积函数是一个常数, 定积分的结果就是该常数乘以积分区间的长度即 $4\pi R^2$.

例 4 球的体积

要计算一个半径为 R 的球体的体积, 可以将球划分为无限个薄球壳, 每个薄球壳的体积等于该球壳的表面积乘以厚度 (见例 2^[49]), 即 $dV = 4\pi r^2 dr$. 所以球的体积可用定积分表示为

$$V = \int_0^R 4\pi r^2 dr \quad (13)$$

同样由“牛顿—莱布尼兹公式^[71]”可得积分结果为 $4\pi R^3/3$.

牛顿—莱布尼兹公式

预备知识 不定积分^[57], 定积分^[67]

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与 x 轴之间的面积, 二者乍看起来没什么联系, 但牛顿—莱布尼兹公式却揭示了两者之间的重要关系.

若 $F(x)$ 是 $f(x)$ 的一个原函数^[57], 则

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

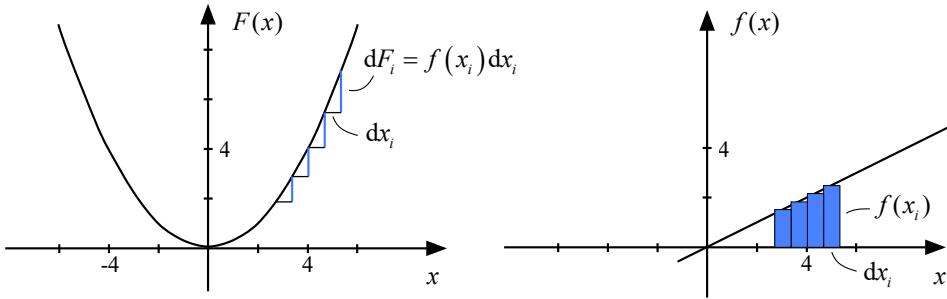


图 1: 右图中 $f(x)$ 的原函数为左图中的 $F(x)$, 当步长趋近 0 时, 右图中的长方形面积趋近于左图中小竖线的长度.

推导

如图 1, 根据定积分^[67] 的定义, 有¹³

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

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

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

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

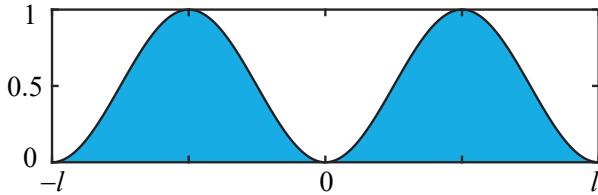
$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i [F(x_{i+1}) - F(x_i)] = F(b) - F(a) \quad (4)$$

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. 在计算定积分的过程中, 为了书写简洁, 我们往往将上式中的 $F(b) - F(a)$ 记为 $F(x)|_a^b$.

例 1 计算定积分

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

¹³这里假设极限存在.

图 2: $y = \sin^2(\pi x/l)$ 的定积分

先计算对应的不定积分. 由积分表^[62] 中的式 13 结合式 1 得不定积分为

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

再利用牛顿—莱布尼兹公式求定积分结果为 1. 计算该定积分还有另一种更简单的几何方法 (见图 2), 由于被积函数的对称性, 函数曲线可将区间 $[-l, l]$ 内高为 1 的长方形 (面积为 $2l$) 划分成等面积的上下两部分, 曲线下方的面积 l 就是定积分的结果.

例 2 圆的面积

现在我们可以用例 2^[67] 中列出的两个定积分计算圆的面积. 先看第一个定积分, 由积分表式 17 得

$$\int \sqrt{R^2 - x^2} dx = \frac{1}{2} \left(x \sqrt{R^2 - x^2} + R^2 \arcsin \frac{x}{R} \right) + C \quad (7)$$

由牛顿—莱布尼兹公式, $-R$ 到 R 的定积分为 $\pi R^2/2$, 所以圆的面积为 πR^2 .

第二个定积分要简单得多, 由幂函数的积分式 2 和牛顿—莱布尼兹公式得

$$\int_0^R 2\pi r dr = \pi r^2 \Big|_0^R = \pi R^2 \quad (8)$$

常微分方程

预备知识 简谐振子^[187]

作为一个引入的例子, 我们首先看 “简谐振子^[187]” 中的式 1. 一般来说, 含有函数 $y(x)$ 及其高阶导数 $y^{(n)}$, 和自变量 x 的等式叫做常微分方程 (简称微分方程¹⁴), 即

$$f(y^{(N)}, y^{(N-1)}, \dots, y, x) = 0 \quad (1)$$

¹⁴这里的“常”强调未知函数只有一个因变量, 用于区别多元微积分中的“偏微分方程”.

上式中的最高阶导数为 N 阶，所以可以把上式叫做 N 阶微分方程。注意方程中必须出现 $y^{(N)}$ ，剩下的 $y^{(N-1)}, \dots, y, x$ 可以只出现部分或不出现。所有能使微分方程成立的函数 $f(x)$ 都是方程的解，如果能找到含有参数的函数 $f(x, C_1, \dots, C_N)$ ，使所有可能的解都可以通过给 C_i 赋值来表示，那么这就是函数的通解。

有一些微分方程的解法是显然的，例如描述自由落体运动^[175] 的微分方程为 $\frac{d^2y}{dt^2} = g$ （假设 y 轴竖直向下）。要解这个方程，只需对等式两边进行两次不定积分即可得到通解为 $y = C_1 + C_2 t + gt^2/2$ 。一般来说，如果 N 阶微分方程具有 $y^{(N)} = f(x)$ 的形式，只需进行 N 次积分即可得到通解。

另一些方程是可以分离变量的，我们来看“受阻落体^[189]”这个例子。若方程可分离变量，只需先分离变量，再对等式两边求不定积分即可找到通解。

一阶线性微分方程

二阶线性微分方程

一阶线性微分方程

预备知识 常微分方程^[73]

具有以下形式的微分方程叫做一阶线性微分方程

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y = f(x) \quad (1)$$

一般地，未知函数及其各阶导数都各占一项时，方程就是线性的。另外，如果 $f(x)$ 项不出现，方程就是齐次的，否则就是非齐次的。我们先来看以上方程对应的齐次方程

$$\frac{dy}{dx} + p(x)y = 0 \quad (2)$$

这是一个可分离变量的方程，分离变量得

$$\frac{dy}{y} = -p(x) dx \quad (3)$$

两边积分得

$$\ln|y| = - \int p(x) dx + C \quad (4)$$

两边取自然指数得

$$y = \pm e^C e^{-\int p(x) dx} \quad (5)$$

把 $\pm e^C$ 整体看做一个任意常数 C , 上式变为.

$$y = C e^{-\int p(x) dx} \quad (6)$$

这就是一阶线性齐次微分方程式 2 的通解, 也叫式 1 的齐次解.

常数变易法

现在我们用常数变易法来解非齐次方程式 1. 为书写方便, 式 6 中令 $y_0(x) = \exp(-\int p(x) dx)$. 假设上式中的 C 是一个函数 $C(x)$ 而不是常数, 代入式 1 得

$$C' y_0 + C[y'_0 + p(x)y_0] = f(x) \quad (7)$$

由于 y_0 是齐次解, 上式方括号中求和为 0, 分离变量得

$$dC = \frac{f(x)}{y_0} dx \quad (8)$$

两边积分得

$$C(x) = \int \frac{f(x)}{y_0} dx \quad (9)$$

所以一阶线性非齐次微分方程的通解为

$$y = y_0 \int \frac{f(x)}{y_0} dx \quad (10)$$

其中

$$y_0(x) = e^{-\int p(x) dx} \quad (11)$$

注意待定常数包含在式 10 的不定积分中, 式 11 中的不定积分产生的待定常数在代入式 10 后可消去.

二阶常系数齐次微分方程

预备知识 常微分方程^[73], 指数函数(复数)^[27]

二阶常系数齐次微分方程形式如下

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

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. 根据根的分布, 有如下四种情况

1. 有两个不同的实根 r_1 和 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 $\pm i\omega_0$ ($b = 0$, $b^2 - 4ac < 0$), 方程的通解为

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

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

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

或

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

其中

$$r = -\frac{b}{2a} \quad \omega = \frac{1}{2a} \sqrt{4ac - b^2} \quad (9)$$

详细推导

情况 1 的结论是显然的，我们先来看情况 3。根据 $y = C e^{rx}$ 的假设，通解应该是

$$y = C_1 e^{i\omega x} + C_2 e^{-i\omega x} \quad (10)$$

如果这里的 C_1 和 C_2 取任意复数，那么上式就是方程在复数域的通解，其中包含了实数域的通解。这个通解还有另一种等效的形式，令

$$C_1 = \frac{C_3}{2} + \frac{C_4}{2i} \quad C_2 = \frac{C_3}{2} - \frac{C_4}{2i} \quad (11)$$

代入上式得

$$\begin{aligned} y &= C_3 \frac{e^{i\omega x} + e^{-i\omega x}}{2} + C_4 \frac{e^{i\omega x} - e^{-i\omega x}}{2i} \\ &= C_3 \cos(\omega x) + C_4 \sin(\omega x) \end{aligned} \quad (12)$$

注意如果 C_3, C_4 取任意复数，该式仍然是复数域的通解（因为任何 C_1, C_2 都可以找到对应的 C_3, C_4 ），但只要把 C_3, C_4 限制在实数域中，该式就是实数域的通解。

情况 4 的结论可以类比情况 3 得出，最后我们来看情况 2。我们可以把情况 2 看做情况 4 的一个极限，即 $\omega \rightarrow 0$ 时的情况。如果式 7 中的 C_1, C_2 都是普通常数，则取该极限时可以得到式 4 的第一项 $C_1 e^{rx}$ 。那如何得到第二项呢？我们不妨令式 7 中的 $C_1 = 0, C_2 = C_3/\omega$ ，再来取极限，得

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} C_3 e^{rx} \frac{\sin(\omega x)}{\omega x} x = C_3 x e^{rx} \quad (13)$$

这里用到了“小角正弦值极限^[35]”中的结论。

二阶常系数非齐次微分方程

预备知识 二阶常系数齐次微分方程^[75]

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. $y_1(x)$ 和 $y_2(x)$ 是对应齐次方程

$$y'' + b y' + c y = 0 \quad (4)$$

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, v_i 也是关于 x 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¹⁵

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

把式 7 代入式 6, 得到

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

¹⁵ 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.

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

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

对 (13) 的两条式子积分，即可得到

$$v_1 = - \int \frac{y_2 f}{W} dx + C_1 \quad (16)$$

$$v_2 = \int \frac{y_1 f}{W} dx + C_2 \quad (17)$$

(15) (16) 代入 (5) 式，得到方程 (1) 的解为

$$y(x) = C_1 y_1 + C_2 y_2 - y_1 \int \frac{y_2 f}{W} dx + y_2 \int \frac{y_1 f}{W} dx \quad (18)$$

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，我们只能在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^[67]

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. 如果它们的模长不为零，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^[67]

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^[16]。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。

^[16]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.

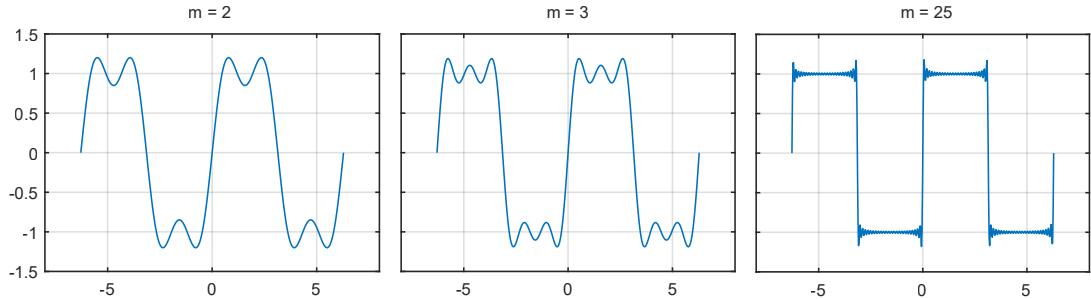


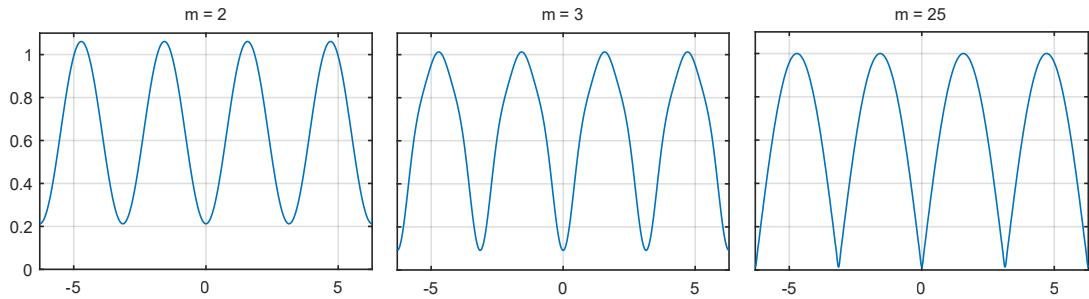
图 1: 有限项傅里叶级数逼近方波

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^[53]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¹⁷. 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.

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

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.

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

¹⁷ 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

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

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

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

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

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

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）[\[81\]](#), 欧拉公式[\[27\]](#)

$f(x)$ 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[\[81\]](#) 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 $f(x)$ 与 $g(x)$ 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^[81] 和式 3^[81] 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^[81]，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。

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^[90] 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^[94] 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^[99] 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^[97]（所有基底模长

¹对于几何矢量，正交就是方向垂直，不加区分。

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**^[109]. 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^[116] 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

几何矢量

我们来回顾高中学的**几何矢量**, 以下简称为“**矢量**”. 要强调的是, 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. 本书中矢量用正黑体表示, 如 \mathbf{a} . 在手写时, 可以在字母上方加箭头表示, 如 \vec{a} . 特殊地, 如果一个矢量的长度等于 1, 那么它就是一个**单位矢量**, 本书中在矢量上面加上“ $\hat{\cdot}$ ”符号表示单位矢量, 如 \hat{a} . 为了与矢量区分, 我们把单个的实数或复数称为**标量**.

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

矢量的加法

如图 1, 两个矢量相加, 既可以使用平行四边形法则, 也可以用三角形法则. 若有多个矢量连续相加, 可以分别把它们首尾相接, 结果就是由起点指向终点的矢量. 容易证明矢量的加法满足加法交换律 $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}$, 结合律 $(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} = \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C})$.

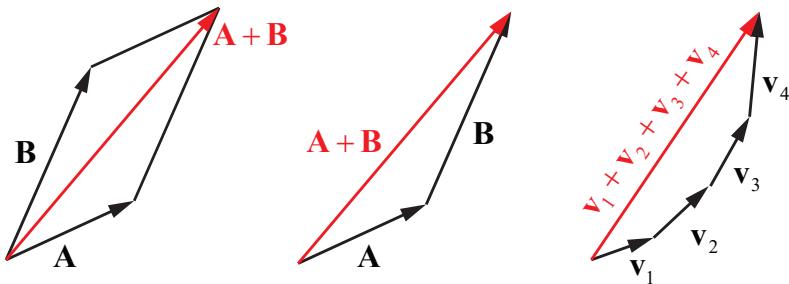


图 1: 矢量的加法

矢量的数乘 共线

如图 2, 一个矢量与一个正实数相乘, 则方向不变, 把长度乘以这个实数. 若这个数是负数, 则把矢量取反方向再把长度乘以这个实数数的绝对值即可. 若 λ, μ 表示实数, 容易证明分配律 $\lambda(\mathbf{A}+\mathbf{B}) = \lambda\mathbf{A}+\lambda\mathbf{B}$ 和 $(\lambda+\mu)\mathbf{A} = \lambda\mathbf{A}+\mu\mathbf{A}$, 结合律 $\lambda(\mu\mathbf{A}) = (\lambda\mu)\mathbf{A}$.

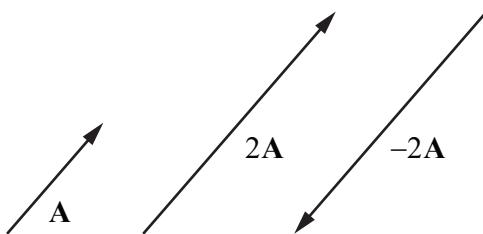


图 2: 矢量的数乘

如果两个矢量的关系可以用 $\mathbf{A} = \lambda\mathbf{B}$ 表示, 那么它们就是共线的. 共线的充分必要条件^[8] 是, 两矢量方向相同或相反.

矢量的线性组合

把若干矢量 \mathbf{v}_i 分别与若干实数 c_i 相乘再相加就得到了这些矢量的一个线性组合

$$\sum_i^N c_i \mathbf{v}_i = c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 + \cdots + c_N \mathbf{v}_N \quad (1)$$

线性相关 线性无关

如果存在至少一组不全为零系数 c_i 使几个矢量的线性组合等于零，这些矢量就被称为线性相关的

$$\sum_i^N c_i \mathbf{v}_i = \mathbf{0} \quad (2)$$

这是因为对于任何一个不为零的项 j , 矢量 \mathbf{v}_j 都可以表示为其他矢量的线性组合. 只需把上式除以 c_j 即可

$$\mathbf{v}_j = \sum_{i \neq j} \frac{c_i}{c_j} \mathbf{v}_i \quad (3)$$

反之，如果不存在这样的系数，这些矢量就是线性无关的.

基底 矢量空间 坐标

沿一条直线的所有矢量都是共线的，所以在一条直线上最多不超过一个矢量线性无关，所有这些共线的矢量以及它们的加法和数乘运算组成一个一维矢量空间³. 一个平面上的所有矢量以及它们的加法和数乘运算，组成一个二维矢量空间，二维矢量空间中最多只能找到两个线性无关的矢量. 三维矢量空间同理.

N 维空间中的任意一组线性无关的 N 个矢量 $\beta_1 \dots \beta_N$ 可以作为一组矢量基底，记为 $\{\beta_i\}$. 如果在这组基底中加入该空间中任意一个矢量 \mathbf{v} ，这组 $N+1$ 个矢量必定线性相关（否则空间就是 $N+1$ 维的），即存在不全为零的实数 $c_1 \dots c_{N+1}$ 使下式成立

$$\sum_{i=1}^N c_i \beta_i + c_{N+1} \mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (4)$$

³注意这里并不打算给出矢量空间的一般定义，只是说“是一个矢量空间”.

我们还可以得知 c_{N+1} 必不为零（反证法：如果 $c_{N+1} = 0$ ，则可得出基底 $\{\beta_i\}$ 线性相关，不成立），所以由式 3 可知 \mathbf{v} 可用 $\{\beta_i\}$ 的线性组合表示。令 $x_i = -c_i/c_{N+1}$ ，该空间中任意矢量 \mathbf{v} 都有

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^N x_i \beta_i \quad (5)$$

这里的 x_i 就是矢量空间中坐标的规定。

我们可以用反证法证明坐标的唯一性。假设有两组不全相同的 x_i 都可以是上式成立，分别记为 x_i 和 y_i 。那么分别代入上式再把两式相减得到

$$\sum_{i=1}^N (x_i - y_i) \beta_i = \mathbf{0} \quad (6)$$

由于 $(x_i - y_i)$ 不全为零，得到基底 $\{\beta_i\}$ 线性相关，而这是不可能的。证毕。

坐标的运算

我们常常把一个矢量的坐标写成一个代数矢量，如

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{\{\beta_i\}} \quad (7)$$

在列矢量的右下角声明基底是较为严谨的做法，但为了书写简洁，在不至于混淆的情况下我们可以将其省略。另外在正文中，为了节约空间，我们将式 7 记为 $\mathbf{v} = (x, y, z)_{\{\beta_i\}}^T$ （见“矩阵^[110]”式 2），同样，我们时常省略 $\{\beta_i\}$ 。

当我们说两个矢量相等时，同一基底下两矢量的坐标全都需要相等。若已知两矢量在不同基底下的列矢量，则需要先将它们变换到同一基底下再判断是否相等。

以上介绍的加法和数乘都有对应的坐标运算。由式 5 及矢量加法和数乘的交换律和结合律得

$$\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}_{\{\beta_i\}} + \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}_{\{\beta_i\}} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ y_1 + y_2 \\ z_1 + z_2 \end{pmatrix}_{\{\beta_i\}} \quad (8)$$

$$\lambda \mathbf{v} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{\{\beta_i\}} = \begin{pmatrix} \lambda x \\ \lambda y \\ \lambda z \end{pmatrix}_{\{\beta_i\}} \quad (9)$$

要特别注意的是，当定义了多组基底时，只有基底相同的两个列矢量按照式 8 相加才有意义.

拓展阅读 矢量的点乘^[94], 正交归一基^[97], 矢量的叉乘^[99]

矢量点乘

预备知识 几何矢量^[90]

几何定义

我们先来看点乘的几何定义. 注意该定义不需要任何坐标系的概念.

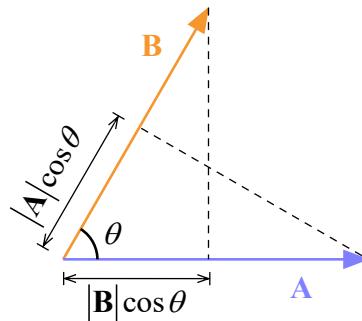


图 1: 点乘的几何定义

如图 1，两个几何矢量的点乘（dot product）⁴就是把它们的模长相乘，再乘以它们的夹角的余弦值. 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. 注意两个矢量点乘得到的是一个标量. 几何定义中（图 1），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

⁴也叫点积，标量积（scalar product）或内积（inner product）

可以理解为 \mathbf{B} 投影在 \mathbf{A} 上的模长乘以 \mathbf{A} 的模长⁵. 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.

我们说两个点乘为 0 的矢量互相垂直, 或者说正交. 几何矢量与自身点乘可得该矢量模长的平方. 单位矢量与自己的点乘等于 1. 把一个矢量除以自身模长得到同方向单位矢量的过程叫做矢量的归一化.

点乘的性质

1. 交换律⁶

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

2. 分配律⁷

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

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.

点乘的坐标运算

预备知识 正交归一基^[97]

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^[97] 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

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

⁵在这种理解下, 若量矢量的夹角为钝角, 投影长度取负值

⁶由式 1 易证

⁷证明见词条最后.

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

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

注意点乘的代数定义也可以拓展到更高维的情况甚至复数的情况，即对于复数域的 u_1, u_2, \dots, u_N 和 v_1, v_2, \dots, v_N ，

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_k u_k v_k \quad (10)$$

注意虽然上式中的坐标取决于正交归一基底的选取，但点乘的结果却与基底的选取无关。这是因为点乘的几何定义是两个几何矢量间的几何性质，与基底无关。

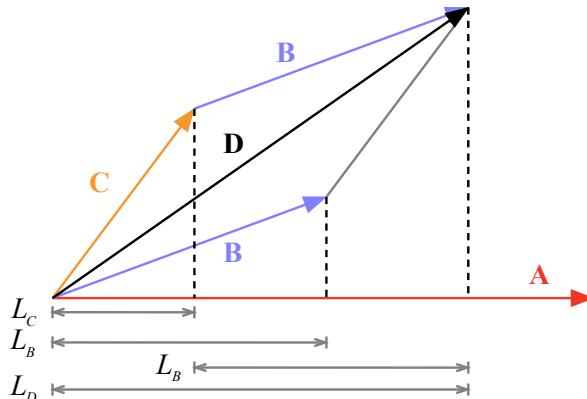


图 2: 点乘分配律的证明

证明点乘的分配律

如图2，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 $L_D = L_B + L_C$.

正交归一基底

预备知识 矢量点乘^[94]

我们已经知道了矢量基底的概念, 如果一组矢量基底中的每个矢量模长都为 1 且每两个矢量都正交, 则我们把这组基底称为正交归一基或单位正交基. 若把这组正交归一基记为 $\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2 \dots \hat{\mathbf{x}}_n$, 则正交归一可以用点乘表示为

$$\hat{\mathbf{x}}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}_j = \delta_{ij} \quad (1)$$

其中 δ_{ij} 是克罗内克 δ 函数 (**Kronecker delta function**), 定义为

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (2)$$

易证 δ 函数的两个常用性质

$$\sum_j a_j \delta_{ij} = a_i \quad \sum_{ij} a_i b_j \delta_{ij} = \sum_k a_k b_k \quad (3)$$

任意矢量在单位正交基上的展开

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}_i) \hat{\mathbf{x}}_i = \sum_{i=1}^n v_i \hat{\mathbf{x}}_i \quad (4)$$

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.

$$\mathbf{v} = (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{x}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{y}}) \hat{\mathbf{y}} + (\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{z}}) \hat{\mathbf{z}} = v_x \hat{\mathbf{x}} + v_y \hat{\mathbf{y}} + v_z \hat{\mathbf{z}} \quad (5)$$

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

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n c_i \hat{\mathbf{x}}_i \quad (6)$$

用 $\hat{\mathbf{x}}_k$ 乘以等式两边，得

$$\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}_k = \sum_{i=1}^n c_i \hat{\mathbf{x}}_i \cdot \hat{\mathbf{x}}_k = \sum_{i=1}^n c_i \delta_{ik} = c_k \quad (7)$$

所以式 6 中的系数有唯一确定的值 $c_k = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}}_k$. 证毕.

右手定则

物理中常用右手定则来判断方向，右手定则分为以下两种.

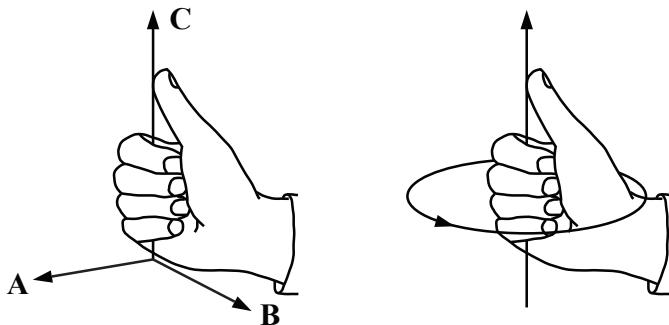


图 1: 两种右手定则

第一种右手定则

假设有两个不共线的矢量，第一个为 \mathbf{A} ，第二个为 \mathbf{B} ，它们可以定义一个平面. 现在我们想根据 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 确定该平面的法向量 \mathbf{C} ，但由于平面的法向量有两个，我们如何区分它们呢？我们可以通过图 1（左）所示的右手定则来确定其中一个法向量：首先将右手的四指指向 \mathbf{A} ，再将四指弯向 \mathbf{B} ，这时伸出拇指，拇指的方向即为右手定则定义的方向.

我们通常使用的空间直角坐标系被称为“右手系”，是因为我们可以通过右手定则从 x 轴和 y 轴的方向定义 z 轴的方向（图 2 右）. 同理，我们也可以定义所谓的“左手系”.

第二种右手定则

假设空间中有一圆环，且圆环上有一正方向，我们可以用右手定则指定圆环所在平面的一个法向量. 如图 1（右），用右手握住该圆环，手指与圆环平

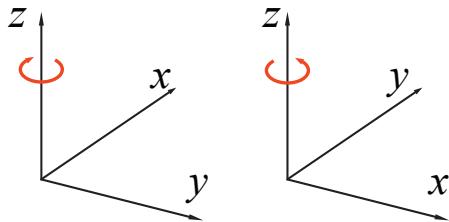


图 2: 左手系 (左) 与右手系 (右)

行, 且指尖指向圆环的正方向, 伸出拇指, 则拇指所指的方向就是右手定则判断的方向.

矢量叉乘

预备知识 右手定则^[98], 三阶行列式^[104]

叉乘的几何定义

两个矢量 \mathbf{A} , \mathbf{B} 的叉乘 (cross product)⁸, 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, 且由右手定则^[98] 决定.

与点乘和数乘不同, 叉乘不满足交换律. 根据几何定义, $\mathbf{B} \times \mathbf{A}$ 与 $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 模长相等, 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

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

⁸也叫叉积 (cross product), 向量积 (vector product) 或矢量积

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

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

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.

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

由式 2 及上式可以推出

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \times \mathbf{C} = -\mathbf{C} \times (\mathbf{A} + \mathbf{B}) = -\mathbf{C} \times \mathbf{A} - \mathbf{C} \times \mathbf{B} = \mathbf{A} \times \mathbf{C} + \mathbf{B} \times \mathbf{C} \quad (5)$$

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^[102]).

叉乘的坐标运算

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

$$\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{z}} \quad \hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{z}} = \hat{\mathbf{x}} \quad \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{y}} \quad (6)$$

由关系式 6 可得

$$\hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{x}} = -\hat{\mathbf{z}} \quad \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{y}} = -\hat{\mathbf{x}} \quad \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{z}} = -\hat{\mathbf{y}} \quad (7)$$

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

$$\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{0} \quad \hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{0} \quad \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{z}} = \mathbf{0} \quad (8)$$

式 6, 式 7 和式 8 中共 9 条等式描述了 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ 中任意两个叉乘的结果.

把矢量 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 分别在直角坐标系的三个单位矢量展开, 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 4 式 5), 可得到如下 9 项

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

注意每一项中的运算在式 6, 式 7 和式 8 中都能找到答案, 于是上式化为

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

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

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

式 11 可以用三阶行列式^[104] 表示为

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

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 $O(0, 0, 0)$, $A(1, 1, 0)$, $B(-1, 1, 1)$. 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

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

三角形的面积为

$$S = \frac{1}{2} ab \sin \theta\tag{15}$$

其中 θ 是 \mathbf{a} 与 \mathbf{b} 的夹角。根据式 1，有⁹

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

令

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

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¹⁰ 得单位法向量为

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

矢量叉乘分配律的几何证明

预备知识 矢量的叉乘^[99]

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

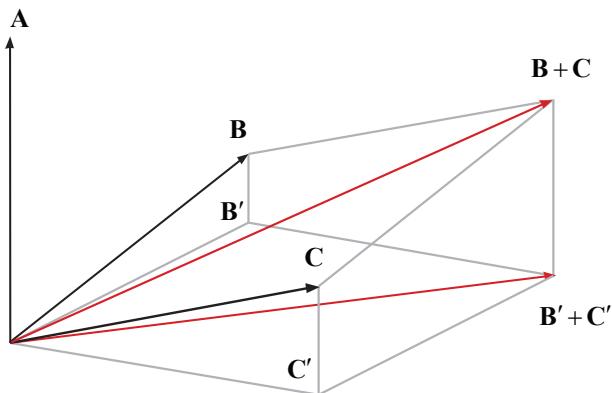


图 1: 把 $\mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}$ 投影到与 \mathbf{A} 垂直的平面上

⁹可见 $|\mathbf{a} \times \mathbf{b}|$ 是以 \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 为边的平行四边形的面积。

¹⁰把矢量长度变为 1，方向不变

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^[99]， $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 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^[99]

连续两个叉乘的化简也叫 BAC-CAB 定理

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

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

要证明这个定理可以将每个叉乘在各个基底上展开 (式 11^[99]).

习题 1

由式 11^[99] 证明式 1.

这里对连续叉乘的几何意义略作说明, 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} , 所以最终得到的矢量还是落到 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 所在平面上, 所以等式右边是 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 的线性组合.

下面来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.

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) &= \underbrace{\mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})} \\ (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) \times \mathbf{A} &= \underbrace{\mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})} \end{aligned}$$

图 1: 三矢量叉乘的化简

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¹¹. 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¹² 计算.

¹¹充分必要条件是所有行向量也线性无关

¹²详见 Matlab, Mathematica 和 Wolfram Alpha 的计算方法.

二阶行列式的定义

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \quad (1)$$

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¹³.

¹³见同济大学的《线性代数》

高阶行列式的定义

N 阶行列式 (N 为正整数¹⁴) 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，逆序数的定义为

$$\sum_{i=2}^N \text{满足 } P_n(i) < P_n(j) \ (j < i) \text{ 的个数} \quad (4)$$

若逆序数为偶数，则前面加正号，奇数则加负号。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

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum_{n=1}^{N!} S_n \prod_{i=1}^N a_{i,P_n(i)} \quad (5)$$

三矢量的混合积

预备知识 矢量的叉乘^[99]

我们定义以下运算

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

为矢量 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ 的混合积。混合积满足

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

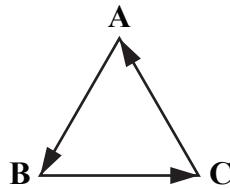


图 1: 式 2 记忆法

这个公式可由图 1 记忆。图中箭头的方向由叉乘的方向决定，与点乘无关 ($\mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} = \mathbf{C} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$)。如果混合积的顺序取与箭头相反的方向，根据叉乘的性质，需要在前面加上负号（叉乘不满足乘法交换律）。下式与上式互为相反数

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

另外要注意混合积的方向是由叉乘的顺序所决定的，与点乘的顺序无关。

几何法证明

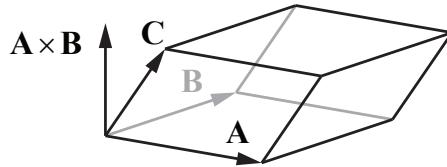


图 2: 矢量混合积的几何意义

如图 2，以三个矢量为棱作平行六面体。由例 1^[99] 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等于底面积乘以高

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

同理可得对于同一平行六面体

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

这里只证明了式 2 的绝对值，要证明正负号，定义 $\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{C} < 0$ 时 V 为负值即可。

¹⁴一阶行列式定义为 $|a_{11}| = a_{11}$ ，虽然几乎从不被使用

代数法证明

预备知识 行列式^[104]

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

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} = \begin{vmatrix} A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \\ C_x & C_y & C_z \end{vmatrix} \quad (6)$$

而利用行列式中任意两行置换符号改变，即可证明式2.

平面旋转变换

预备知识 三角恒等式^[5]，极坐标系^[9]

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

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 (式 3^[5]) 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.

线性变换

预备知识 平面旋转变换^[108]

从代数的角度来说, 对于给出几个数, 把它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.

线性变换的矩阵表示

由 n 个数 $x_1 \dots x_n$ 变换到 m 个数 $y_1 \dots y_n$ 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，就是表示该变换的矩阵。

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

矩阵

预备知识 线性变换^[109]

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} 。特殊地，行数等于列数的矩阵叫做方阵。只有一行的矩阵和只有一列的矩阵分别叫做行矢量和列矢量。

矩阵的转置

我们先定义矩阵的对角线是从左上角到右下角的所有矩阵元，即行标等于列标的矩阵元。则任意矩阵 \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。即任意矩阵元满足

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

注意转置操作不影响对角线上的矩阵元. 另外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, 本书在正文中通常用 $(x_1, x_2 \dots, x_n)^T$ 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^[109]

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

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

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad (5)$$

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^[94] 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. 我们可以用图 1 来记忆矩阵乘法.

矩阵乘法一般不满足交换律, 举一个反例:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

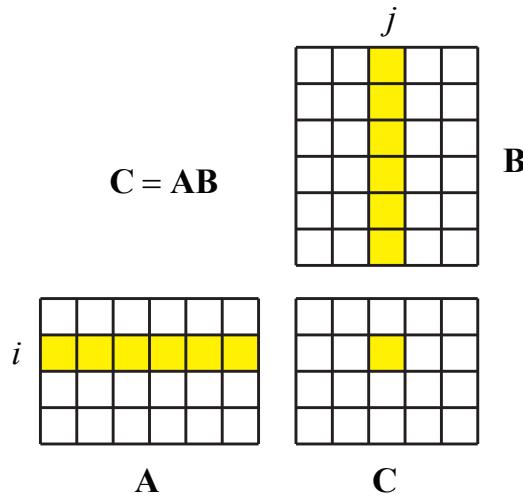


图 1: 矩阵乘法的示意图: \mathbf{C} 的 (i, j) 矩阵元等于 \mathbf{A} 的第 i 行和 \mathbf{B} 的第 j 列逐个元素相乘再相加

矩阵的乘法分配律

矩阵的乘法满足分配律

$$\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC} \quad (13)$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{AC} + \mathbf{BC} \quad (14)$$

令式 13 左边等于矩阵 \mathbf{D} , 则其矩阵元为

$$D_{ij} = \sum_k A_{ik}(B_{kj} + C_{kj}) \quad (15)$$

拆括号得

$$D_{ij} = \sum_k A_{ik}B_{kj} + \sum_k A_{ik}C_{kj} \quad (16)$$

而这恰好是 $\mathbf{AB} + \mathbf{AC}$ 的矩阵元. 证毕. 式 14 的证明类似.

现在我们可以得出线性变换 (式 5) 的一个重要性质. 对若干同长度的列矢量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots$

$$\mathbf{A}\left(\sum_i c_i \mathbf{v}_i\right) = \sum_i c_i \mathbf{Av}_i \quad (17)$$

也就是说若干列矢量的线性组合的线性变换等于每个列矢量分别进行线性变换再进行同样的线性组合.

矩阵乘法的结合律

现在来看三个矩阵相乘，令

$$\mathbf{D} = \mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{C}) \quad (18)$$

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

$$D_{ij} = \sum_l A_{il}(BC)_{lj} = \sum_l A_{il} \left(\sum_k B_{lk} C_{kj} \right) \quad (19)$$

拆括号，得

$$D_{ij} = \sum_k \sum_l (A_{il} B_{lk} C_{kj}) \quad (20)$$

对 C_{kj} 进行合并同类项，得

$$D_{ij} = \sum_k \left(\sum_l A_{il} B_{lk} \right) C_{kj} \quad (21)$$

括号中恰好是 \mathbf{A} 乘以 \mathbf{B} 所得矩阵的矩阵元 $(AB)_{ik}$ 所以

$$D_{ij} = \sum_k (AB)_{ik} C_{kj} \quad (22)$$

即

$$\mathbf{D} = (\mathbf{AB})\mathbf{C} \quad (23)$$

证毕。

单位矩阵

单位矩阵就是对角线上的元素全为 1，非对角线上的元素全为 0 的方阵。通常记为通常记为 \mathbf{I} 。为了强调矩阵的维数 N ，也可记为 \mathbf{I}_N 。单位矩阵的矩阵元可用克罗内克 δ 函数（式 2^[97]）表示为

$$I_{ij} = \delta_{ij} \quad (24)$$

任何矩阵左乘或右乘单位矩阵，仍然得到矩阵本身。单位矩阵的转置仍为单位矩阵。

逆矩阵

记方阵 M 的逆矩阵为 M^{-1} , 且满足

$$M^{-1}M = I \quad (25)$$

其中 I 是单位矩阵. 也就是说, 任意一个矩阵(或列矢量) A 乘以矩阵 M 再乘以其逆矩阵 M^{-1} 仍然得到 A 本身.

虽然矩阵乘法一般不满足交换律, 但矩阵和对应的逆矩阵满足¹⁵, 即

$$MM^{-1} = M^{-1}M = I \quad (26)$$

逆矩阵 M^{-1} 所代表的线性变换就是 M 代表的线性变换的逆变换, 令 x 和 y 为列矢量, 如果有

$$y = Mx \quad (27)$$

那么我们在等式两边左乘 M^{-1} 再把等式左右互换, 则上式变为

$$x = M^{-1}y \quad (28)$$

要求逆矩阵, 一种简单直接但低效的方法就是先令 $y = (1, 0, \dots)^T$, 代入式3解线性方程组得 x , 将 x, y 代入式4可知 x 就是 M 的第一列, 再令 $y = (0, 1, 0, \dots)^T$, 解线性方程组可得 M 的第二列, 以此类推就可以得到完整的 M .

逆矩阵

逆矩阵

如果两个方阵的乘积是单位矩阵,

$$BA = I \quad (1)$$

那么 B 就叫做 A 的逆矩阵, 记为 A^{-1} . 从矢量空间的角度来看, 矩阵 A 把第一个矢量空间映射到第二个空间, 而 B 则可以看做把第二个空间的矢量逆映

¹⁵这个定理暂时不证

射到第一个空间. 这里的一个隐含要求是 \mathbf{A} 必须代表一一映射, 如果是多对一的映射, 将不存在反映射, 因为不存在代表一对多映射的矩阵. 一一映射要求 \mathbf{A} 的每一列都线性无关, 所以 \mathbf{A} 的行数必须大于等于列数. 另外显然一个矩阵最多只能有一个逆矩阵.

我们讨论逆矩阵时一般假设 \mathbf{A} 和 \mathbf{A}^{-1} 都是方阵¹⁶, 所以 \mathbf{A} 是一个 N 维方阵, 代表两个 N 维矢量空间的一一映射, 即每个空间中任何一个矢量在另一个空间中都能找到唯一对应的矢量. 同理, \mathbf{A}^{-1} 的性质也相同.

从以上的分析中易证, 如果 \mathbf{B} 是 \mathbf{A} 的逆矩阵, 那么 \mathbf{A} 必定也是 \mathbf{B} 的逆矩阵, 我们说 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 互逆, 即

$$\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I} \quad (2)$$

求逆矩阵

令 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 为 N 维列矢量, 如果有

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{y} \quad (3)$$

那么我们在等式两边左乘 \mathbf{A}^{-1} 得

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y} \quad (4)$$

要求逆矩阵, 一种简单直接但低效的方法就是先令 $\mathbf{y} = (1, 0, \dots)^T$, 代入式 3 解线性方程组得 x , 将 \mathbf{x}, \mathbf{y} 代入式 4 可知 x 就是 \mathbf{A} 的第一列, 再令 $\mathbf{y} = (0, 1, 0, \dots)^T$, 解线性方程组可得 \mathbf{A} 的第二列, 以此类推.

在一些实际问题中, 我们需要大量求解式 3 形式的方程组, 每个方程组都有同样的 \mathbf{A} 和不同的 y , 一个高效的做法是先求出 \mathbf{A}^{-1} , 这样解每个方程组就只需要做一次矩阵乘法 (式 4) 即可.

平面旋转矩阵

¹⁶以后如无特殊说明, 我们都使用这个规定.

预备知识 平面旋转变换^[108], 矩阵^[110]

平面旋转变换^[108] 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, 能更好地帮助理解和记忆.

已知单位矢量 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 逆时针旋转 θ 为

$$\mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \quad \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (1)$$

而任何矢量 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ 都可以表示成 $\hat{\mathbf{x}}$ 和 $\hat{\mathbf{y}}$ 的线性组合 $x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 所以

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_2 \left[x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] &= x_1 \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \mathbf{R}_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= x_1 \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2)$$

所以旋转矩阵为

$$\mathbf{R}_2 = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3)$$

这与平面旋转变换^[108] 得出的结果一致.

主动和被动理解

逆矩阵

我们既可以使用平面旋转变换^[108] 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, 也可以通过解方程求逆矩阵 (式 27). 但最方便的是, 由于 \mathbf{R}_2 是一个单位正交阵, 我们只需要把矩阵转置即可得到逆矩阵.

$$\mathbf{R}_2^{-1} = \mathbf{R}_2^T = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (4)$$

空间旋转矩阵

预备知识 平面旋转矩阵^[116]

类比平面旋转矩阵^[116]，空间旋转矩阵是三维坐标的旋转变换，所以应该是 3×3 的方阵。不同的是平面旋转变换只有一个自由度 θ ，而空间旋转变换除了转过的角度还需要考虑转轴的方向。如果直接从转轴和转动角度来定义该矩阵，矩阵比较复杂，这里从略。

若已经知道空间直角坐标系中三个单位正交矢量

$$\hat{\mathbf{x}} = (1, 0, 0)^T \quad \hat{\mathbf{y}} = (0, 1, 0)^T \quad \hat{\mathbf{z}} = (0, 0, 1)^T \quad (1)$$

经过三维旋转矩阵变换以后变为

$$(a_{11}, a_{21}, a_{31})^T \quad (a_{12}, a_{22}, a_{32})^T \quad (a_{13}, a_{23}, a_{33})^T \quad (2)$$

类比平面旋转矩阵^[116]

$$\mathbf{R}_3 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (3)$$

绕轴旋转矩阵

预备知识 空间旋转矩阵^[118]，绕轴旋转的线速度

结论

直角坐标系中，某点 $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ 以单位矢量 $\hat{\mathbf{A}} = (A_x, A_y, A_z)^T$ 为轴按右手定则转动 θ 角的得到的点 $\mathbf{r}' = (x', y', z')^T$ 可用矩阵乘法计算

$$\mathbf{r}' = \mathbf{R}_\theta \mathbf{r} \quad (1)$$

其中 \mathbf{R}_θ 为绕轴旋转矩阵

$$\mathbf{R}_\theta = \begin{pmatrix} aA_x^2 + c & aA_xA_y - sA_z & aA_xA_z + sA_y \\ aA_yA_x + sA_z & aA_y^2 + c & aA_yA_z - sA_x \\ aA_zA_x - sA_y & aA_zA_y + sA_x & aA_z^2 + c \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中

$$c = \cos \theta \quad s = \sin \theta \quad a = 1 - \cos \theta \quad (3)$$

推导

推导的思路是用 $\hat{\mathbf{A}}$, \mathbf{r} 和 θ 三个已知量经过数乘, 点乘^[94] 和叉乘^[99] 三种运算, 表示出旋转后的矢量 \mathbf{r}' , 再拆成三个分量, 即可得到线性变换, 进而写出矩阵. 注意该思路与推导平面旋转矩阵^[116] 的思路不一样.

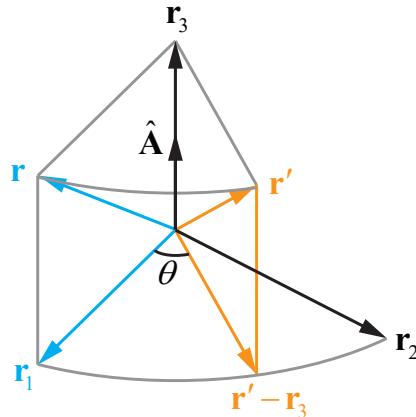


图 1: 绕轴旋转矩阵的推导

如图, \mathbf{r} 绕单位矢量 $\hat{\mathbf{A}}$ 旋转后得到 \mathbf{r}' . \mathbf{r} 在 $\hat{\mathbf{A}}$ 方向的分量为

$$\mathbf{r}_3 = (\hat{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{r})\hat{\mathbf{A}} \quad (4)$$

在与 $\hat{\mathbf{A}}$ 垂直方向的分量为

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} - \mathbf{r}_3 \quad (5)$$

为了构成一组正交基底, 令

$$\mathbf{r}_2 = \hat{\mathbf{A}} \times \mathbf{r}_1 \quad (6)$$

则 \mathbf{r}_2 相当于 \mathbf{r}_1 绕 $\hat{\mathbf{A}}$ 旋转 90° . 现在有了正交的 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ 就可以表示出 \mathbf{r}_1 绕 $\hat{\mathbf{A}}$ 旋转 θ 角后的结果

$$\mathbf{r}' - \mathbf{r}_3 = \mathbf{r}_1 \cos \theta + \mathbf{r}_2 \sin \theta \quad (7)$$

即

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r}_1 \cos \theta + \mathbf{r}_2 \sin \theta + \mathbf{r}_3 \quad (8)$$

将式 4 式 5 式 6 代入式 8, 即可求出 \mathbf{r}' 关于 $\hat{\mathbf{A}}, \mathbf{r}$ 和 θ 的矢量表达式. 把结果写成分量的形式, 化简可得到 x', y', z' 关于 x, y, z 的线性变换与系数矩阵^[110].

由旋转矩阵推导出匀速圆周运动的线速度

虽然这个公式有更简单的几何方法 (见绕轴旋转的线速度), 但是这种方法更偏数学一些, 也验证了旋转矩阵的正确性.

在无穷小的时间 t 内, 点 P 绕轴转过 θ 角, 则 $\theta = \omega t \rightarrow 0$, 此时有 $\sin \theta \rightarrow \theta$ 和 $\cos \theta \rightarrow 1$. 旋转矩阵变为

$$\mathbf{R}_\theta = \begin{pmatrix} 1 & -A_z \theta & A_y \theta \\ A_z \theta & 1 & -A_x \theta \\ -A_y \theta & A_x \theta & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

下面 \mathbf{R}_θ 乘以某点的列矢量, 得到变换后的坐标, 再减掉变换前的坐标, 得位移矢量 \mathbf{s}

$$\begin{aligned} \mathbf{s} &= \mathbf{v}t \\ &= \begin{pmatrix} 1 & -A_z \theta & A_y \theta \\ A_z \theta & 1 & -A_x \theta \\ -A_y \theta & A_x \theta & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ &= \theta \begin{pmatrix} 0 & -A_z & A_y \\ A_z & 0 & -A_x \\ -A_y & A_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ &= \theta \hat{\mathbf{A}} \times \mathbf{r} = (\boldsymbol{\omega}t) \times \mathbf{r} \end{aligned} \quad (10)$$

两边除以 t , 得 $\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ 这与绕轴转动的线速度中得出的结论一致.

第四章

多元微积分

偏导数

预备知识 导数^[38]

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 $z = \sin(y \cos x) + \cos^2 x$

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

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

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 $f(x, y)$ 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。

二元函数的极值

预备知识 导数与函数极值^[47]，偏导数^[122]，方向导数^[134]

类似一元函数，二元函数的极值与其偏导数密切相关。以下讨论中，我们假设在某区域内二元函数的一阶偏导处处存在（即函数曲面处处光滑）。如果二元函数 $f(x, y)$ 在某点 (x_i, y_i) 处对 x, y 的偏导数都为零，那么 (x_i, y_i) 就叫做函数 $f(x, y)$ 的驻点。根据式 9^[134]，驻点处各个方向的方向导数也都为零。

我们先来定义二元函数的极值点，以驻点为圆心在 xy 平面上作一个圆形区域，若当半径足够小时， $f(x_i, y_i)$ 是该圆形区域的最大值或最小值，那么该驻点就是极大值点或极小值点。与一元函数类似，驻点不一定是极值点。例如 $f(x, y) = xy$ 在坐标原点的两个一阶偏导都为零，但原点并不是极值点。为了判断驻点是不是极值点，也需要用到二阶偏导（假设驻点处的各个二阶偏导都存在）。如果满足

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)^2 > 0 \quad (1)$$

则驻点是极值点。如果 $\partial^2 f / \partial x^2$ 和 $\partial^2 f / \partial y^2$ 都大于零¹，则极值为极小值，若都小于零，则极值为极大值。

¹根据式 1，只需验证 $\partial^2 f / \partial x^2$ 或 $\partial^2 f / \partial y^2$ 中的任意一个大于零，另外一个就必定大于零。

证明

类比一元函数的证明，要证明二元函数的某点是极值点，就要证明该点的任意二阶方向导数都大于零或都小于零。令某方向为 $\hat{n} = \hat{x}\cos\theta + \hat{y}\sin\theta$ ，由式 9^[134] 得该方向的方向导数为

$$\left(\cos\theta \frac{\partial}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial}{\partial y} \right) f \quad (2)$$

再次求方向导数得二阶方向导数为

$$\left(\cos\theta \frac{\partial}{\partial x} + \sin\theta \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \cos^2\theta + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \sin\theta \cos\theta + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \sin^2\theta \quad (3)$$

如果你还不习惯看算符的平方，可以把上式的括号项平方看做两个括号项，依次作用在函数上。以极小值为例，令上式恒大于零，并除以 $\cos^2\theta$ 得

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \tan^2\theta + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \tan\theta + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} > 0 \quad (4)$$

上式左边是关于 $\tan\theta$ 的二次函数，若要恒大于零，则二次项系数要大于零，且判别式需小于零，立即可得式 1。同理可得极大值条件。

最小二乘法

预备知识 二元函数的极值^[123]

直线拟合

在许多情况下，我们需要将一组散点数据 x_i, y_i ($i = 1 \dots N$) 拟合成特定形式的函数曲线。其中最常见的情况之一是拟合一条直线，形式为 $y = ax + b$ 。例如给出（图 1），如何确定直线方程的两个最佳系数 a 和 b 呢？

我们可以通过方差来计算拟合的误差，方差越小则说明拟合得越好。

$$S_2 = \sum_{i=1}^N (ax_i + b - y_i)^2 \quad (1)$$

对于给定的 N 个 x_i, y_i , 方差是 a 和 b 的二元函数. 我们只需找到这个二元函数的最小值点即可. 由于函数处处光滑, 最小值点必定满足 $\partial S_2 / \partial a = \partial S_2 / \partial b = 0$. 将式 1 代入, 得到一个线性方程组.

$$\begin{cases} \left(\sum_i x_i^2 \right) a + \left(\sum_i x_i \right) b = \sum_i x_i y_i \\ \left(\sum_i x_i \right) a + N b = \sum_i y_i \end{cases} \quad (2)$$

我们来计算系数行列式, 如果能证明行列式恒大于零, 则方程组必有唯一解. 若令 \bar{x} 为 N 个 x_i 的平均值, 考虑到 x_i 互不相等, 容易证明

$$N \sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i \right)^2 = N \sum_i (x_i - \bar{x})^2 > 0 \quad (3)$$

证毕. 由于方差恒大于零, 可知其必定存在最小值, 所以系数的唯一解必定是方差函数的极小值点. 接下来解线性方程组即可得到系数 a, b . 将解出的 a, b 重新代入式 1 可以得出最小方差的值, 用于判断拟合结果的好坏.

多项式拟合

以二次多项式 $c_2 x^2 + c_1 x + c_0$ 为例, 方差为

$$S_2 = \sum_{i=1}^N (c_2 x_i^2 + c_1 x_i + c_0 - y_i)^2 \quad (4)$$

分别令方差对 c_2, c_1, c_0 的偏导为零, 得线性方程组

$$\begin{cases} \left(\sum_i x_i^4 \right) c_2 + \left(\sum_i x_i^3 \right) c_1 + \left(\sum_i x_i^2 \right) c_0 = \sum_i y_i x_i^2 \\ \left(\sum_i x_i^3 \right) c_2 + \left(\sum_i x_i^2 \right) c_1 + \left(\sum_i x_i \right) c_0 = \sum_i y_i x_i \\ \left(\sum_i x_i^2 \right) c_2 + \left(\sum_i x_i \right) c_1 + N c_0 = \sum_i y_i \end{cases} \quad (5)$$

观察系数矩阵可以看出, 每条斜线上 x_i 的指数相等, 且相邻斜线上 x_i 的指数依次递减. 按照此规律容易写出 N 次多项式拟合的方程组. 这里不证明系数行列式大于零, 但实际应用中方程组几乎都有唯一解.

简谐波拟合

若要拟合 $A \cos(x + \varphi_0) + C$ 形式的函数，可以先利用两角和公式把函数化为 $c_1 \cos x + c_2 \sin x + c_3$ 的等效形式（因为前者并不是待定系数的线性组合，得到的方程组也不是线性方程组），方差公式为

$$S_2 = \sum_i (c_1 \cos x_i + c_2 \sin x_i + c_3 - y_i)^2 \quad (6)$$

分别令方差对 c_1, c_2, c_3 的偏导为零，得线性方程组

$$\begin{cases} \left(\sum_i \cos^2 x_i \right) c_1 + \left(\sum_i \sin x_i \cos x_i \right) c_2 + \left(\sum_i \cos x_i \right) c_3 = \sum_i y_i \cos x_i \\ \left(\sum_i \sin x_i \cos x_i \right) c_1 + \left(\sum_i \sin^2 x_i \right) c_2 + \left(\sum_i \sin x_i \right) c_3 = \sum_i y_i \sin x_i \\ \left(\sum_i \cos x_i \right) c_1 + \left(\sum_i \sin x_i \right) c_2 + N c_3 = \sum_i y_i \end{cases} \quad (7)$$

实际应用中，该方程组同样几乎都有唯一解.

全微分

预备知识 偏导数^[122]

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²，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

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

²光滑的数学定义是，各一阶偏导数在区域内连续。

令坐标增量为 $\Delta x \equiv x - x_0$, $\Delta y \equiv y - y_0$, $\Delta z \equiv z - z_0$, 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^[49] $\Delta y \approx df/dx \cdot \Delta x$, 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

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

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^[128]

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³, 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

³ “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⁴，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）。

全导数

预备知识 全微分^[126]

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。

⁴ 见偏导数^[122] 中的式 1

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^[126]

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

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

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

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

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

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^[38]

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（最后一种仅限于表示对时间的求导）

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad \frac{d}{dt} \mathbf{v} \quad \dot{\mathbf{v}} \quad (1)$$

其定义为（类比导数^[38] 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)^[169], 匀速圆周运动的速度^[170] 和加速度^[172]

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)⁵

$$\frac{d}{dt}[c_1 \mathbf{v}_1(t) + c_2 \mathbf{v}_2(t) + \dots] = c_1 \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} + c_2 \frac{d\mathbf{v}_2}{dt} \dots \quad (4)$$

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^[139]”.

应用举例 匀速圆周运动的速度^[170] 和加速度^[172] (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.

$$\frac{d}{dt}[f(t)\mathbf{v}(t)] = \frac{df}{dt}\mathbf{v} + f \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (6)$$

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{v}(t)] = \frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (7)$$

$$\frac{d}{dt}[\mathbf{u}(t) \times \mathbf{v}(t)] = \frac{d\mathbf{u}}{dt} \times \mathbf{v} + \mathbf{u} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (8)$$

⁵以下法则虽然以导数为例, 但对偏导也同样适用.

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^[40] 有

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) &= \frac{d}{dt}(u_x v_x + u_y v_y + u_z v_z) \\
 &= \left(\frac{du_x}{dt} v_x + u_x \frac{dv_x}{dt} \right) + \left(\frac{du_y}{dt} v_y + u_y \frac{dv_y}{dt} \right) + \left(\frac{du_z}{dt} v_z + u_z \frac{dv_z}{dt} \right) \quad (9) \\
 &= \left(\frac{du_x}{dt} v_x + \frac{du_y}{dt} v_y + \frac{du_z}{dt} v_z \right) + \left(u_x \frac{dv_x}{dt} + u_y \frac{dv_y}{dt} + u_z \frac{dv_z}{dt} \right) \\
 &= \frac{d\mathbf{u}}{dt} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{u} \cdot \frac{d\mathbf{v}}{dt}
 \end{aligned}$$

应用举例 动量定理^[213], 角动量定理 (单个质点) ^[186]

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数.

与标量函数的偏导^[122] 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.

一元矢量函数的积分

预备知识 矢量的导数^[130]

单变量不定积分

令 $\mathbf{f}(t)$ 为只有一个自变量的矢量函数, 则与标量函数类似, 定义其不定积分为求导的逆运算. 也就是说, 若能找到 $\mathbf{F}(t)$, 使得 $\mathbf{F}(t)$ 对 t 求导就是 $\mathbf{f}(t)$, 那么 $\mathbf{F}(t) + \mathbf{C}$ (\mathbf{C} 为任意常矢量) 就是定积分的结果, 都是 $\mathbf{f}(t)$ 的原函数.

在直角坐标系中, 我们已经知道对矢量函数 $\mathbf{F}(t)$ 求导就是对它的每个分量函数分别求导, 即

$$\mathbf{F}'(t) = \mathbf{f}(t) \quad (1)$$

$$F'_x(t) = f_x(t) \quad F'_y(t) = f_y(t) \quad F'_z(t) = f_z(t) \quad (2)$$

考虑到标量函数的不定积分是标量函数求导的逆运算，所以对 $\mathbf{f}(t)$ 不定积分，只需对它的各个分量分别进行不定积分即可。注意每个分量函数在不定积分后都会出现一个待定常数，三个分量中的待定常数相加就得到一个待定常矢量 \mathbf{C} 。

$$\begin{aligned} \int \mathbf{f}(t) dt &= \hat{\mathbf{x}} \int f_x(t) dt + \hat{\mathbf{y}} \int f_y(t) dt + \hat{\mathbf{z}} \int f_z(t) dt \\ &= [F_x(t) + C_x] \hat{\mathbf{x}} + [F_y(t) + C_y] \hat{\mathbf{y}} + [F_z(t) + C_z] \hat{\mathbf{z}} \\ &= \mathbf{F}(t) + \mathbf{C} \end{aligned} \quad (3)$$

根据式 1 式 2，显然有 $[\mathbf{F}(t) + \mathbf{C}]' = \mathbf{f}(t)$ 。

单变量定积分

类比一元标量函数定积分^[67]的定义，要计算一元矢量函数 $\mathbf{f}(t)$ 从 t_1 到 t_2 的定积分，就先把区间 $[t_1, t_2]$ 分为 N 个小区间，长度分别为 Δt_i ，且令 t_i 为第 i 个区间内的任意一点。当我们取极限令所有区间长度 Δt_i 都趋近于 0（这时 $N \rightarrow \infty$ ）时，如果以下极限存在，得到的矢量就是定积分的结果。

$$\int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(t) dt = \lim_{\Delta t_i \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N \mathbf{f}(t_i) \Delta t_i \quad (4)$$

唯一与标量函数的定积分不同的是，这里的求和是矢量求和。但在直角坐标系中，我们可以把上式对矢量的求和表示成对各个分量分别求和，而每个分量的极限就是一个标量定积分。

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(t) dt &= \hat{\mathbf{x}} \lim_{\Delta t_i \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N f_x(t_i) \Delta t_i + \hat{\mathbf{y}} \lim_{\Delta t_i \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N f_y(t_i) \Delta t_i + \hat{\mathbf{z}} \lim_{\Delta t_i \rightarrow 0} \sum_{i=0}^N f_z(t_i) \Delta t_i \\ &= \hat{\mathbf{x}} \int_{t_1}^{t_2} f_x(t) dt + \hat{\mathbf{y}} \int_{t_1}^{t_2} f_y(t) dt + \hat{\mathbf{z}} \int_{t_1}^{t_2} f_z(t) dt \end{aligned} \quad (5)$$

所以 $\mathbf{f}(t)$ 的定积分就是把直角坐标的各个分量分别进行定积分。现在对三个定积分分别运用牛顿—莱布尼兹公式^[71]， $\mathbf{f}(t)$ 的原函数为 $\mathbf{F}(t)$ ，各分量的原函数为 $F_x(t), F_y(t), F_z(t)$ ，则上式等于

$$\begin{aligned} \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{f}(t) dt &= \hat{\mathbf{x}}[F_x(t_2) - F_x(t_1)] + \hat{\mathbf{y}}[F_y(t_2) - F_y(t_1)] + \hat{\mathbf{z}}[F_z(t_2) - F_z(t_1)] \\ &= \mathbf{F}(t_2) - \mathbf{F}(t_1) \end{aligned} \quad (6)$$

这就是矢量函数的牛顿—莱布尼兹公式.

例 1 加速度、速度和位移的积分关系

由于质点的速度一时间函数 $\mathbf{v}(t)$ 是位移一时间函数 $\mathbf{r}(t)$ 的导函数, 后者就是前者的原函数. 所以根据牛顿—莱布尼兹公式式 6 有

$$\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t_0) = \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{v}(t) dt \quad (7)$$

即

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}(t_0) + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{v}(t) dt \quad (8)$$

这是一维情况式 5^[167] 的拓展.

同理, 由于质点的加速度函数 $\mathbf{a}(t)$ 是速度函数 $\mathbf{v}(t)$ 的导函数, 后者可以通过前者定积分得到

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(t_0) + \int_{t_1}^{t_2} \mathbf{a}(t) dt \quad (9)$$

应用举例 匀加速运动^[175]

方向导数

预备知识 全微分^[126], 点乘^[94], 正交归一基^[97]

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^[166], 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.

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

$$\frac{df}{dn} \equiv \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{f(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{n}}\Delta s) - f(\mathbf{r})}{\Delta s} = \frac{df}{ds} \quad (1)$$

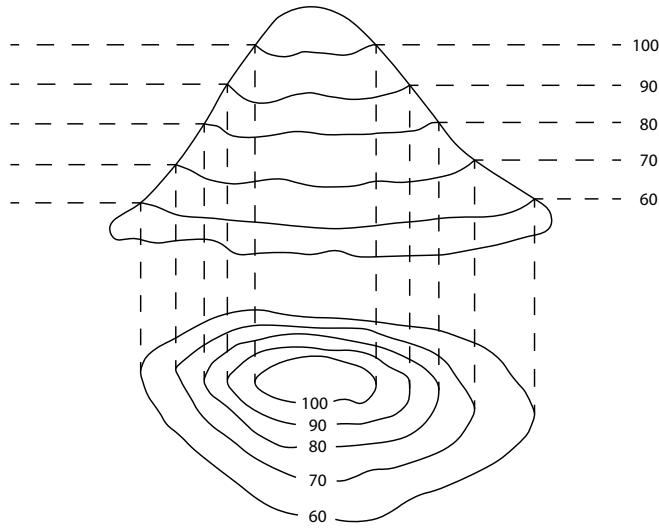


图 1: 等高线

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^[126]”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^[97] $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 写成矢量点乘^[94] 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

$$\nabla = \hat{\mathbf{x}}_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \hat{\mathbf{x}}_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \dots \hat{\mathbf{x}}_n \frac{\partial}{\partial x_N} \quad (12)$$

重积分

预备知识 定积分^[67]

面积分

面积分也叫二重积分，可以看做一元函数定积分^[67]的一种拓展。从几何上来理解，如果后者是计算一定区间内被积函数曲线与坐标轴之间的面积，那么前者就是计算一定二维区域内被积函数曲面与坐标轴平面之间的体积。

例 1 曲面下的体积

二元函数 $f(x, y) = x^2 + y^2$ ，可以在直角坐标系 xyz 代表一个抛物面。现

在我们指定一个二维区域，是由 $y_1(x) = -x$, $y_2(x) = x$ 以及 $x = 1$ 所围成的三角形。现在我们以这个三角形为底取一个无限高的三棱柱，求三棱柱被 $f(x, y)$ 截去的有限部分的体积 V .

与定积分的思想一样，我们可以把三角形区域划分成许多更小的区域，每一个区域都对应一个被曲面截取的小柱体，由于我们使用直角坐标系，我们不妨沿 x 和 y 方向划分出许多小矩形，用 (i, j) 给它们编号，每个矩形的面积分别为 $\Delta x_i \Delta y_j$ ，小柱体的体积近似用底乘以高计算得 $\Delta V_{ij} = f(x_i, y_i) \Delta x_i \Delta y_j$ ，其中 x_i, y_i 分别为区间 $\Delta x_i, \Delta y_i$ 内任意一点。所以总体积就可以用极限表示为

$$V = \lim_{\substack{\Delta x_i \rightarrow 0 \\ \Delta y_j \rightarrow 0}} \sum_{i,j} f(x_i, y_j) \Delta x_i \Delta y_j \quad (1)$$

这是一个双重极限，类比定积分的定义，用面积分简写上式记为

$$V = \iint_S f(x, y) \, dx \, dy \quad (2)$$

其中 S 代表以上定义的三角形积分区域。

那如何计算这个积分呢？我们可以先计算任意 x 处的横截面积 $S(x)$ 。这个横截面与曲面相交的曲线方程为 $f(x, y)$ （把 x 看做常数， y 看做变量），横截面积为

$$S(x) = \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x, y) \, dy = \frac{1}{3}[y_2^3(x) - y_1^3(x)] + x^2[y_2(x) - y_1(x)] = \frac{8}{3}x^3 \quad (3)$$

现在根据一元函数定积分的定义，体积等于横截面积 $S(x)$ 在 x 方向的定积分

$$V = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i S(x_i) \Delta x_i = \int_0^1 S(x) \, dx = \frac{2}{3}(1^4 - 0^4) = \frac{2}{3} \quad (4)$$

要从定义上证明这种方法可行，我们可以把式 1 写成

$$V = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i \left[\lim_{\Delta y_j \rightarrow 0} \sum_j f(x_i, y_j) \Delta y_j \right] \Delta x_i \quad (5)$$

可见中括号内的极限就是定积分式 3，外面的极限就是定积分式 4。把上式记为一条积分式就是

$$V = \int_0^1 \left[\int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x, y) \, dy \right] \, dx \quad (6)$$

另一种等效的书写方式是，把 $\int dx, \int dy$ 看成像 $d/dx, d/dy$ 一样的整体算符，写在被积函数前面，使公式看起来更为简洁

$$V = \int_0^1 dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy f(x, y) \quad (7)$$

总结起来，要在直角坐标系中计算二重积分，就先选取一个变量 y （也可以是 x ）进行定积分，积分的上下限分别是二重积分区域 S 的两条边界线 $y_1(x)$ 和 $y_2(x)$ 。积分的结果中只含有 x ，这时再对 x 进行定积分即可。

体积分

体积分也叫三重积分，类比面积分不难理解其概念

例 2 不均匀物体的质量

一个几何体由 $x = 0, y = 0, z = 0$ 三个平面和 $x + y + z = 1$ 平面包围而成，其密度为 $f(x, y, z) = x + y + z$ ，求几何体的总质量 M 。

用定积分的思想，我们可以延三个方向把几何体划分成许多小块 (i, j, k) ，每个小块的长宽高分别为 $\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k$ 。 x_i, y_j, z_k 分别为区间 $\Delta x_i, \Delta y_j, \Delta z_k$ 中的任意一点。物体的总质量可以用极限表示为

$$V = \lim_{\substack{\Delta x_i \rightarrow 0 \\ \Delta y_j \rightarrow 0 \\ \Delta z_k \rightarrow 0}} \sum_{i,j,k} f(x_i, y_j, z_k) \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \quad (8)$$

用三重积分可以把这个三重极限表示为

$$V = \iiint_V f(x, y, z) dx dy dz \quad (9)$$

其中 V 表示几何体所占的空间。我们先把密度函数 $f(x, y, z)$ 沿 z 方向积分得到“面密度” $\sigma(x, y)$ （可以想象把几何体在 z 方向压成一个薄板后所具有的面密度关于 x, y 的函数），积分上下限分别为 $z_2(x, y) = 1 - x - y$ 和 $z_1(x, y) = 0$

$$\begin{aligned} \sigma(x, y) &= \int_0^{1-x-y} (x + y + z) dz \\ &= (x + y)[z_2(x, y) - z_1(x, y)] + \frac{1}{2}[z_2^2(x, y) - z_1^2(x, y)] \\ &= (x + y)(1 - x - y) + \frac{1}{2}(1 - x - y)^2 \\ &= \frac{1}{2}(1 - x^2 - y^2) - xy \end{aligned} \quad (10)$$

再沿 y 方向积分得到“线密度” $\lambda(x)$ (可以想象把薄板沿 y 方向压缩成一条线后所具有的线密度关于 x 的函数), 积分的上下限分别为 $y_2(x) = 1 - x$ 和 $y_1(x) = 0$

$$\begin{aligned}\lambda(x) &= \int_0^{1-x} \sigma(x, y) dy \\ &= \frac{1}{2}(1-x^2)(1-x) - \frac{1}{6}(1-x)^3 - \frac{1}{2}x(1-x)^2 \\ &= \frac{x^3}{6} - \frac{x}{2} + \frac{1}{3}\end{aligned}\quad (11)$$

最后把线密度从 1 和 0 积分得到总质量

$$M = \int_0^1 \lambda(x) dx = \left[\frac{1}{24}x^4 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{3}x \right]_0^1 = \frac{1}{8} \quad (12)$$

与二重积分类似, 要从定义上来证明这种算法可行, 就把式 8 改写成

$$M = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i \left[\lim_{\Delta y_j \rightarrow 0} \sum_j \left(\lim_{\Delta z_k \rightarrow 0} \sum_k f(x_i, y_j, z_k) \Delta z_k \right) \Delta y_j \right] \Delta x_i \quad (13)$$

可见从内到外的三个极限分别为三个变量的一元定积分, 即

$$M = \int_0^1 dx \int_0^{1-x} dy \int_0^{1-x-y} dz f(x, y, z) \quad (14)$$

极坐标系中单位矢量的偏导

预备知识 极坐标系^[9], 矢量的偏导^[130]

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{x} , 令其逆时针旋转 $\pi/2$ 的矢量为 \hat{y} , 则

$$\hat{r} = \cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y} \quad (2)$$

$$\hat{\theta} = \cos(\theta + \pi/2) \hat{x} + \sin(\theta + \pi/2) \hat{y} = -\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{y} \quad (3)$$

所以

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{r}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{r}}{\partial \theta} = -\sin \theta \hat{x} + \cos \theta \hat{y} = \hat{\theta} \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\cos \theta \hat{x} - \sin \theta \hat{y} = -\hat{r} \end{cases} \quad (4)$$

事实上, 由于 \hat{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

$$\frac{d\hat{\theta}}{d\theta} = -\hat{r} \quad \frac{d\hat{r}}{d\theta} = \hat{\theta} \quad (5)$$

正交曲线坐标系

预备知识 柱坐标系^[11], 球坐标系^[12], 矢量点乘^[94], 矢量的导数 求导法则^[130]

柱坐标系

我们先来分析柱坐标系⁶, 位置矢量 \hat{r} 在直角坐标系中展开为

$$\mathbf{r}(r, \theta, z) = r \cos \theta \hat{x} + r \sin \theta \hat{y} + z \hat{z} \quad (1)$$

柱坐标系中三个单位矢量 $\hat{r}, \hat{\theta}, \hat{z}$ 的方向被定义为每个坐标增加时 \mathbf{r} 增加的方向, 即以下偏导数的方向

$$\begin{cases} \partial \mathbf{r} / \partial r = \cos \theta \hat{x} + \sin \theta \hat{y} \\ \partial \mathbf{r} / \partial \theta = -r \sin \theta \hat{x} + r \cos \theta \hat{y} \\ \partial \mathbf{r} / \partial z = \hat{z} \end{cases} \quad (2)$$

⁶由于极坐标系可以看做柱坐标系 $z = 0$ 的情况, 我们不单独讨论

将这三个矢量归一化，就得到三个单位矢量

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

可见柱坐标系和直角坐标系中的 $\hat{\mathbf{z}}$ 相同，而 $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}$ 分别是 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 绕 z 轴逆时针旋转 θ 角所得。所以尽管柱坐标系中的三个单位矢量的方向取决于坐标，但它们始终两两垂直。

我们把单位矢量始终保持两两垂直的坐标系叫做正交曲线坐标系，或简称为曲线坐标系。我们熟知的直角坐标系显然就是一个正交曲线坐标系，稍后我们会看到球坐标系也是正交曲线坐标系。

现在我们可以将式 1 和式 2 用柱坐标中的三个单位矢量来表示。

$$\mathbf{r} = r \hat{\mathbf{r}} + z \hat{\mathbf{z}} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} = \hat{\mathbf{r}} \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = r \hat{\boldsymbol{\theta}} \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial z} = \hat{\mathbf{z}} \quad (5)$$

与极坐标的情况^[139]类似，将式 3 对 θ 求偏导可以得到单位矢量的偏导

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}} \quad \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta} = -\hat{\mathbf{r}} \quad \frac{\partial \hat{\mathbf{z}}}{\partial \theta} = \mathbf{0} \quad (6)$$

根据式 5 和矢量函数的全微分，柱坐标系中一段微小位移可记为

$$d\mathbf{r} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} dr + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial z} dz = dr \hat{\mathbf{r}} + r d\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} + dz \hat{\mathbf{z}} \quad (7)$$

球坐标系

球坐标系中，位置矢量可以表示为

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

同样，球坐标系的三个单位矢量由三个坐标增加的方向确定

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \\ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = r \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + r \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} - r \sin \theta \hat{\mathbf{z}} \\ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = -r \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{x}} + r \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{y}} \end{cases} \quad (9)$$

归一化得三个单位矢量为

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{r}} = \sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\theta} = \cos \theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \sin \phi \hat{\mathbf{y}} - \sin \theta \hat{\mathbf{z}} \\ \hat{\phi} = -\sin \phi \hat{\mathbf{x}} + \cos \phi \hat{\mathbf{y}} \end{cases} \quad (10)$$

不难验证这三个单位矢量两两间点乘为零，即两两垂直，所以球坐标系也属于正交曲线坐标系。对比式 9 与式 10，有

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} = \hat{\mathbf{r}} \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = r \hat{\theta} \quad \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = r \sin \theta \hat{\phi} \quad (11)$$

所以位置矢量的微分可以表示为

$$d\mathbf{r} = dr \hat{\mathbf{r}} + r d\theta \hat{\theta} + r \sin \theta d\phi \hat{\phi} \quad (12)$$

曲线坐标系中的重积分

预备知识 重积分^[136]，正交曲线坐标系^[140]

在计算一些多重积分时，选取合适的坐标系往往可以大大简化问题。

极坐标系中的二重积分

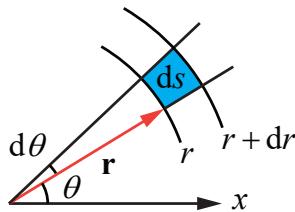


图 1: 极坐标中的面积元

我们来看如何在极坐标系中进行二重积分。我们先把积分区域划分为无数个小面元，点 \mathbf{r} 处面元的形状如图 1 所示，即把两个坐标 r, θ 坐标分别在原来的基础上增加一个微小值，并围成一块小区域。由于 $dr, d\theta$ 都是无穷小，该面元的形状趋近于长方形，其面积为两边长相乘

$$ds = dr \cdot r d\theta = r dr d\theta \quad (1)$$

类比例 1^[136], 我们可以将 $f(r, \theta)$ 的面积分记为

$$\iint_{\mathcal{S}} f(r, \theta) r \, dr \, d\theta = \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \int_{r_1(\theta)}^{r_2(\theta)} dr \, r f(r, \theta) \quad (2)$$

其中 $r_1(\theta)$ 与 $r_2(\theta)$ 是区域 \mathcal{S} 的两条边界 (类比式 7 中的 $y_1(x), y_2(x)$)

例 1

求 $f(r, \theta) = ar$ 在内外半径为 R_1, R_2 的圆环区域的面积分.

先来看积分上下限, 对于圆环区域, 显然有 $r_1(\theta) = R_1, r_2(\theta) = R_2, \theta_1 = 0, \theta_2 = 2\pi$. 直接使用式 2 得

$$\begin{aligned} \iint_{\mathcal{S}} f(r, \theta) r \, dr \, d\theta &= \int_0^{2\pi} \left[\int_{R_1}^{R_2} ar^2 \, dr \right] d\theta = \int_0^{2\pi} \frac{a}{3} (R_2^3 - R_1^3) \, d\theta \\ &= \frac{2\pi a}{3} (R_2^3 - R_1^3) \end{aligned} \quad (3)$$

如果使用直角坐标系计算该积分, 过程将会变得十分复杂.

曲线坐标系中的体积分

在曲线坐标系中, 令

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i} \equiv f_i(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{x}}_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4)$$

则位矢的全微分为

$$d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^3 f_i(\mathbf{r}) dx_i \hat{\mathbf{x}}_i \quad (5)$$

所以空间中的一个体积元 (每个 x_i 都分别增加 dx_i 所围成的长方体) 可以表示为

$$dV = f_1(\mathbf{r}) f_2(\mathbf{r}) f_3(\mathbf{r}) dx_1 dx_2 dx_3 \quad (6)$$

这是因为根据式 5, 单独将坐标 x_i 增加 dx_i 会导致 \mathbf{r} 在 $\hat{\mathbf{x}}_i$ 方向增加 $f_i(\mathbf{r}) dx_i$, 这相当于长方体在 $\hat{\mathbf{x}}_i$ 方向的边长, 而长方体的体积等于三条边长之积. 为了方便书写我们以后将 $dx_1 dx_2 dx_3$ 记为 d^3x 或 d^3r .

我们已知直角坐标系中 $\partial \mathbf{r} / \partial x_i = 1$, 所以体积元为 $d^3r = dx dy dz$. 对于柱坐标系 (图 2 左), 由式 5^[140] 得体积元为

$$dV = dr \cdot r \, d\theta \cdot dz = r \, dr \, d\theta \, dz \quad (7)$$

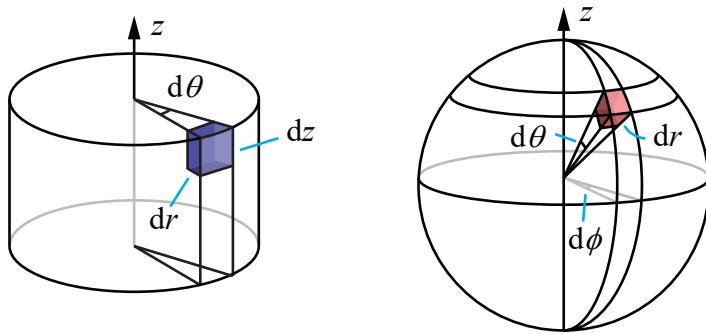


图 2: 柱坐标 (左) 和球坐标 (右) 中的体积元

类似地, 对于球坐标系 (图 2 右), 由式 11^[140] 得体积元为

$$dV = dr \cdot r \, d\theta \cdot r \sin \theta \, d\phi = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \quad (8)$$

例 2 球体的体积

在例 4^[67] 中我们用一元函数的定积分得到了球体的体积, 现在我们也可以直接在球坐标中由体积分得到.

$$\begin{aligned} V &= \int 1 \, d^3r = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^R r^2 \, dr \\ &= 2\pi \cdot 2 \cdot \frac{1}{3} R^3 = \frac{4}{3}\pi R^3 \end{aligned} \quad (9)$$

矢量场

预备知识 球坐标系的定义^[12], 矢量的求导法则^[130]

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, 它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^[97] 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^[12] 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^[130] 进行。

应用举例 力场^[181]

拓展阅读 梯度^[149], 散度^[154], 旋度

线积分

预备知识 功 功率^[178], 定积分^[67]

在“功 功率”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表示为⁷ $x(t), y(t), z(t)$ ，则曲线上任意一点都唯一对应一个 t 值。根据微分关系，当 t 增加 dt 时，曲线上的一小段位移矢量 $d\mathbf{r} = (dx, dy, dz)$ 中

$$dx = x'(t) dt \quad dy = y'(t) dt \quad dz = z'(t) dt \quad (1)$$

⁷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。

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⁸ 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

$$\int F_{x_i}(\mathbf{r}) dx_i = \int_a^b F_{x_i}[\mathbf{r}(t)] x'_i(t) dt \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4)$$

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.

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

$$W = \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \int_0^\pi \alpha a(1 - \cos t) \cdot a \sin t dt + \int_0^\pi \alpha a \sin t \cdot a \cos t dt \quad (6)$$

⁸为了书写简洁, 这里定义 $x_1 \equiv x, x_2 \equiv y, x_3 \equiv z$.

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

$$\int_0^\pi \alpha a^2 \sin t \, dt = 2\alpha a^2 \quad (7)$$

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 $x(t) = t$, $y(t) = 0$, $x \in [0, 2a]$ 。代入式 4 得做功为

$$W = \int_0^{2a} \alpha x \, dx = 2\alpha a^2 \quad (8)$$

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^[149]

曲面积分 通量

预备知识 矢量场^[144], **二重积分**^[136]

我们先来看一个例子

例 1 匀速水流场的流量

水流中各点的速度可以看做一个矢量场 $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ ，假设 $\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mathbf{v}_0$ 是一个常矢量。在矢量场中取一个平面，平面的法向量与 \mathbf{v}_0 的夹角为 θ ，在平面上选一个面积为 S 的区域，求单位时间通过该区域的水流的体积。

先来考虑 $\theta = 0$ 的情况，在 Δt 时间内，流过区域的水是一个柱体，其底面积为 S ，高为 $v_0 \Delta t$ ，所以体积为 $v_0 S \Delta t$ ，所以单位时间的体积等于流速乘以面积 $v_0 S$ 。

我们再来考虑 $\theta \neq 0$ 的情况， Δt 时间内流过区域的水是一个斜柱体，由图 1 可知其体积等于横截面积 $S \cos \theta$ 乘以斜边长度 $v_0 \Delta t$ 即 $V = v_0 S \cos \theta \Delta t$ ，所以单位时间流过的体积为 $v_0 S \cos \theta$ 。可见随着 θ 增大，流量变小，直到 $\theta = \pi/2$ 时流量为 0。

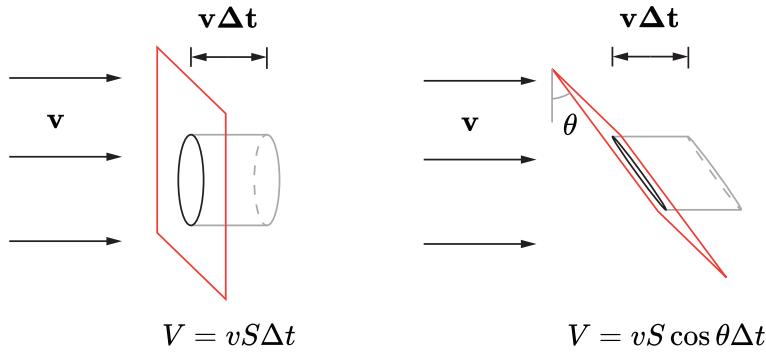


图 1: 匀速水流场的流量

现在试想速度场 $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ 不是常矢量，且有限的平面改为有限的曲面，要计算单位时间流过曲面的体积，我们可以先将曲面划分成无穷多个小曲面，每个曲面上的流速看做常矢量，再按照上述的办法计算并求和即可。

现在我们来定义一个矢量场在一个曲面上的曲面积分⁹（或通量）。假设矢量场与曲面都处处光滑，令矢量场为 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ ，给曲面定义一个正方向，并将曲面划分为许多面积为 ΔS_i 的小面元，令其法向量为 $\hat{\mathbf{n}}_i$ （与曲面正方向同侧），则一块面元可以表示为 $\Delta \mathbf{S}_i = \Delta S_i \hat{\mathbf{n}}_i$ 。当面元很小时可以假设其内部的矢量场为常矢量 $\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)$ ，则面积分被定义为

$$\int \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} = \lim_{\Delta S_i \rightarrow 0} \sum_i \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{S}_i \quad (1)$$

直角坐标系中的曲面积分

直角坐标系中的曲面可以表示为 $f(x, y, z) = 0$ 其法向量 $\hat{\mathbf{n}}(x, y, z)$ 等于 $\pm \nabla f(x, y, z)$ 归一化。令矢量场为 $\mathbf{F}(x, y, z)$ ，应如何具体计算曲面积分呢？

以下我们来讨论曲面可以表示为 $z = g(x, y)$ 的情况¹⁰。将曲面沿 x, y 方向划分成许多面元，使每个面元在 x, y 平面上的投影都是一个小长方形，面积为 $\Delta x_i, \Delta y_j$ ，面元上任意一点的坐标为 $[x_i, y_j, g(x_i, y_j)]$ 。面元面积与投影面积的关系为 $\Delta S_{ij} \cos \theta = \Delta x_i \Delta y_j$ ，其中 θ 是面元的法向量与 z 轴的夹角，所以 $\cos \theta = \hat{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{z}} = n_z$ 。所以，矢量场在每个面元上的通量为

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_{ij}) \cdot \Delta \mathbf{S}_{ij} = \left(\frac{n_x}{n_z} F_x + \frac{n_y}{n_z} F_y + F_z \right) \Delta x_i \Delta y_j \quad (2)$$

⁹简称面积分，这时需要通过语境与“二重积分^[136]”区分开。

¹⁰如果不能表示为 $z = g(x, y)$ ，但可以表示为 $x = g(y, z)$ 或 $y = g(x, z)$ ，以下过程也类似。

其中 $\hat{\mathbf{n}}$, \mathbf{F} 的个分量在 $[x_i, y_j, g(x_i, y_j)]$ 处取值.

由式 1 的定义, 曲面积分为

$$\begin{aligned} \int \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} &= \lim_{\substack{\Delta x_i \rightarrow 0 \\ \Delta y_i \rightarrow 0}} \sum_{ij} \mathbf{F}(\mathbf{r}_{ij}) \cdot \Delta \mathbf{S}_{ij} \\ &= \iint \frac{n_x}{n_z} F_x \, dx \, dy + \iint \frac{n_y}{n_z} F_y \, dx \, dy + \iint F_z \, dx \, dy \end{aligned} \quad (3)$$

这样, 我们就把曲面积分转换成了三个二重积分. 这三个二重积分分别等于矢量场的三个分量对曲面通量的贡献. 特殊地, 若曲面方程可以记为 $z = g_1(x, y)$, $x = g_2(y, z)$, $y = g_3(x, z)$ 中的任意一种形式, 我们也可以将曲面积分记为

$$\int \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} = \iint F_x \, dy \, dz + \iint F_y \, dx \, dz + \iint F_z \, dx \, dy \quad (4)$$

例 2

求场 $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$ 在曲面 (正方向向上) $z = x^2 + y^2$ ($x, y \in [-1, 1]$) 上的通量.

我们先求曲面的法向量, 令 $f(x, y, z) = x^2 + y^2 - z$, 则法向量的方向为 $\nabla f = (2x, 2y, -1)$ 由于曲面的正方向向上, 我们将 ∇f 取相反数然后归一化得到法向量

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{-2x}{\sqrt{4x^2 + 4y^2 + 1}} \hat{\mathbf{x}} + \frac{-2y}{\sqrt{4x^2 + 4y^2 + 1}} \hat{\mathbf{y}} + \frac{1}{\sqrt{4x^2 + 4y^2 + 1}} \hat{\mathbf{z}} \quad (5)$$

将上式和 $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ 代入式 3 得

$$\begin{aligned} \int \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{S} &= - \iint 2x^2 \, dx \, dy - \iint 2y^2 \, dx \, dy + \iint (x^2 + y^2) \, dx \, dy \\ &= - \frac{4}{3} x^3 \Big|_{-1}^1 - \frac{4}{3} y^3 \Big|_{-1}^1 + \frac{2}{3} x^3 \Big|_{-1}^1 + \frac{2}{3} y^3 \Big|_{-1}^1 = -\frac{8}{3} \end{aligned} \quad (6)$$

梯度 梯度定理

预备知识 方向导数^[134]

在方向导数^[134] 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¹¹。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^[97]，现在来看全微分^[126] 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^[94] 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^[38] 和微分^[49] 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^[126]” 式 6）记为矢量的形式

$$\Delta f \approx \nabla f \cdot \Delta r \quad (6)$$

¹¹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 正交曲线坐标系^[140]

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 写为

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial r} \mathrm{d}r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \cdot r \mathrm{d}\theta \quad (10)$$

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 (式 7^[140]) 与函数 $f(r, \theta, z)$ 的全微分可以分别表示为

$$\mathrm{d}\mathbf{r} = \mathrm{d}r \hat{\mathbf{r}} + r \mathrm{d}\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} + \mathrm{d}z \hat{\mathbf{z}} \quad (12)$$

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial r} \mathrm{d}r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \cdot r \mathrm{d}\theta + \frac{\partial f}{\partial z} \mathrm{d}z \quad (13)$$

所以柱坐标中的梯度算符为

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \quad (14)$$

球坐标也类似，球坐标中的微位移（式 12^[140]）与 $f(r, \theta, \phi)$ 的全微分可以分别表示为

$$d\mathbf{r} = dr \hat{\mathbf{r}} + r d\theta \hat{\theta} + r \sin \theta d\phi \hat{\phi} \quad (15)$$

$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \cdot r d\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi} \cdot r \sin \theta d\phi \quad (16)$$

所以球坐标中的梯度算符为

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (17)$$

梯度定理

预备知识 线积分^[145]，牛顿—莱布尼兹公式^[71]

梯度定理：一个标量函数 $f(\mathbf{r})$ 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

$$\int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_f} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_f) - f(\mathbf{r}_i) \quad (18)$$

梯度定理可以看做是牛顿—莱布尼兹公式^[71]

$$\int_a^b f'(x) dx = f(b) - f(a) \quad (19)$$

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 18 变为式 19）。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 18 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，

就可以把它们近似看做线段，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 $\mathbf{r}_{i0}, \mathbf{r}_{i1}$ ，则第 i 段的线积分可近似为

$$\int_{\mathbf{r}_{i0}}^{\mathbf{r}_{i1}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \approx \nabla f(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{r}_i \quad (20)$$

再利用全微分近似（式 6），上式等于

$$\int_{\mathbf{r}_{i0}}^{\mathbf{r}_{i1}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \approx f(\mathbf{r}_{i1}) - f(\mathbf{r}_{i0}) \quad (21)$$

将所有小段的线积分求和得到总的线积分得（注意 $\mathbf{r}_{i1} = \mathbf{r}_{(i+1)0}$ ）

$$\begin{aligned} \int_C \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} &= \sum_{i=1}^n \int_{\mathbf{r}_{i0}}^{\mathbf{r}_{i1}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \\ &\approx \sum_{i=1}^n [f(\mathbf{r}_{i1}) - f(\mathbf{r}_{i0})] = f(\mathbf{r}_f) - f(\mathbf{r}_i) \end{aligned} \quad (22)$$

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 18，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 $f(\mathbf{r})$ 。

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}_0) + \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (23)$$

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^[145]（分别把 x 和 y 作为线积分的参数）分别为

$$\int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}_1} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{x_0}^x f_x(x, y_0) dx + 0 = F_x(x, y_0) - F_x(x_0, y_0) \quad (24)$$

$$\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}} \nabla f(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{y_0}^y f_y(x, y) dy + 0 = F_y(x, y) - F_y(x, y_0) \quad (25)$$

代回式 23 得势函数为

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(x_0, y_0) + F_x(x, y_0) - F_x(x_0, y_0) + F_y(x, y) - F_y(x, y_0) \\ &= F_y(x, y) - F_y(x, y_0) + F_x(x, y_0) + C \end{aligned} \quad (26)$$

其中 C 为待定常数.

应用举例 势能^[181]

散度 散度定理

预备知识 全微分^[126], 重积分^[136], 曲面积分^[147], 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, 就把这个极限叫做该点的散度 (divergence), 用 $\nabla \cdot$ 算符¹² 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¹³, 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. 所以该场的散度处处为零.

¹² 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.

¹³ 本书不作证明

例 2 变速水流

在例 1 中, 流密度场随 x 坐标线性增加, $\mathbf{j} = (j_0 + \alpha x)\hat{\mathbf{x}}$ (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) .

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^[126] 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,

$$\begin{aligned} \Phi_x &\approx \int_0^h \int_0^h dy' dz' \times \\ &\left[\left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}h + \frac{\partial F_x}{\partial y}y' + \frac{\partial F_x}{\partial z}z' \right) - \left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}0 + \frac{\partial F_x}{\partial y}y' + \frac{\partial F_x}{\partial z}z' \right) \right] \quad (5) \\ &= \frac{\partial F_x}{\partial x}h \int_0^h \int_0^h dy' dz' = \frac{\partial F_x}{\partial x}h^3 = \frac{\partial F_x}{\partial x}V \end{aligned}$$

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

$$\nabla \cdot [C_1 \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) + C_2 \mathbf{F}_2(\mathbf{r}) + \dots] = C_1 \nabla \cdot \mathbf{F}_1(\mathbf{r}) + C_2 \nabla \cdot \mathbf{F}_2(\mathbf{r}) + \dots \quad (9)$$

例 3 质点引力场的散度

令质点 m 在坐标原点，则它的引力场（式 2^[243]）为

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = -\frac{Gm}{r^3} \mathbf{r} \quad (10)$$

我们在直角坐标系中计算该场的散度。直角坐标系中，有 $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ 和 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ，代入上式再求散度，得

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{g} &= \frac{Gm}{(x^2 + y^2 + z^2)^{5/2}} [(2x^2 - y^2 - z^2) + (2y^2 - z^2 - x^2) + (2z^2 - x^2 - y^2)] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (11)$$

可见引力场的散度为 0。然而需要注意的是，在坐标原点处式 10 的各个方向的偏导都不存在，所以不能用该公式计算散度。以上的结论只适用于原点之外的点。

散度定理

我们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 1 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，它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

$$\Phi = \sum_i \Phi_i \approx \sum_i \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) V_i \quad (12)$$

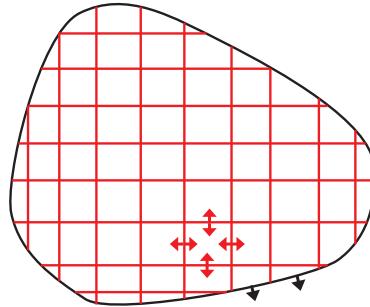


图 1: 证明所有小曲面的通量之和等于大曲面的通量

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} ）

$$\Phi = \int \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) dV \quad (13)$$

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.

旋度 斯托克斯定理

预备知识 圆周运动的速度^[170]，散度^[154]，线积分^[145]，流密度，通量

我们在矢量场中取一个闭合回路 \mathcal{L} 并规定一个正方向，并定义该回路的环流量为矢量场在回路上的线积分

$$\oint_{\mathcal{L}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (1)$$

下面我们来定义旋度，旋度是一个矢量，记为 $\nabla \times \mathbf{F}$. 在空间某点 (x, y, z) 处选取一个小面元 \mathbf{S} （模长为面元的面积，方向为面元的一个法向量），令面元边界构成的回路为 \mathcal{L} ，正方向由右手定则^[98] 判断. 要定义其 x 方向的分量，就取 \mathbf{S} 与 $\hat{\mathbf{x}}$ 同向，即

$$(\nabla \times \mathbf{F})_x = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{1}{S} \oint_{\mathcal{L}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (2)$$

旋度的 y, z 分量定义类似.

若矢量场分布连续且光滑，则旋度处处存在且与回路的形状和坐标系的选

取无关¹⁴. 所以选取任意方向的面元 $\hat{\mathbf{S}}$, 都有

$$\nabla \times \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{S}} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{1}{S} \oint_{\mathcal{L}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (3)$$

直角坐标系中的旋度

在直角坐标系中给出矢量场

$$\mathbf{F}(x, y, z) = F_x(x, y, z)\hat{\mathbf{x}} + F_y(x, y, z)\hat{\mathbf{y}} + F_z(x, y, z)\hat{\mathbf{z}} \quad (4)$$

在点 (x, y, z) 附近, 我们可以对场使用微分近似

$$F_i(x + x', y + y', z + z') = F_i(x, y, z) + \frac{\partial F_i}{\partial x}x' + \frac{\partial F_i}{\partial y}y' + \frac{\partial F_i}{\partial z}z' \quad (5)$$

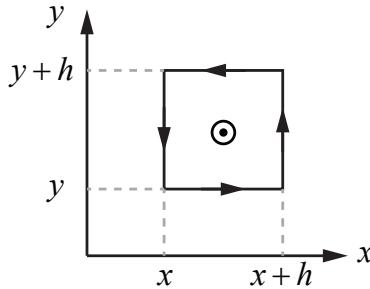


图 1: 直角坐标系中旋度的 z 分量

要求 z 方向的旋度, 令闭合回路为正方形 $[x, y, z]-[x+h, y+h, z]$ (图 1), 延 x 方向的两条边的线积分仅由 F_x 贡献, 延 y 方向的两条边的线积分仅由 F_y 贡献, 所以整个环路的线积分为

$$\begin{aligned} \oint_{\mathcal{L}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} &= \int_0^h \left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}x' \right) dx' - \int_0^h \left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x}x' + \frac{\partial F_x}{\partial y}h \right) dx' \\ &\quad + \int_0^h \left(F_y + \frac{\partial F_y}{\partial x}h + \frac{\partial F_y}{\partial y}y' \right) dy' - \int_0^h \left(F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y}y' \right) dy' \quad (6) \\ &= h^2 \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) \end{aligned}$$

所以旋度的 z 分量为

$$G_z = \lim_{h^2 \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \oint_{\mathcal{L}} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \quad (7)$$

¹⁴本书不作证明

类似地，我们可得 x, y 分量

$$G_x = \frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} \quad G_y = \frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} \quad (8)$$

所以类似叉乘的行列式表示（式 13^[99]），我们可以将旋度记为

$$\nabla \times \mathbf{F} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ F_x & F_y & F_z \end{vmatrix} \quad (9)$$

现在我们知道为什么旋度要记为 $\nabla \times \mathbf{F}$ 了，类比散度，旋度可以从形式上理解为矢量算符 ∇ 与矢量场 \mathbf{F} 的叉乘。

与梯度和散度不同的是，以上定义的旋度运算只能对三维空间的矢量场作用。

例 1 旋转体速度场的旋度

一个物体绕 z 轴旋转，角速度矢量为 $\boldsymbol{\omega} = \omega \hat{\mathbf{z}}$ ，物体上任意一点的位矢为 \mathbf{r} ，则速度关于位置的函数 $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ 构成一个矢量场（式 5^[170]）

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} = \omega \hat{\mathbf{z}} \times (x \hat{\mathbf{x}} + y \hat{\mathbf{y}}) = -\omega y \hat{\mathbf{x}} + \omega x \hat{\mathbf{y}} \quad (10)$$

使用式 9 计算 $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ 的散度，得

$$\nabla \times \mathbf{v} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{z}} \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ -\omega y & \omega x & 0 \end{vmatrix} = 2\omega \hat{\mathbf{z}} \quad (11)$$

可见该场的旋度是一个 $\hat{\boldsymbol{\omega}}$ 方向的常矢量。从这个例子也可以看出，如果一个（三维）矢量场在某个方向没有分量（即平面场），则其旋度必然延该方向（即平面的法向量）。

例 2 无旋度的旋转场

现在我们来看另一个旋转场 $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{r}}/r$ ，写成分量的形式就是

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{z}} \times \left(\frac{x}{x^2 + y^2} \hat{\mathbf{x}} + \frac{y}{x^2 + y^2} \hat{\mathbf{y}} \right) = -\frac{y}{x^2 + y^2} \hat{\mathbf{x}} + \frac{x}{x^2 + y^2} \hat{\mathbf{y}} \quad (12)$$

由于这个场也是一个 xy 平面场，旋度 $\hat{\mathbf{z}}$ 共线，可以直接使用式 7 计算

$$\nabla \times \mathbf{F} = \left(\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} \right) \hat{\mathbf{z}} = \left(\frac{1}{r^2} - \frac{2x^2}{r^4} + \frac{1}{r^2} - \frac{2y^2}{r^4} \right) \hat{\mathbf{z}} = \mathbf{0} \quad (13)$$

要注意的是，在原点处由于矢量场不连续（而是出现了无限大的奇点），以上计算在原点处并不成立。

斯托克斯定理

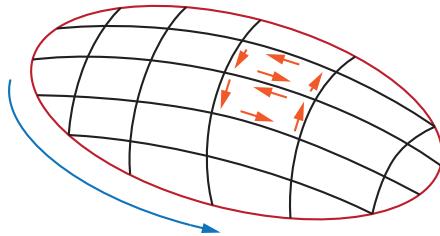


图 2: 斯托克斯定理

如图 2，我们选取一块曲面，并规定一个正方向。使用右手定则^[98]，我们也可以定义曲面边界的正方向。空间中存在连续光滑的矢量场 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ ，则斯托克斯定理可以将矢量场在曲面边界上的环流量和矢量场的旋度在曲面上通量等同起来

$$\oint \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \iint \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} \quad (14)$$

要证明这个定理，我们将曲面划分为许多小面元 $\Delta \mathbf{s}_i$ ，其正方向与曲面一致，边界的正方向同样由右手定则定义。这样，矢量场在曲面上的通量就等于在每个小面元上的通量之和。当面元的面积趋于零时，我们可以认为场的旋度在面元上是常矢量 $\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}_i)$ ， \mathbf{r}_i 为 $\Delta \mathbf{s}_i$ 上任意一点。由式 3 可知面元的环流量为 $\nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{s}_i$ （可类比式 2^[49]），所以根据积分的思想，所有面元的环流量之和为

$$\lim_{\Delta s_i \rightarrow 0} \sum_i \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{s}_i = \iint \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s} \quad (15)$$

最后，如何证明所有面元的环流量之和等于曲面边界的环流量呢？类比散度定理（式 13^[154]）的证明，考虑任意两块相邻的小面元，矢量场在它们共同边界的线积分对一个面元的环流量贡献为正，而对另一个面元的环流量贡献大小相同但符号为负，所以在上式的求和中相加为零。所以，求和中唯一没有被抵消的环流量来自于曲面边界处的面元，这些面元的边界与曲面边界重合且正方向一致，对求和的贡献恰好等于曲面边界的环流量。证毕。

第五章

概率与统计

随机变量的变换

预备知识 分布函数

求新变量的分布函数

我们先来讨论这样一个问题：令两个随机变量 x_1, x_2 间有函数关系 $x_1 = g(x_2)$ ，若已知 x_1 的分布函数为 $f_1(x_1)$ ，求 x_2 的分布函数 $f_2(x_2)$.

将两个概率分布的微分形式，有

$$dP = f_1(x_1) dx_1 \quad (1)$$

$$dP = f_2(x_2) dx_2 \quad (2)$$

若将式 1 中的 x_1 替换成 $g(x_2)$ ， dx_1 替换成 $g'(x_2) dx_2$ ，有

$$dP = f_1[g(x_2)]g'(x_2) dx_2 \quad (3)$$

对比式 2，得

$$f_2(x) = f_1[g(x)]g'(x) \quad (4)$$

这样，就求出了 x_2 的分布函数 $f_2(x)$.

例 1

已知 $f_1(x_1) = 3x_1^2$, $x_2 = x_1^2$, 求 x_2 的分布函数.

用 x_2 表示 x_1 得 $x_1 = \sqrt{x_2}$, 代入 $dP = f_1(x_1) dx_1$, 得

$$dP = 3\sqrt{x_2}^2 d(\sqrt{x_2}) = \frac{3}{2}\sqrt{x_2} dx_2 \quad (5)$$

所以 x_2 的分布函数为 $f_2(x) = 3\sqrt{x}/2$.

求两变量的关系

预备知识 可分离变量的微分方程

另一个常见的问题是已知 x_1 和 x_2 的分布函数 $f_1(x_1), f_2(x_2)$, 求两个随机变量需要满足的函数关系.

对比式 1 和式 2 可得一个已分离变量的微分方程

$$f_1(x_1) dx_1 = f_2(x_2) dx_2 \quad (6)$$

将方程两边积分即可得到两变量所满足的函数关系

$$F_1(x_1) = F_2(x_2) + C \quad (7)$$

其中函数 F_1, F_2 分别是函数 f_1, f_2 的一个原函数, 待定常数 C 通常可以由 x_1 和 x_2 的取值范围确定.

这个问题最常见的应用是在程序中生成指定分布函数的随机变量. 在许多编程语言中, 随机数生成器只能生成一个从 0 到 1 均匀分布的随机变量 (即 $f(x) = 1$), 若我们需要一个其他分布的随机变量, 就可以使用以上方法.

例 2

已知随机变量 x_1 ($x_1 \in [0, 1]$) 的分布函数为 $f_1(x_1) = 1$, 求函数关系 $x_2 = g(x_1)$ 使得 x_2 的分布函数为 $f_2(x_2) = 2x_2$ ($x_2 \in [0, 1]$).

将 f_1, f_2 代入式 6 并两边积分得

$$x_1 = x_2^2 + C \quad (8)$$

由于 x_1 和 x_2 的区间关系得 $C = 0$, 所以有 $x_2 = \sqrt{x_1}$.

例 3

给出两个随机变量 ξ_1, ξ_2 ($\xi_1, \xi_2 \in [0, 1]$), 分布函数均为 $f(\xi_i) = 1$, 用 ξ_1, ξ_2 表示某随机点的极坐标 (r, θ) 使得该点在单位圆内均匀随机分布.

要使随机点在单位圆内随机分布, θ 显然应该在 $[0, 2\pi]$ 间均匀随机分布, 所以令 $\theta = 2\pi\xi_2$ 即可. 要决定 r 的分布函数, 我们把单位圆划分为许多小圆环, 随机点出现在某圆环内的概率等于该圆环的面积比单位圆的面积, 即

$$dP = \frac{2\pi r dr}{\pi} = 2r dr \quad (9)$$

所以 r 的分布函数为 $2r$. 令 r 与 ξ_1 间存在函数关系, 由式 6 得

$$1 d\xi_1 = 2r dr \quad (10)$$

两边积分得 $\xi_1 = r^2$ ($\xi_1 = 0$ 时 $r = 0$, 所以积分常数为零), 即 $r = \sqrt{\xi_1}$. 这样我们就可以根据给出的两个随机变量分别计算随机点的坐标了.

第二部分

力学

第一章

质点

位置矢量 位移

预备知识 几何矢量^[90]

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^[126]，矢量的微分，矢量点乘^[94]

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^[94] 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）[\[169\]](#)

速度 加速度（一维）

预备知识 位移[\[166\]](#)，基本初等函数的导数[\[43\]](#)，复合函数求导[\[51\]](#)，牛顿—莱布尼兹公式[\[71\]](#)

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。所以下面我们用坐标 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[\[166\]](#) 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[\[38\]](#) 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

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t v_0 dt = x_0 + v_0(t - t_0) \quad (6)$$

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

$$v(t) = v_0 + \int_{t_0}^t a_0 dt' = v_0 + a_0(t - t_0) \quad (9)$$

然后再次积分得到位置函数

$$x(t) = x_0 + \int_{t_0}^t [v_0 + a_0(t' - t_0)] dt' = x_0 + v_0(t - t_0) + \frac{1}{2}a_0(t - t_0)^2 \quad (10)$$

速度 加速度

预备知识 位置矢量^[166], 速度 加速度（一维）^[167], 矢量的导数^[130], 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, 它们一般是指“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^[130] 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）^[170]

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^[38]）

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^[167]，我们也可以通过矢量函数的定积分^[132]（见例 1）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^[175]

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^[35], 速度的定义^[169]

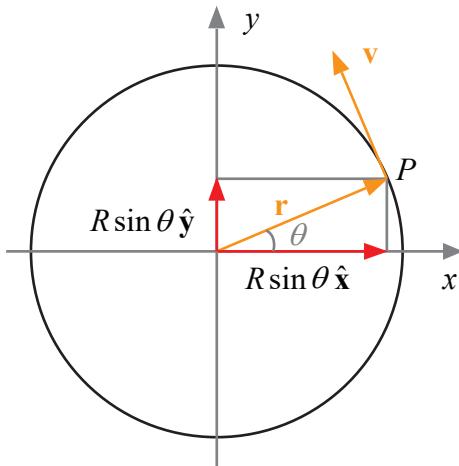


图 1: 匀速圆周运动的速度

如图设一个点 P 做半径为 R 的圆周运动, 角速度为 ω (可以是时间的函数), 那么在一段微小时间 Δt 内, 可以认为 ω 是常量, 点 P 转过的角度为 $\Delta\theta = \omega\Delta t$. 这样, 根据小角正弦值极限^[35], 当 $\Delta t \rightarrow 0$ 时, 点 P 在 Δt 内走过的位移长度 (线段的长度) 趋近于弧的长度, 即 $|\Delta s| \rightarrow R\omega\Delta t$.

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

$$v = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\Delta s|}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\omega R \Delta t}{\Delta t} = \omega R \quad (2)$$

速度的方向显然与过 A 点的圆的切线重合.

求导法

预备知识 矢量的导数 求导法则^[130]

如图, 在平面直角坐标系 (单位矢量分别为 $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$) 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} , 与 $\hat{\mathbf{x}}$ 的夹角是时间的函数 $\theta(t)$, 圆周运动的半径为 R . 那么任意时刻 t 将位矢 \mathbf{r} 沿着 x 与 y 轴方向分解, 有

$$\mathbf{r}(t) = R \cos \theta(t) \hat{\mathbf{x}} + R \sin \theta(t) \hat{\mathbf{y}} \quad (3)$$

其中 $\hat{\mathbf{x}}$ 是 x 轴正方向的单位矢量, $\hat{\mathbf{y}}$ 是 y 轴正方向的单位矢量. 由速度的定义 $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$, 即

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= \frac{d}{dt}(R \cos \theta \hat{\mathbf{x}} + R \sin \theta \hat{\mathbf{y}}) = -R\dot{\theta} \sin \theta \hat{\mathbf{x}} + R\dot{\theta} \cos \theta \hat{\mathbf{y}} \\ &= \dot{\theta}R[\cos(\theta + \pi/2)\hat{\mathbf{x}} + \sin(\theta + \pi/2)\hat{\mathbf{y}}]\end{aligned}\quad (4)$$

定义瞬时角速度 (简称角速度) 等于 θ 关于时间的导数 $\omega = \dot{\theta}$, 则速度大小为 $v = \omega R$, 方向为 $\hat{\mathbf{r}}$ 逆时针旋转 $\pi/2$, 即圆的切线方向.

三维空间的情况

预备知识 矢量叉乘^[99]

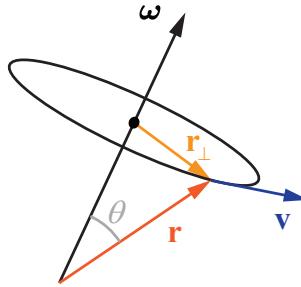


图 2: 角速度与线速度

如图 2, 在三维空间中, 圆周运动所在的平面可以任意选取, 我们可以将角速度拓展成一个矢量 $\boldsymbol{\omega}$, 其方向垂直于该平面并由右手定则^[98]确定. 令坐标系的原点在圆周运动的轴上, 用位矢 \mathbf{r} 表示点 P 的位置, 则圆周运动的半径为 $r_{\perp} = r \sin \theta$, 其中 θ 是 \mathbf{r} 与 $\boldsymbol{\omega}$ 的夹角. 所以圆周运动速度的大小为 $v = \omega r \sin \theta$. 根据矢量叉乘的几何定义^[99], 有

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \quad (5)$$

圆周运动的加速度

预备知识 圆周运动的速度^[170], 加速度(矢量)^[169]

匀速圆周运动的加速度(几何法)

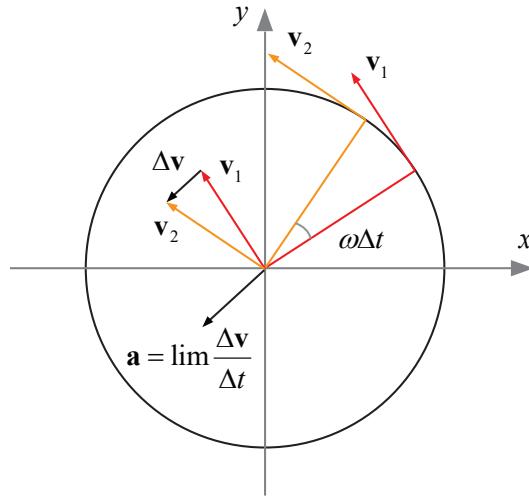


图 1: 把速度矢量移到原点再相减

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^[169].

$$\mathbf{a} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{v}}{\Delta t} \quad (1)$$

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).

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^[35]”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

$$a = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{|\Delta \mathbf{v}|}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\omega^2 R \Delta t}{\Delta t} = \omega^2 R \quad (3)$$

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 (取圆心为坐标原点), 就得到加速度的矢量形式

$$\mathbf{a} = -\omega^2 \mathbf{r} \quad (4)$$

圆周运动的加速度 (求导法)

现在我们来推导一般圆周运动的加速度 (不要求匀速), 将式 4^[170] 继续对时间求导得加速度

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} = -R\dot{\theta}^2(\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{y}}) + \ddot{\theta}R[\cos(\theta + \pi/2)\hat{\mathbf{x}} + \sin(\theta + \pi/2)\hat{\mathbf{y}}] \quad (5)$$

当角速度 $\omega = \dot{\theta}$ 为常量时 (匀速圆周运动), 上式第二项为零, 第一项与式 4 相同, 当角速度随时间变化时, 由于 $\ddot{\theta}R = \dot{\omega}R = \dot{v}$, 上式可以记为

$$\mathbf{a} = -\omega^2 \mathbf{r} + \dot{v}\hat{\mathbf{v}} \quad (6)$$

其中 $\hat{\mathbf{v}}$ 是速度方向的单位矢量. 所以变速圆周运动除了向心加速度外, 还有一个沿速度方向的加速度.

三维空间的情况

预备知识 连续叉乘的化简^[103]

若要把式 4 拓展到三维空间中围绕过圆心的轴转动的任意匀速圆周运动, 可以对式 5^[170] 求时间导数 (令 $\boldsymbol{\omega}$ 为常矢量) 得

$$\mathbf{a} = \dot{\mathbf{v}} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} \quad (7)$$

将式 5^[170] 代入上式, 得

$$\mathbf{a} = \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (8)$$

要验证该式与式 4 吻合, 把连续叉乘化为点乘得

$$\mathbf{a} = \omega^2 r \cos \theta \hat{\boldsymbol{\omega}} - \omega^2 \mathbf{r} = -\omega^2 (\mathbf{r} - r \cos \theta \hat{\boldsymbol{\omega}}) = -\omega^2 \mathbf{r}_\perp \quad (9)$$

其中 θ 是 $\hat{\omega}$ 和 \hat{r} 之间的夹角, \mathbf{r}_\perp 是从圆周运动的圆心指向点 P 的矢量, 相当于式 4 中的 \mathbf{r} . 证毕.

我们再来考虑变速圆周运动的情况, 当 $\boldsymbol{\omega}$ 的模长随时间变化时, 式 7 变为

$$\mathbf{a} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} + \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r} \quad (10)$$

定义角加速度 $\boldsymbol{\alpha} = \dot{\boldsymbol{\omega}}$, 并将式 5^[170] 代入, 得

$$\mathbf{a} = \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) + \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r} \quad (11)$$

由定义易证右边第二项等于式 6 中的 $i\hat{v}\hat{v}$.

匀加速运动

预备知识 速度 加速度^[169]

若在一段时间内, 质点的加速度矢量不随时间变化 (常矢量) \mathbf{a} , 那么我们说质点做匀加速运动. 由“速度 加速度^[169]”中的式 7 和式 8, 速度和位移函数分别为

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \int_{t_0}^t \mathbf{a} dt = \mathbf{v}_0 + \mathbf{a} \cdot (t - t_0) \quad (1)$$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \int_{t_0}^t \mathbf{v}(t) dt = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 \cdot (t - t_0) + \frac{1}{2} \mathbf{a} \cdot (t - t_0)^2 \quad (2)$$

自由落体运动

一个最简单的匀加速运动是自由落体运动. 自由落体运动是初速度 $\mathbf{v}_0 = 0$, 竖直向下加速度为重力加速度恒为 g 的匀加速直线运动. 其中 $g \approx 9.8 \text{ m/s}^2$ 是重力加速度, 也可以用常矢量 \mathbf{g} 表示. 代入式 1 和式 2 得

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{g} \cdot (t - t_0) \quad (3)$$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{g} \cdot (t - t_0)^2 \quad (4)$$

抛体运动

作为一个稍复杂的情况，抛体运动是加速度为 \mathbf{g} ，初速度为 \mathbf{v}_0 的匀加速运动。将 $\mathbf{a} = \mathbf{g}$ 代入式 1 和式 2 得

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \mathbf{g} \cdot (t - t_0) \quad (5)$$

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 \cdot (t - t_0) + \frac{1}{2}\mathbf{g} \cdot (t - t_0)^2 \quad (6)$$

对比式 4 和式 6 可以发现抛体运动就是自由落体运动与匀速直线运动的矢量叠加。所以如果我们在一个相对于当前参考系以 \mathbf{v}_0 运动的参考系中观察抛体运动，就会是自由落体运动。

极坐标中的速度和加速度

预备知识 速度 加速度^[169]，极坐标中单位矢量的偏导^[139]

若已知某点的极坐标关于时间的函数 $r(t)$ 和 $\theta(t)$ ，求该点的速度和加速度。

极坐标中的位置矢量可以用 $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$ 表示，注意其中径向单位矢量可以看做复合函数 $\hat{\mathbf{r}}[\theta(t)]$ 。根据定义，速度是位矢的一阶导数，在力学中经常在变量上面加一点表示对时间的一阶导数，两点表示二阶导数，根据矢量的求导法则

$$\mathbf{v} = \dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} \quad (1)$$

由链式法则和式 1^[139]，上式中

$$\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{d\theta}\dot{\theta} = \dot{\theta}\hat{\theta} \quad (2)$$

所以极坐标中的速度为

$$\mathbf{v} = \dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\dot{\theta}\hat{\theta} \quad (3)$$

这是符合直觉的，径向速度等于位矢模长的导数，而角向速度等于位矢模长乘以角速度。

我们再来计算加速度，用同样的方法对速度求一阶导数得

$$\begin{aligned}\mathbf{a} &= \ddot{r}\hat{\mathbf{r}} + \dot{r}\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} + \dot{r}\dot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} + r\ddot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} + r\dot{\theta}\frac{d\hat{\boldsymbol{\theta}}}{dt} \\ &= \ddot{r}\hat{\mathbf{r}} + \dot{r}\dot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} + \dot{r}\dot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} + r\ddot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} - r\dot{\theta}^2\hat{\mathbf{r}} \\ &= (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\hat{\mathbf{r}} + (2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta})\hat{\boldsymbol{\theta}}\end{aligned}\quad (4)$$

这个结论并不是那么显而易见。我们将加速度的径向和角向分量分别记为 a_r 和 a_θ ，其中 a_θ 还可以记为另一种更紧凑形式即

$$a_\theta = \frac{1}{r} \frac{d}{dt} \left(r^2 \frac{d\theta}{dt} \right) \quad (5)$$

牛顿运动定律 惯性系

预备知识 加速度^[169]

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直线运动或静止。
- **第二定律** 质点所受合外力等于质点的质量乘以加速度。
- **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^[193]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）^[185]，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^[213]。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^[181]，矢量的点乘^[94]，定积分^[67]

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。

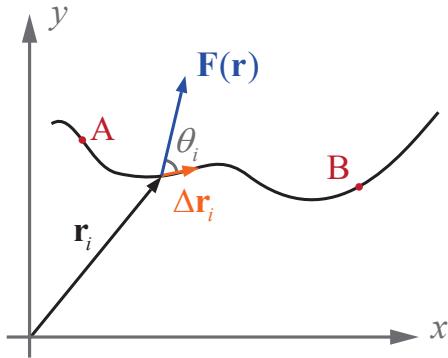


图 1: 在一小段位移中, 把变力看做恒力

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^[94] 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^[67] 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^[145]”.

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

$$P = \lim_{\Delta t_i \rightarrow 0} \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) \cdot \Delta \mathbf{r}_i}{\Delta t_i} = \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} \quad (6)$$

动能 动能定理（单个质点）

预备知识 功 功率^[178]，牛顿第二定律^[177]

令质点的质量为 m ，速度为 \mathbf{v} ，则质点的动能定义为

$$E_k = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 = \frac{1}{2} m v^2 \quad (1)$$

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^[178] 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^[130]”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^[166], 矢量场^[144], 功^[178], 牛顿—莱布尼兹公式^[71]

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 . 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^[166]) 的矢量函数表示, 所以力场是一种矢量场.

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^[178] 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^[71]，势能函数恰好就是 $F(x)$ 的负原函数，所以 $F(x)$ 是 $V(x)$ 负导函数.

$$V(x) = - \int F(x) dx \quad F(x) = - \frac{dV(x)}{dx} \quad (8)$$

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^[149]

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^[149] 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 $V(x, y) = k_1(x + y)^2/2 + k_2(x - y)^2/2$ ，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^[149]”中的式 26 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^[166]”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。

机械能守恒（单个质点）

预备知识 动能定理^[180]，势能^[181]

若质点只受不随时间变化的保守力作用³，那么物体在某段时间内从 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。上式就是单个质点机械能守恒的表达式。

动量 动量定理（单个质点）

预备知识 牛顿第二定律^[177]，矢量的导数^[130]

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。

³即势能函数不随时间变化

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}

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m\mathbf{a} \quad (2)$$

根据牛顿第二定律, $m\mathbf{a}$ 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^[67] 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 角动量定理 角动量守恒 (单个质点)

预备知识 牛顿第二定律^[177], 力矩^[215]

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 $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. 在三维空间中建立坐标系, 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

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”

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^[99] 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 $L = rp$.

角动量定理

这个质点在该时刻受到的力矩^[215] 为 \mathbf{M} , 可以证明

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{M} \quad (2)$$

这就是 (单个质点的) 角动量定理.

特殊地, 若质点受到的力矩为零, 则 $d\mathbf{L}/dt = \mathbf{0}$, 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, $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$, 可见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.

我们来证明单个质点的角动量定理. 令质点的速度为 $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$, 加速度为 $\mathbf{a} = dv/dt$, 叉乘的求导法则 (式 8^[130]) 与标量乘法求导类似, 牛顿第二定律^[177] 为 $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, 两个同方向矢量叉乘^[99] 为零,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{L}}{dt} &= \frac{d(\mathbf{r} \times \mathbf{p})}{dt} = m \frac{d(\mathbf{r} \times \mathbf{v})}{dt} = m \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{v} + \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{v}}{dt} \right) \\ &= m(\mathbf{v} \times \mathbf{v} + \mathbf{r} \times \mathbf{a}) = \mathbf{r} \times (m\mathbf{a}) \\ &= \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{M} \end{aligned} \quad (3)$$

证毕.

简谐振子

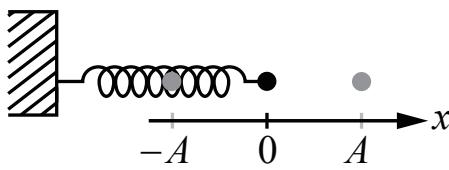
预备知识 胡克定律, 牛顿第二定律^[177]

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^[177] $F = ma = m\ddot{x}$ (\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 $x(t)$ 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^[75]), 即无论常数 A, φ_0 取任意值, 微分方程总能得到满足.

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.

⁵ $\sin t$ 也有同样的性质, 所以下讨论对 $\sin t$ 也成立

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

$$x = -v_0\omega \cos\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) = v_0\omega \sin \omega t \quad (\omega = \sqrt{k/m}) \quad (3)$$

受阻落体

预备知识 匀加速运动^[175]

在自由落体的基础上, 若假设质点受到的空气阻力的大小与其速度成正比, 比例系数为 α , 那么根据牛顿第二定律^[177] 可以列出动力学方程 (假设向下为正方向)

$$ma = F = mg - \alpha v \quad (1)$$

考虑到加速度是速度的导数, 上式变为

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{\alpha}{m}v \quad (2)$$

这是速度关于时间的函数 $v(t)$ 与其一阶导数 $\dot{v}(t)$ 的关系式, 即微分方程^[73]. 与自由落体问题不同的是, 这个方程的右边含有未知函数 $v(t)$, 所以不可能直接将等式两边积分解得 $v(t)$. 我们可以根据微分与导数的关系, 将上式两边同乘 dt 并整理得

$$\frac{1}{g - \alpha v/m} dv = dt \quad (3)$$

这样我们就得到了 v 和 t 的微分^[49] 关系, 即每当 t 增加一个微小量时, 如何求 v 对应增加的微小量. 注意等式左边仅含 v , 右边仅含 t , 所以这一步叫做分离变量, 我们称式 2 为可分离变量的微分方程. 假设 v 和 t 之间的关系可以表示为

$$F(v) = G(t) \quad (4)$$

那么对等式两边微分即可得到式 3 的形式. 令 $f(v)$ 和 $g(t)$ 分别为 $F(v)$ 和 $G(t)$ 的导函数, 有

$$f(v) dv = g(t) dt \quad (5)$$

对比式3可得 $f(v) = 1/(g - \alpha v/m)$ 和 $g(t) = 1$, 把二者做不定积分^[57]得原函数. 首先显然 $G(t) = t + C_1$. 对 $f(v)$ 积分可用“积分表^[62]”中的式1和式3得

$$F(v) = -\frac{m}{\alpha} \ln \left| g - \frac{\alpha}{m} v \right| + C_2 = -\frac{m}{\alpha} \ln \left(g - \frac{\alpha}{m} v \right) + C_2 \quad (6)$$

上式中绝对值符号可去掉是因为在式2中根据物理情景可知 dv/dt 始终大于零. 把两原函数代回式4(这时可以把 C_1 和 C_2 合并为一个待定常数 C), 整理可得

$$v = \frac{m}{\alpha} \left(g - e^{-\alpha C/m} e^{-\alpha t/m} \right) \quad (7)$$

这就是微分方程式2的通解, 可代入原微分方程以验证是否成立. 以后我们把以上这种由式5形式求式4形式的步骤简称为“对方程两边积分”. 由于方程阶数为1, 通解仅含有一个待定常数. 为了确定这个待定常数, 我们用题目给出的初值条件, 即 $t = 0$ 时 $v = 0$, 代入通解可解得 C , 再把 C 代回通解得满足初始条件的特解

$$v(t) = \frac{mg}{\alpha} \left(1 - e^{-\alpha t/m} \right) \quad (8)$$

从该式可以看出, 当 $t = 0$ 时, 质点速度为0, 符合初始条件, 而当 $t \rightarrow +\infty$ 时, $v(t) \rightarrow mg/\alpha$. 可见质点的速度会无限趋近一个最大值, 而这个最大值恰好可以使阻力 αv 等于重力 mg . 利用这一条件, 即使不解微分方程, 也可以很快算出质点的末速度.

单摆

预备知识 简谐振子^[187], 匀速圆周运动^[172]

理想的单摆由一个质点和一个质量不计的细绳(或细杆)组成. 绳的一头连接质点, 另一头固定不动. 我们来对单摆做受力分析. 如图1, 令质点质量为 m , 受重力大小为 mg , 受绳的拉力大小为 T . 将重力沿与绳平行的方向和垂直的方向正交分解, 分力大小分别为 $mg \cos \theta$ 和 $mg \sin \theta$. 由于绳的限制, 质点只允许做圆周运动, 所以绳的拉力与重力平行绳的分量必然提供质点的向心力.

$$T - mg \cos \theta = ma_c \quad (1)$$

对于变速圆周运动，向心加速度仍然可以用 $a_c = v^2/L$ 求解，其中 L 是绳长即圆的半径（证明见“变速圆周运动”）。在求单摆运动时，拉力 T 的大小并不重要，我们更关心的是摆角 θ 随时间的变化。

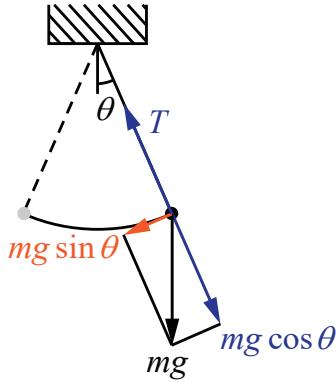


图 1: 单摆

令质点向右运动时速度为正，角速度和速度的关系为 $\dot{\theta} = v/L$ ，对其两边求导得角加速度和加速度的关系

$$\ddot{\theta} = a_\theta/L \quad (2)$$

其中 a_θ 是质点延垂直绳方向的加速度。现在沿垂直绳方向运用牛顿第二定律，并代入上式中的 a_θ 得

$$-mg \sin \theta = ma_\theta = -m\ddot{\theta}L \quad (3)$$

两边消去质量可得摆角 θ 关于时间的二阶微分方程。

$$L\ddot{\theta} = -g \sin \theta \quad (4)$$

解出该方程即可得到单摆做任意幅度摆动的规律。虽然我们还不知道方程的解，但观察方程可知单摆的运动规律只与摆长 L 和重力加速度 g 有关，而与质点的质量无关。所以改变同一单摆的质量不会改变它的运动规律。

小幅度摆动

预备知识 小角正弦值极限^[35]

遗憾的是，式 4 的解并不能用有限个基本初等函数表示。我们先来考虑一种简单的情况，即单摆进行小的幅度摆动。当 $\theta \rightarrow 0$ 时，我们可以把式 4 中的 $\sin \theta$ 近似为 θ 。令质点从最低点到当前位置之间的弧长为 s ，则有 $s = \theta L$ 和 $\ddot{s} = a_\theta = \ddot{\theta}L$ ，式 4 变为 s 的微分方程

$$\ddot{s} = -\frac{g}{L}s \quad (5)$$

观察该式可以发现其结构与简谐振子的微分方程（式 1^[187]）非常相似。用同样的方法，可得通解为

$$s = A \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (\omega = \sqrt{g/L}) \quad (6)$$

考虑到 $\theta \rightarrow 0$ 的情况下，圆弧可以近似为线段，所以可以认为此时质点在做一维简谐运动，用坐标 x 代替弧长 s 。

傅科摆

预备知识 单摆^[190]

傅科摆是首个直接证明自转的实验，首先试想如果把一个不受任何阻力的单摆放在地球的北极，那么地球每自转一定角度，单摆的摆平面不变，所以以地球为参考系观察，摆平面将反方向转动，这样就能证明地球在自转。现实中，为了能克服阻力和微扰长时间摆动，通常使用质量较大，摆臂较长的摆作为傅科摆。

但若傅科摆被放在北纬 α 角处，摆平面的将会以怎样的角速度转动呢？事实证明，若令地球自转的角速度为 ω_0 ，则单摆相对地面转动的角速度 ω 将等于

$$\omega = \omega_0 \sin \alpha \quad (1)$$

傅科摆角速度的一种几何推导

预备知识 矢量叉乘^[99]

设 \mathbf{R} 为地心指向傅科摆的矢量, 当地纬度为 α , 地轴指向北的单位矢量为 $\hat{\mathbf{k}}$, 显然 $\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{R}} = \sin \alpha$.

若把任意矢量 \mathbf{P} 围绕某单位矢量 $\hat{\mathbf{M}}$ 以右手定则旋转角微元 $d\theta$, 有

$$d\mathbf{P} = \hat{\mathbf{M}} \times \mathbf{P} d\theta \quad (2)$$

开始时, 令傅科摆在最低点的速度方向的单位向量为 $\hat{\mathbf{A}}$ ($\hat{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{R} = 0$), 在傅科摆下方的水平地面上标记单位向量 $\hat{\mathbf{B}}$, 使开始时 $\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{A}}$. 当傅科摆随地球在准静止状态下移动位移 ds ($ds \cdot \mathbf{R} = 0$) 后, 由式 2 可得

$$d\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{M}} \times \hat{\mathbf{A}} \cdot d\theta = \frac{\mathbf{R} \times ds}{|\mathbf{R} \times ds|} \times \hat{\mathbf{A}} \frac{ds}{R} \quad (3)$$

注意这只是一个比较符合物理直觉的假设, 这里并不给出证明. 当地球转动 $d\theta$ 时, 上式中 $ds = \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{R} d\theta$, 而地面上的标记 $\hat{\mathbf{B}}$ 也围绕地轴转动, 所以 $d\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{A}} d\theta$.

下面计算 $d\hat{\mathbf{A}} - d\hat{\mathbf{B}}$. 因为 $\mathbf{R} \cdot ds = 0$, 所以 $|\mathbf{R} \times ds| = R ds$, 所以

$$\begin{aligned} d\hat{\mathbf{A}} &= \frac{\mathbf{R} \times ds}{R^2} \times \hat{\mathbf{A}} = \frac{1}{R^2} \mathbf{R} \times (\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{R} d\theta) \times \hat{\mathbf{A}} \\ &= \hat{\mathbf{R}} \times (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{R}}) \times \hat{\mathbf{A}} d\theta = [(\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{R}})\hat{\mathbf{k}} - (\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{k}})\hat{\mathbf{R}}] \times \hat{\mathbf{A}} d\theta \\ &= (\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{R}} \sin \alpha) \times \hat{\mathbf{A}} d\theta \end{aligned} \quad (4)$$

$$d\hat{\mathbf{A}} - d\hat{\mathbf{B}} = (\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{R}} \sin \alpha) \times \hat{\mathbf{A}} d\theta - \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{A}} d\theta = -\sin \alpha \hat{\mathbf{R}} \times \hat{\mathbf{A}} d\theta \quad (5)$$

所以地球转过 $d\theta$ 角以后, $\hat{\mathbf{A}}$ 与 $\hat{\mathbf{B}}$ 之间的夹角为

$$d\gamma = |d\hat{\mathbf{A}} - d\hat{\mathbf{B}}| = \sin \alpha d\theta \quad (6)$$

两边除以 dt 得角速度

$$\omega = \omega_0 \sin \alpha \quad (7)$$

惯性力

预备知识 牛顿第二定律^[17]

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向下的力. 为了使自己保持“静止”或“受力平衡”, 电梯会给人一个额外的支持力.

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”或“受力平衡”, 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

$$\mathbf{a}_{xyz} = \mathbf{a}_{abc} + \mathbf{a} \quad (2)$$

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）

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}_{xyz} = m(\mathbf{a} + \mathbf{a}_{abc}) \quad (3)$$

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

$$\mathbf{F} + \mathbf{f} = m\mathbf{a}_{abc} \quad (4)$$

所以

$$\mathbf{f} = m\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{F} = -m\mathbf{a} \quad (5)$$

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的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。如果人站在一个弹簧秤上，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。对于非平动参考系，式 2 并不满足（即使把 \mathbf{a} 看做位置和时间的函数），以后在“科里奥利力^[196]”中我们会推导 \mathbf{a}_{xyz} 和 \mathbf{a}_{abc} 间的具体关系。所以我们不能得到式 5。由式 3 和式 4，对任何非惯性系都成立的结论只有

$$\mathbf{f} = m\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{F} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) \quad (6)$$

所以在最一般的情况下，质点所受惯性力等于质量乘以两参考系中加速度之差。

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。

离心力

预备知识 匀速圆周运动的加速度^[172], 惯性力^[193], 连续叉乘的化简^[103]

令参考系 abc 和 xyz 的 c 轴和 z 轴始终重合. 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 $r_\perp = \sqrt{a^2 + b^2}$, 对应的径向矢量为 $\mathbf{r}_\perp = (a, b, 0)^\text{T}$. 在 xyz 系中, 质点做匀速圆周运动, 相对于 xyz 系的加速度 (用 abc 系的坐标表示) 为

$$\mathbf{a}_{xyz} = -\omega^2 \mathbf{r}_\perp = -\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \end{pmatrix}_{abc} \quad (1)$$

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^[193] 中的结论, 惯性力为

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) = \omega^2 \mathbf{r}_\perp = m\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \\ 0 \end{pmatrix}_{abc} \quad (3)$$

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^[196].

若转轴取任意方向 $\hat{\omega}$, 由式 8^[172] 得

$$\mathbf{a}_{xyz} = \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (4)$$

$$\mathbf{f} = -m\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (5)$$

科里奥利力

预备知识 惯性力^[193], 离心力^[196], 平面旋转矩阵^[116], 矢量的叉乘^[99]

科里奥利力（Coriolis Force）是匀速旋转的参考系中由质点运动产生的惯性力.

$$\mathbf{F}_c = 2m\mathbf{v}_{abc} \times \boldsymbol{\omega} \quad (1)$$

其中 \mathbf{v}_{abc} 是质点相对于旋转参考系 abc 的瞬时速度, $\boldsymbol{\omega}$ 是旋转系相对于某惯性系 xyz 转动的角速度矢量. 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（见“地球表面的科里奥利力^[200]”）.

推导（矢量法）

预备知识 连续叉乘的化简^[103]

这里首先给出一个较符合直觉的结论（暂时不证）. 若 abc 系相对 xyz 系以角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 旋转，对任意一个随时间变化的矢量（假设一阶导数存在），我们把它在 xyz 和 abc 系中的时间导数分别记为 $(d\mathbf{A}/dt)_{xyz}$ 和 $(d\mathbf{A}/dt)_{abc}$ ，则有

$$\left(\frac{d\mathbf{A}}{dt} \right)_{xyz} = \left(\frac{d\mathbf{A}}{dt} \right)_{abc} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{A} \quad (2)$$

例 1

令 abc 系 $t = 0$ 时与 xyz 系重合并绕 z 轴逆时针匀速转动，又令 $\mathbf{A}(t) = \alpha t \hat{\mathbf{a}}$ ，验证 $\mathbf{A}(t)$ 满足式 2.

首先将 $\mathbf{A}(t)$ 用 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 基底表示为 $\mathbf{A}(t) = \alpha t (\cos \omega t \hat{\mathbf{x}} + \sin \omega t \hat{\mathbf{y}})$ ，对其求导得

$$\left(\frac{d\mathbf{A}}{dt} \right)_{xyz} = \alpha (\cos \omega t \hat{\mathbf{x}} + \sin \omega t \hat{\mathbf{y}}) + \alpha \omega t (-\sin \omega t \hat{\mathbf{x}} + \cos \omega t \hat{\mathbf{y}}) \quad (3)$$

而在 abc 系中求导为

$$\left(\frac{d\mathbf{A}}{dt} \right)_{abc} = \alpha \hat{\mathbf{a}} = \alpha (\cos \omega t \hat{\mathbf{x}} + \sin \omega t \hat{\mathbf{y}}) \quad (4)$$

最后，

$$\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{A} = (\omega \hat{\mathbf{c}}) \times (\alpha t \hat{\mathbf{a}}) = \alpha \omega t \hat{\mathbf{c}} \times \hat{\mathbf{a}} = \alpha \omega t \hat{\mathbf{b}} = \alpha \omega t (-\sin \omega t \hat{\mathbf{x}} + \cos \omega t \hat{\mathbf{y}}) \quad (5)$$

将以上三式代入式2可验证式2成立。注意以上我们将所有的矢量用 \hat{x}, \hat{y} 基底表示，类似地，我们也可以将所有矢量用 \hat{a}, \hat{b} 表示，等式同样成立。

我们先令A为质点的位矢r，得参考系中质点的速度关系为

$$\mathbf{v}_{xyz} = \mathbf{v}_{abc} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r} \quad (6)$$

两边在xyz系中对时间求导得

$$\mathbf{a}_{xyz} = \left(\frac{d\mathbf{v}_{abc}}{dt} \right)_{xyz} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_{xyz} \quad (7)$$

注意abc系中的加速度 \mathbf{a}_{abc} 并不是上式右边第一项，而是 $(d\mathbf{v}_{abc}/dt)_{abc}$ 。令式2中的 $\mathbf{A} = \mathbf{v}_{abc}$ ，得

$$\left(\frac{d\mathbf{v}_{abc}}{dt} \right)_{xyz} = \mathbf{a}_{abc} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_{abc} \quad (8)$$

将式6和式8代入式7，得

$$\mathbf{a}_{xyz} = \mathbf{a}_{abc} + 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_{abc} + \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (9)$$

所以旋转参考系中的总惯性力（式1^[193]）为

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) = -2m\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_{abc} - m\boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \quad (10)$$

其中第二项为离心力（式5^[196]），而第一项被称为科里奥利力。

推导（旋转矩阵法）

设空间中存在一个惯性系xyz和一个非惯性系abc相对于惯性系xyz绕z轴以角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 逆时针匀速旋转（右手定则^[98]）。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

$$\mathbf{R}(\theta) \equiv \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (11)$$

其意义是把坐标逆时针旋转角 θ 。两坐标系之间的坐标变换为

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}_{xyz} = \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{abc} \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{abc} = \mathbf{R}(-\omega t) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}_{xyz} \quad (12)$$

为了得到质点在惯性系中的加速度，对上面左式的 $(x, y)^T$ 求二阶时间导数得⁷ xyz 系中的加速度（以 \hat{x}, \hat{y} 为基底）

$$\mathbf{a}_{xyz} = \begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix}_{xyz} = \ddot{\mathbf{R}}(\omega t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 2\dot{\mathbf{R}}(\omega t) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} + \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix} \quad (13)$$

其中⁸

$$\dot{\mathbf{R}}(\omega t) = \omega \begin{pmatrix} \cos(\omega t + \pi/2) & -\sin(\omega t + \pi/2) \\ \sin(\omega t + \pi/2) & \cos(\omega t + \pi/2) \end{pmatrix} = \omega \mathbf{R}(\omega t + \pi/2) \quad (14)$$

$$\ddot{\mathbf{R}}(\omega t) = -\omega^2 \mathbf{R}(\omega t) \quad (15)$$

代入式 13 得

$$\mathbf{a}_{xyz} = -\omega^2 \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + 2\omega \mathbf{R}(\omega t + \pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} + \mathbf{R}(\omega t) \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix} \quad (16)$$

上式中的每一项都是以 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ 为基底的坐标。所有坐标乘以 $\mathbf{R}(-\omega t)$ ，得到以 $\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}$ 为基底的坐标

$$\mathbf{a}_{xyz} = -\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{abc} + 2\omega \mathbf{R}(\pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix}_{abc} + \begin{pmatrix} \ddot{a} \\ \ddot{b} \end{pmatrix}_{abc} \quad (17)$$

所以旋转参考系中的总惯性力（式 1^[193]）为（以 $\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}, \hat{\mathbf{c}}$ 为基底）

$$\mathbf{f} = m(\mathbf{a}_{abc} - \mathbf{a}_{xyz}) = m\omega^2 \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{abc} - 2m\omega \mathbf{R}(\pi/2) \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix}_{abc} \quad (18)$$

其中第一项是已知的离心力式 3^[196]，我们将第二项定义为科里奥利力 \mathbf{F}_c 。科里奥利力可以用叉乘记为

$$\mathbf{F}_c = 2m\mathbf{v}_{abc} \times \boldsymbol{\omega} \quad (19)$$

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，我们可以写出式 18 的矢量形式

$$\mathbf{f} = m\omega^2 \mathbf{r} + 2m\mathbf{v}_{abc} \times \boldsymbol{\omega} \quad (20)$$

⁷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。

⁸式 14 和式 15 相当于用矩阵推导了匀速圆周运动的速度和加速度公式^{[170][172]}。

地球表面的科里奥利力

预备知识 科里奥利力^[196]

令延地轴向北的单位矢量为 $\hat{\mathbf{z}}$, 质点所在经线与赤道交点的单位矢量为 $\hat{\mathbf{x}}$, 则 $\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{x}}$. 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⁹). 这样, 运动平面内正北方向的单位矢量为 $\hat{\mathbf{z}}' = -\sin \theta \hat{\mathbf{x}} + \cos \theta \hat{\mathbf{z}}$, 正东方向的单位矢量为 $\hat{\mathbf{y}}$, 正上方为 $\hat{\mathbf{x}}' = \hat{\mathbf{y}} \times \hat{\mathbf{z}}' = \sin \theta \hat{\mathbf{z}} + \cos \theta \hat{\mathbf{x}}$, 速度方向的单位矢量为

$$\hat{\mathbf{v}} = \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \phi \hat{\mathbf{z}}' = -\cos \phi \sin \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \phi \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \quad (1)$$

现在可以计算科里奥利力

$$\mathbf{F}_{col} = 2mv\omega \hat{\mathbf{v}} \times \hat{\mathbf{z}} = 2mv\omega (\cos \phi \sin \theta \hat{\mathbf{y}} + \sin \phi \hat{\mathbf{x}}) \quad (2)$$

其向北, 向东, 向上的分量分别为

$$\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{\mathbf{z}}' = -2mv\omega \sin \theta \sin \phi \quad \mathbf{F}_{col} \cdot \hat{\mathbf{y}} = 2mv\omega \sin \theta \cos \phi \quad (3)$$

$$\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{\mathbf{x}}' = 2mv\omega \sin \phi \cos \theta \quad (4)$$

可以证明水平分力可以表示为

$$\mathbf{F}_{col}^{\parallel} = (\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{\mathbf{y}}) \hat{\mathbf{y}} + (\mathbf{F}_{col} \cdot \hat{\mathbf{z}}') \hat{\mathbf{z}}' = 2mv \times \boldsymbol{\omega}' \quad (5)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}' = \omega \sin \theta \hat{\mathbf{x}}'$. 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.

⁹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 300 km/h 的速度行驶，其水平方向的科氏力大小为

$$\begin{aligned} F_{col} &= 2 \times 30,000 \text{ kg} \times \frac{300,000 \text{ m}}{3600 \text{ s}} \times \frac{2\pi}{24 \text{ h} \times 3600 \text{ s}} \times \sin \frac{\pi}{6} \\ &= 60.32 \text{ N} \end{aligned} \quad (6)$$

第二章

质点系与刚体

常见物理量

预备知识 速度 加速度^[169], 通量^[147]

我们已知速度和加速度都由极限定义, 事实上, 许多其他物理量同样通过极限来定义.

密度

我们常把质量密度简称为密度, 记为 ρ , 定义为

$$\rho = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{\Delta V} \quad (1)$$

其中 Δm 是体积元 ΔV 内的质量. 当我们讨论的是宏观物体的密度时, 这个极限的理解是, ΔV 远小于宏观尺度, 却远大于微观尺度. 因为微观粒子 (质子, 电子等) 的体积非常小, 它们之间有很大的空间, 如果按照数学定义取无限小, 很大概率会得到密度为零.

类似地我们可以定义其他物理量的密度, 如电荷密度 (将上式的质量 m 换成净电荷 q), 粒子数密度 (将 m 换成粒子数 N) 等.

流密度

在通量

该式中的 \mathbf{F} 有时被称为流密度. 以上面的水流场为例, 若把一定时间内流过曲面的水看做通量, 那么“单位体积中水的质量”就是水的质量密度, 而流密度就是密度乘以速度矢量.

质量流密度电流密度

自由度

预备知识 柱坐标系^[11], 球坐标系^[12]

我们已知描述一个质点在三维空间中的位置需要至少三个变量，无论使用直角坐标，柱坐标或球坐标。我们说这个质点有三个自由度。同理，若空间中有 N 个质点可以自由移动，我们就说这些质点组成的系统有 $3N$ 个自由度。

需要注意的是，以上讨论的粒子都是自由的，即没有约束。若给系统施加约束，自由度就会相应减少。例如，若用长度为 R 的细棒将一个质点和坐标原点相连，则质点只能在半径为 R 的球面上运动，这时我们在直角坐标系中施加了约束条件

$$x^2 + y^2 + z^2 = R^2 \quad (1)$$

当我们确定了 x, y, z 中的任意两个变量后，第三个变量就可以根据上式确定，所以这时质点就只有两个自由度。我们把选取的两个自由坐标叫做**独立 (independent)** 变量，剩下的一个坐标就是**非独立的**¹。另一种更直观的方法是把这个质点的位置用球坐标 (r, θ, ϕ) 表示，约束条件变为

$$r = R \quad (2)$$

我们马上就得到两个独立的变量 (θ, ϕ) 用于完全确定质点的位置。我们把**式 1** 或**式 2** 这样的等式称为一个约束条件，若给自由度为 N 的系统加上 M 个约束条件，则系统的自由度减少为 $N - M$ 。

另一个例子是考虑两个质点，它们之间由长度为 R 细棒相连，那么原来的 6 个自由度的系统在一个约束条件 $(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2 = R^2$ 下变为 5 个自由度。要具体选取五个独立变量，我们可以用三个独立变量先确定第一个质点的位置，然后再用剩下两个独立变量加上约束条件确定第二个质点的位置。我们还可以再继续加约束条件，例如限制第一个质点只能在 z 轴上运动，这事实上是两个约束条件 $x_1 = 0$ 和 $y_1 = 0$ ，使两个质点的自由度最终减少为 3 个。我们可以取一个独立变量描述第一个质点在 z 轴上的坐标，另外两个独立变量描述第二个质点相对于第一个质点的方向。

质点系

¹注意这个例子中第三个变量可能会有正负两个解，但我们仍然认为它是非独立的。

预备知识 牛顿第三定律^[177]

在考虑多个物体构成的系统时，我们有时候可以把每个物体都近似为一个质点，这样我们就得到了由有限个质点构成的系统，称为质点系。

令质点系中有 N 个质点，每个质点的受力都可以分为两类，一是系统外界物体给该质点的力，称为外力，二是来自系统内其他质点的力，称为内力。对第 i 个质点，将外力和内力分别记为 \mathbf{F}_i^{out} 和 \mathbf{F}_i^{in} 。

系统中所有质点所受的合力等于合内力加合外力

$$\mathbf{F}_{tot} = \mathbf{F}_{tot}^{in} + \mathbf{F}_{tot}^{out} = \sum_i^N \mathbf{F}_i^{in} + \sum_i^N \mathbf{F}_i^{out} \quad (1)$$

若将第 j 个质点对第 i 个质点的内力记为 $\mathbf{F}_{j \rightarrow i}$ 则上式中

$$\sum_i \mathbf{F}_i^{in} = \sum_{i,j}^{i \neq j} \mathbf{F}_{j \rightarrow i} \quad (2)$$

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。所以，质点系中合内力为零，系统所受合力等于合外力

$$\mathbf{F}_{tot} = \mathbf{F}_{tot}^{out} = \sum_i^N \mathbf{F}_i^{out} \quad (3)$$

质心 质心系

预备知识 体积分^[136]，质点系^[204]

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

$$\mathbf{r}_{Ac} = \mathbf{r}_{AB} + \mathbf{r}_{Bc} \quad (4)$$

其中 \mathbf{r}_{AB} 是 A 系原点指向 B 系原点的矢量。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时，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**.

刚体

预备知识 矢量叉乘^[99]，球坐标系^[12]，质心^[205]

当我们要考虑一个物体的质量分布带来的力学效应时，就不能再将其简化为一个质点。许多情况下我们考虑的物体在某过程中形变较小可忽略不计，这时我们就可以忽略它运动过程中的任何形变，从而大大简化问题。我们把这种模型叫做**刚体**。在分析刚体时，我们通常把刚体看做是质点系。要这么做，我们可以把刚体划分为无限多个体积无限小的微元，再把每个微元近似为一个质量相同的质点即可。

在没有任何约束的情况下，每个质点有 3 个自由度，即用三个完全独立的变量才能完全确定位置，所以 N 个质点组成的质点系共有 $3N$ 个自由度。然而完全确定一个刚体的位置只需要 6 个变量，这是因为刚体模型通过假设“任意两个质点之间距离不变”，给质点系的位置施加了 $3N - 6$ 个条件。如何得出 6 个自由度呢？我们可以假设第一个质点有 3 个自由度，第二个质点由于要与第一个质点保持距离不变，只有 2 个自由度，而第三个质点要与前两个质点保持距离不变，只有 1 个自由度。有了前三个质点后（假设它们不共线），剩下所有质点的位置都可以由与这三个质点的距离确定，所以任何刚体都有 6 个自由度。

我们可以这么划分 6 个自由度：令其中 3 个决定刚体质心的位置，2 个决定过质心的某条轴的朝向（球坐标中的两个角度），1 个决定刚体绕这条轴旋转的角度。

刚体的绕轴转动

若刚体绕固定轴转动，那么刚体的位置只需一个变量即可完全确定（一个自由度），我们令该变量为转角 θ . θ 关于时间 t 的导数就是刚体绕轴旋转的角速度 ω . 我们不妨再定义角速度 ω 关于时间的导数（即 θ 关于时间的二阶导数）为角加速度，记为 α .

我们可以把刚体的绕轴转动类比质点的直线运动，把 θ , ω 和 α 分别类比为直线运动中的位置 x , 速度 v 和加速度 a , 因为后三个变量之间的数学关系是完全相同的. 于是我们可以立即得到匀变速转动（即 α 为常数）的一些公式，如

$$\theta = \theta_0 + \omega t + \frac{1}{2}\alpha t^2 \quad (1)$$

$$\omega_1^2 - \omega_0^2 = 2\alpha\theta \quad (2)$$

在以上三个标量的基础上，我们可以定义它们的矢量形式 $\boldsymbol{\theta}$, $\boldsymbol{\omega}$ 和 $\boldsymbol{\alpha}$, 令它们的方向为转轴的方向，用右手定则^[98] 来判断.

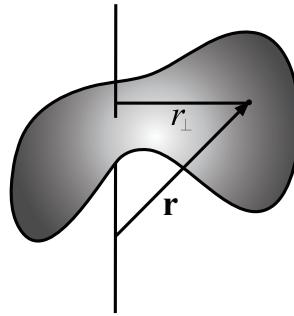


图 1: 刚体绕轴旋转时任意一点的线速度

我们再来考虑刚体旋转时其中任意一点的瞬时速度（如图 1). 刚体绕轴旋转时，刚体中不在轴上的点都做圆周运动，速度大小为 $\omega \times r_{\perp}$. 其中 r_{\perp} 是该点到转轴的垂直距离. 如果令 \mathbf{r} 为转轴上任意一点指向刚体中某点的矢量，根据矢量叉乘^[99] 的几何定义，该点的瞬时线速度可以表示为

$$\mathbf{v} = \mathbf{r} \times \boldsymbol{\omega} \quad (3)$$

二体系统

预备知识 质心 质心系^[205], 自由度^[203]

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, 在任何惯性系中它们的质心都会做匀速直线运动.

现在定义它们的相对位矢 (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, 所以质心系中不受外力的二体系统只有三个自由度^[203]

$$\mathbf{r}_A = \frac{-m_B}{m_A + m_B} \mathbf{R} \quad \mathbf{r}_B = \frac{m_A}{m_A + m_B} \mathbf{R} \quad (3)$$

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 的作用力可以看成等效质点的受力.

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^[181]”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

$$E = \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{R}}^2 + V(R) \quad (9)$$

由于系统不受外力, 机械能守恒.

二体碰撞

预备知识 二体系统^[209]

注意以下讨论的碰撞不必要求在一瞬间发生, 可以拓展到有限距离的作用力甚至无穷远但不断衰减的作用力. 例如考虑两个带电荷的质点的碰撞. 在无穷远处时, 二者之间的作用可忽略, 此时的速度可定义为初速度. 当发生相互作用后, 把两质点互相远离到相距无穷远时的速度定义为末速度.

一维情况

高中物理中, 若两质点的运动限制在同一直线上且碰撞为完全弹性碰撞, 我们可以联立能量守恒和动量守恒两条式子来解出碰撞后的速度. 但这里介绍另一种更简单的方法, 即利用质心系求解. 为了区别于质心系, 我们把原参考系叫做实验室参考系(简称为实验系). 令两质点质量分别为 m_1 和 m_2 , 实验

系中初速度分别为 v_{10} 和 v_{20} , 需要求实验系中的末速度 v_1 和 v_2 . 根据定义, 系统质心的位置为 $x_c = (m_1x_1 + m_2x_2)/(m_1 + m_2)$, 等式两边对时间 t 求导, 得质心的速度为

$$v_c = (m_1v_1 + m_2v_2)/(m_1 + m_2) \quad (1)$$

现在我们在质心系中考虑该问题. 在三维情况下, 质心系中的二体系统只有三个自由度 (式 3^[209]), 不难类推在一维情况下二体系统只有一个自由度. 所以无论维度多少, 在质心系中考虑二体碰撞问题将会简单得多.

由速度叠加原理, 初始时两质点在质心系中的速度分别为

$$v_{c10} = v_{10} - v_c \quad v_{c20} = v_{20} - v_c \quad (2)$$

先考虑质心系中的完全弹性碰撞, 由于两质点的速度大小始终成正比 (质心系^[205]式 8), 为了使能量守恒, 碰撞只能有一种结果, 即两质点的速度方向都取反方向而速度大小保持不变. 现在我们重新回到实验系中, 两质点的末速度分别为

$$v_1 = v_c + (-v_{c10}) = 2v_c - v_{10} \quad v_2 = v_c + (-v_{c20}) = 2v_c - v_{20} \quad (3)$$

代入式 1 即可得到最后结果.

若问题为非完全弹性碰撞, 可设质心系中碰撞后与碰撞前的能量比值为 $\alpha^2 < 1$, 即速度的比值为 α . 碰撞后两质点的质心系速度分别变为 $-\alpha v_{c10}$ 和 $-\alpha v_{c20}$, 变换到实验系中速度为

$$\begin{aligned} v_1 &= v_c + (-\alpha v_{c10}) = (1 + \alpha)v_c - \alpha v_{10} \\ v_2 &= v_c + (-\alpha v_{c20}) = (1 + \alpha)v_c - \alpha v_{20} \end{aligned} \quad (4)$$

三维的情况

由于在多维情况下, 碰撞损失的能量可能与碰撞的角度有关, 这里仅讨论最常见的完全弹性碰撞. 碰撞的轨迹如图 1 所示. 由于质心系中系统的总动量始终为 0 (质心系^[205]式 8), 初状态和末状态中两质点的速度方向相反, 但延长线一般不重合 (否则就变为上面的一维情况). 质点末状态速度与初状态速度的夹角叫做散射角 (scattering angle). 注意质心系中两质点散射角相同, 而实验系中两散射角不必相同. 求散射角需要知道具体的作用力形式, 以下讨论

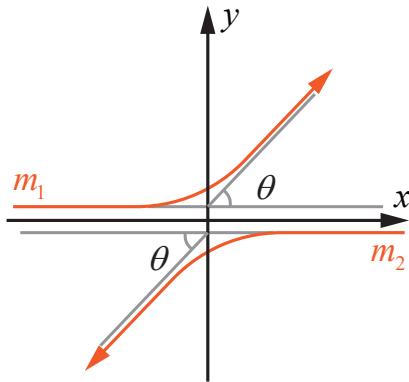


图 1: 质心系中的二体碰撞

假设我们已知质心系中的散射角. 若两质点间的相互作用力与两点的连线共线, 那么质心系中两质点的运动轨迹将始终在同一平面上, 而这在实验系中一般不成立 (当两个质点的入射延长线为两条不平行且不相交的直线时).

令质量分别为 m_1 和 m_2 的两质点初始速度为 \mathbf{v}_{10} 和 \mathbf{v}_{20} , 为了方便, 我们规定质心系的 x 轴与第一个质点在质心系中的入射方向相同, 则质心系中的初始速度分别为

$$\mathbf{v}_{c10} = (v_{10} - v_c) \hat{\mathbf{x}} \quad \mathbf{v}_{c20} = (-v_{20} - v_c) \hat{\mathbf{x}} \quad (5)$$

其中质心速度为

$$\mathbf{v}_c = (m_1 v_1 + m_2 v_2) \hat{\mathbf{x}} / (m_1 + m_2) \quad (6)$$

完全弹性碰撞说明能量守恒, 类比一维的情况可得质心系中两质点末速度的大小分别等于初速度大小. 所以末速度分别为

$$\mathbf{v}_{c1} = (v_{10} - v_c)(\hat{\mathbf{x}} \cos \theta + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta) \quad \mathbf{v}_{c2} = -(v_{20} + v_c)(\hat{\mathbf{x}} \cos \theta + \hat{\mathbf{y}} \sin \theta) \quad (7)$$

最后再变换到实验系, 得末速度分别为

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_c + \mathbf{v}_{c1} \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_c + \mathbf{v}_{c2} \quad (8)$$

质点系的动量

预备知识 质心系^[205]

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 动量定理 (单个质点) ^[185], 质点系^[204]

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 个质点可能受到系统内力 \mathbf{F}_i^{in} 或系统外力 \mathbf{F}_i^{out} . 由单个质点的动量定理^[185],

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_i = \mathbf{F}_i^{in} + \mathbf{F}_i^{out} \quad (1)$$

总动量的变化率为

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_i \frac{d}{dt} \mathbf{p}_i = \sum_i \mathbf{F}_i^{in} + \sum_i \mathbf{F}_i^{out} \quad (2)$$

由“质点系^[204]”中的结论, 上式右边第一项求和是系统合内力, 恒为零. 于是我们得到系统的动量定理

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_i \mathbf{F}_i^{out} \quad (3)$$

质点系的动能 柯尼西定理

预备知识 质点系^[204], 质点系的动量^[212]

柯尼西定理

某参考系中质点系的动能等于该参考系中其质心的动能加上质心系中质点系的动能, 即

$$E_k = \frac{1}{2}Mv_c^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i v_{ci}^2 \quad (1)$$

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_{ci} 是第 i 个质点在质心系中的速度.

例 1 圆环滚动的动能

一个圆环在水平地面上延直线无摩擦地滚动, 其半径为 R , 质量为 m , 角速度为 ω , 求地面参考系中圆环的动能.

圆环质心的速度大小为 $v_c = \omega R$, 圆环相对于圆心旋转的线速度大小处处为 $v_{ci} = \omega R$, 代入式 1 得动能为

$$E_k = \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i \omega^2 R^2 = m\omega^2 R^2 \quad (2)$$

柯尼西定理的证明

在当前参考系中, 第 i 个质点的运动速度为

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_c + \mathbf{v}_{ci} \quad (3)$$

于是有

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_i m_i (\mathbf{v}_c + \mathbf{v}_{ci})^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_c^2 + \frac{1}{2} \sum_i m_i \mathbf{v}_{ci}^2 + \sum_i m_i \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_{ci} \end{aligned} \quad (4)$$

现在只需证明 $\sum_i m_i \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_{ci} = 0$ 即可。考虑到

$$\sum_i m_i \mathbf{v}_c \cdot \mathbf{v}_{ci} = \mathbf{v}_c \cdot \sum_i m_i \mathbf{v}_{ci} \quad (5)$$

而质心系中的质点系动量为零（式 8^[205]），所以

$$\sum_i m_i \mathbf{v}_{ci} = \mathbf{0} \quad (6)$$

证毕。

力矩

预备知识 矢量的叉乘^[99]

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，受力点位矢为 \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），就可以计算物体的受到的力矩。

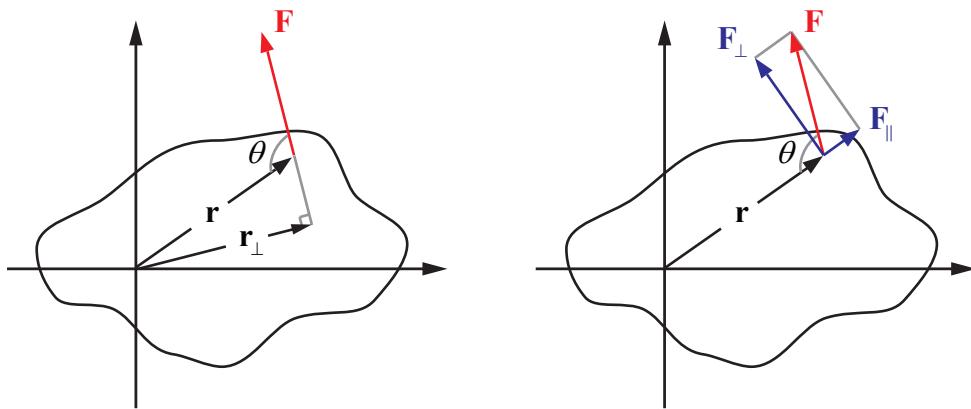


图 1：力矩的两种几何理解

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. 这种定义把力矩看做一种标量 (就像我们讨论一维运动时, 将速度表示成标量, 用正负号区分方向). 另一种是根据叉乘的定义^[99], 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

若物体受到若干个力, 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^[99]. 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）[\[186\]](#)

刚体的静力平衡

预备知识 动量定理[\[213\]](#), 角动量定理[\[219\]](#)

结论

在任意参考系中，若刚体所受的合外力，合外力矩都为零，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，而动量等于质心的动量[\[212\]](#) $\mathbf{p}_c = M_c \mathbf{v}_c$ ，所以质心做匀速运动或不动.

刚体合外力矩为零时，质点系角动量守恒[\[219\]](#)，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 4[\[218\]](#)）。当质心匀速运动或不动时质心的角动量不变，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.

例 1

如图 1，一个质量为 m 的线轴被斜挂在墙上，线轴与墙面的摩擦系数为 μ ，线轴的大圆半径为 R ，小圆半径为 r ，求当 α 满足什么条件时，线轴才能不滑落.

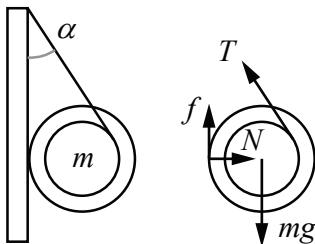


图 1: 线轴的平衡

我们先来看线轴受哪几个力：重力 mg ，绳的拉力 T ，墙的支持力 N 和摩擦力 f . 由摩擦系数的定义和刚体平衡条件可得

$$\begin{cases} f \leq \mu N & (\text{摩擦系数}) \\ N - T \sin \alpha = 0 & (\text{水平方向受力平衡}) \\ T \cos \alpha + f - mg = 0 & (\text{竖直方向受力平衡}) \\ Tr - fR = 0 & (\text{力矩平衡}) \end{cases} \quad (1)$$

其中最后一条力矩平衡是以圆心为原点计算力矩，虽然原则上我们可以取任意点计算力矩，但取在圆心计算最为简单. 除了 α 我们有三个未知数 T, f, N ，用以上三条等式恰好可以把这三个未知数消去，可得关于 α 的不等式

$$\sin \alpha \geq \frac{r}{\mu R} \quad (2)$$

一个有趣的地方在于，不等式中没有出现质量 m . 事实上，我们不使用那条含有 mg 的等式也可以顺利得到答案.

角动量

预备知识 质点的角动量^[186]

系统的角动量

角动量是矢量，若把系统看做质点系，则系统的角动量等于所有质点的角动量矢量叠加.

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{L}_i = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \quad (1)$$

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

$$\mathbf{L}_A = \sum_i \mathbf{r}_{Ai} \times \mathbf{p}_i \quad (2)$$

变换到坐标系 B 中，总角动量为

$$\mathbf{L}_B = \sum_i (\mathbf{r}_{BA} + \mathbf{r}_{Ai}) \times \mathbf{p}_i = \mathbf{r}_{BA} \times \sum_i \mathbf{p}_i + \mathbf{L}_A \quad (3)$$

角动量的分解

质心系中的角动量为

$$\mathbf{L}_0 = \sum_i \mathbf{r}_{ci} \times \mathbf{p}_i \quad (4)$$

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，式 2^[212]）

$$\mathbf{L}_c = \mathbf{r}_c \times (M\mathbf{v}_c) = \mathbf{r}_c \times \mathbf{p}_c \quad (5)$$

现在我们变换到任意坐标系中，令总角动量为 \mathbf{L} ，由式 3 得

$$\mathbf{L} = \mathbf{r}_c \times \sum_i \mathbf{p}_i + \mathbf{L}_0 \quad (6)$$

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 5。最后得到

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_c + \mathbf{L}_0 \quad (7)$$

所以任何坐标系中，系统的总角动量等于系统的质心角动量加质心系中系统的角动量。

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）^[186]，牛顿第三定律^[177]

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若干物体。

推导

推导可类比动量定理^[213]。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

的位矢为 \mathbf{r}_i , 角动量为 \mathbf{L}_i , 力矩为 \mathbf{M}_i , 单个质点的角动量定理^[186]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

$$\sum_i \mathbf{M}_i^{in} = \sum_i \left(\mathbf{r}_i \times \sum_j^{j \neq i} \mathbf{F}_{j \rightarrow i} \right) = \sum_{i,j}^{i \neq j} \mathbf{r}_i \times \mathbf{F}_{j \rightarrow i} \quad (4)$$

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^[215], 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.

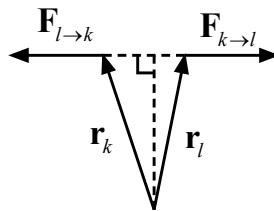


图 1: 两质点的相互作用力对总力矩贡献为零

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 $\mathbf{F}_{l \rightarrow k} = \alpha(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)$, $\mathbf{F}_{k \rightarrow l} = \alpha(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k)$, 直接计算两力矩和得

$$\mathbf{r}_k \times (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)\alpha + \mathbf{r}_l \times (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_k)\alpha = 0 \quad (6)$$

证毕.

例 1 单车轮与转椅实验

小明开始时坐在静止的转椅上，两手握住一个单车轮的轴的两端，单车轮在水平面上转动。这时小明将单车轮上下翻转（仍保持转动），问小明与转椅会如何转动？

假设开始时车轮的角动量向上，那么翻转后车轮的角动量向下，即角动量增量向下。由于角动量守恒，小明的身体和转椅的角动量必须有一个向上的增量，所以转椅最后的旋转方向与轮子开始时的旋转方向相同。

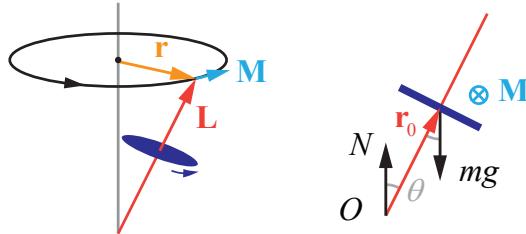


图 2: 陀螺的进动

例 2 陀螺的进动

如图 2 (左)，陀螺旋转时，若它的轴与竖直方向有一定倾角，轴会绕一个竖直轴缓慢旋转，这种现象被称为进动。为了便于分析，我们先假设陀螺进动的角速度比陀螺自转的角速度要慢得多。这样，我们就可以认为陀螺的角动量 \mathbf{L} 与陀螺的轴平行。显然，陀螺的进动意味着陀螺的角动量变化率 $d\mathbf{L}/dt$ 的方向始终垂直于图中 \mathbf{r} 和 \mathbf{L} 所在的平面。根据角动量定理，陀螺所受的力矩 \mathbf{M} 也具有同样的大小和方向。

那么这个力矩是如何产生的呢？我们对陀螺进行受力分析如图 2 (右)，要计算陀螺所受力矩，我们取轴的底端为原点，假设陀螺的轴没有质量，则地面对陀螺的支持力 N 产生的力矩为零，而重力产生的力矩为 $\mathbf{M} = \mathbf{r}_0 \times (\mathbf{mg})$ ，其大小为 $mgr_0 \sin \theta$ ，方向垂直纸面向里，恰好符合陀螺进动的要求。

比较违反直觉的地方在于，陀螺受到的重力是延使陀螺倾倒的方向施加的，然而陀螺不但丝毫不会倾倒（如果不计摩擦），反而其重心会向着与重力垂直的方向移动。

刚体的绕轴转动 转动惯量

预备知识 刚体^[207], 角动量定理^[219]

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. 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

$$I = \int r_{\perp}^2 dm \quad (4)$$

(注意角动量的大小不仅取决于刚体的质量分布, 还取决于转轴的位置和方向) 则刚体沿轴方向的角动量为

$$L_z = I\omega \quad (5)$$

现在来看“角动量定理^[219]”的式 1, 注意等号两边是矢量, 所以各个分量必须相等, 我们有

$$\frac{dL_z}{dt} = M_z \quad (6)$$

将式 5 代入式 6, 并利用角加速度的定义得

$$I\alpha = M_z \quad (7)$$

这就是刚体绕轴转动的动力学方程，其形式可类比牛顿第二定律^[177].

例 1 刚体摆

如图 1，已知质量为 M 的薄片绕某点的转动惯量为 I ，转轴到刚体质心的长度为 r_c ，转轴和质心的连线与竖直方向夹角为 θ ，求刚体的运动方程.

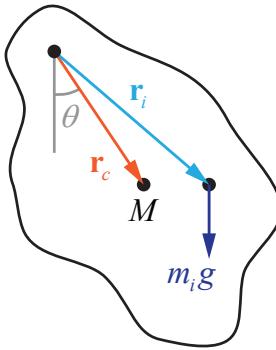


图 1: 刚体摆

首先我们把刚体看做质点系，以转轴为原点计算刚体的合力矩为（由于这是一个平面问题，力矩必然垂直于该平面）

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \sum_i \mathbf{r}_i \times (m_i \mathbf{g}) = \left(\sum_i m_i \mathbf{r}_i \right) \times \mathbf{g} = M \mathbf{r}_c \times \mathbf{g} \\ &= M g r_c \sin \theta \end{aligned} \quad (8)$$

这就说明，刚体所受力矩相当于质量为 M ，长度为 r_c 的单摆所受的力矩. 代入式 7 得刚体摆的运动方程为

$$I \ddot{\theta} = M g r_c \sin \theta \quad (9)$$

可以验证当刚体的质量全部集中在质心时 ($I = M r_c^2$) 我们就得到了单摆的运动方程式 4^[190].

习题 1 陀螺进动的角速度

在“角动量定理^[219]”的例 2 中，如果除 r_0, m, g 外，还知道陀螺的转动惯量为 I 和陀螺的角速度 ω ，试证明陀螺进动的角速度为

$$\Omega = \frac{m g r_0}{I \omega} \quad (10)$$

注意进动角速度与陀螺倾角 θ 无关.

平行轴定理与垂直轴定理

预备知识 转动惯量^[222]

平行轴定理

若我们已知刚体关于一个通过其质心的轴（称为质心轴）的转动惯量为 I_0 ，那么我们可以通过平行轴定理简单地求出刚体关于另一个与质心轴平行的轴的转动惯量 I ，而无需重新算一次定积分。令两个轴之间的距离为 R ，刚体质量为 M ，则计算公式为

$$I = I_0 + MR^2 \quad (1)$$

要证明该式，我们把刚体看做质点系，令质心轴到质点 m_i 的垂直矢量为 \mathbf{r}_i ，平行轴到质心轴的垂直矢量为 \mathbf{R} ，则刚体关于平行轴的转动惯量为

$$I = \sum_i m_i (\mathbf{R} + \mathbf{r}_i)^2 = R^2 \sum_i m_i + \sum_i m_i r_i^2 + 2\mathbf{R} \cdot \sum_i m_i \mathbf{r}_i \quad (2)$$

由于质心轴经过刚体的质心，上式最后一项中的求和为零（式 7^[205]），而右边第二项恰好是 I_0 ，右边第一项中 $\sum_i m_i = M$ ，立即可得式 1. 证毕。

垂直轴定理

若我们要求一个刚体薄片关于一条与其垂直的轴（称为垂直轴）的转动惯量 I ，我们可以在薄片上取两个互相垂直且与垂直轴相交的轴并分别计算薄片关于这两条轴的转动惯量 I_x 和 I_y 。这样就有

$$I = I_x + I_y \quad (3)$$

要证明该式，我们建立空间直角坐标系，令垂直轴与 z 轴重合，另外两条轴分别与 x 轴和 y 轴重合。把刚体看做质点系，令质点 m_i 的坐标为 $(x_i, y_i, 0)$

$$I = \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2) = \sum_i m_i x_i^2 + \sum_i m_i y_i^2 = I_x + I_y \quad (4)$$

证毕。

常见几何体的转动惯量

预备知识 转动惯量^[222]

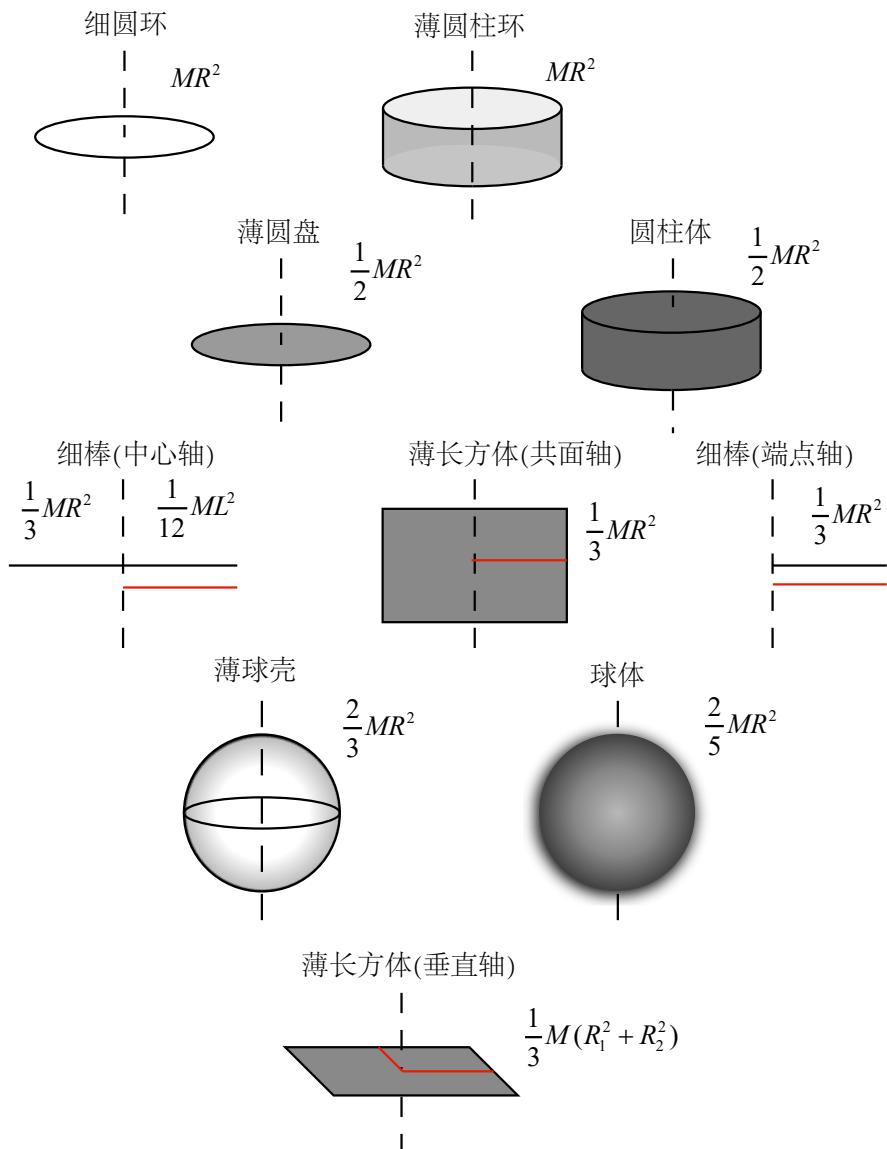


图 1: 常见几何体的转动惯量, 虚线为转轴, 物体质量 M 均匀分布, R 为几何体的半径或红线标注的长度.

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², 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

$$I = \int r^2 \sigma ds = \int_0^{2\pi} \int_0^R \sigma r^2 \cdot r dr d\theta = 2\pi\sigma \int_0^R r^3 dr = \frac{1}{2}\sigma\pi R^2 R^2 = \frac{1}{2}MR^2 \quad (3)$$

圆柱可看做由许多相同的薄圆盘组成, 转动惯量系数相同.

²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

球壳可以看做由许多细圆环组成，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

$$\begin{aligned} I &= \int r^2 \sigma ds = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (R \sin \theta)^2 \sigma R^2 \sin \theta d\theta d\phi = 2\pi\sigma R^4 \int_0^\pi \sin^3 \theta d\theta \\ &= 2\pi\sigma R^4 \int_{-1}^1 (1 - \cos^2 \theta) d\cos \theta = \frac{2}{3}(\sigma 4\pi R^2) R^2 = \frac{2}{3}MR^2 \end{aligned} \quad (5)$$

其中对 θ 的积分使用了换元积分法。

球体

球体可以看做由许多薄球壳组成，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

$$I = \frac{1}{3}(MR_1^2 + MR_2^2) \quad (8)$$

刚体的平面运动方程

预备知识 动量定理^[213], 角动量定理^[219]

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³

$$\frac{d\mathbf{L}_c}{dt} = I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = I\boldsymbol{\alpha} \quad (4)$$

³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^[219] 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

$$I\boldsymbol{\alpha} = \sum_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{F}_i \quad (7)$$

例 1

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？

首先考虑质心的运动，细棒所受外力只有一个恒力，所以由式 1 质心沿 x 方向做匀加速运动。再来看质心系中细棒的转动由“转动惯量^[222]”中例 1 可知细棒绕其质心做单摆运动。

浮力

等效法

我们先用一个简单易懂的方式解释浮力。假设在重力加速度为 g 的环境中，容器中密度为 ρ_0 的液体完全静止。这时令液体内部有一任意形状的闭合曲面，体积为 V_0 。把曲面内部的液体作为一个整体做受力分析，其质量为 $m = \rho_0 V_0$ ，所受重力为 $mg = \rho_0 V_0 g$ 。由于曲面中液体保持静止，说明曲面外的液体对曲面内的液体施加了相同大小的浮力。现在我们如果把曲面内的液体替换为一块密度为 ρ 的物体，由于曲面形状不改变，外界液体对该物体的浮力仍然为

$$F = \rho_0 V_0 g \quad (1)$$

注意 V_0 为物体在水中部分的体积，如果物体只有部分在水中， V_0 将小于物体的体积。

散度法

预备知识 散度定理^[154]

现在我们用面积分的方法表示浮力。令 z 轴竖直向上，且水面处 $z = 0$ ，则水面下压强为

$$P = -\rho_0 g z \quad (2)$$

现在把上述的闭合曲面划分为许多个微面元，第 i 个面元用矢量 $\Delta \mathbf{S}_i$ 表示，其中模长为面元的面积，方向为从内向外的法向。这个面元受到外界液体的压力为

$$\Delta \mathbf{F}_i = -P \Delta \mathbf{S}_i = \rho_0 g z \Delta \mathbf{S}_i \quad (3)$$

现在把所有面元所受的压力求和，并用曲面积分^[147] 表示为

$$\mathbf{F} = \oint \rho_0 g z \, d\mathbf{S} \quad (4)$$

这就是物体所受的浮力。我们先计算其 z 分量，等式两边点乘 $\hat{\mathbf{z}}$ 得

$$F_z = \oint (\rho_0 g z \hat{\mathbf{z}}) \cdot d\mathbf{S} \quad (5)$$

我们可以把括号内的矢量看做一个矢量场 \mathbf{A} ，其散度为

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial}{\partial z} (\rho_0 g z) = \rho_0 g \quad (6)$$

对上式应用散度定理^[154]，得

$$F_z = \int \nabla \cdot \mathbf{A} \, dV = \rho_0 g V_0 \quad (7)$$

再来计算 x 和 y 分量的浮力，由于

$$\nabla \cdot (\rho_0 g z \hat{\mathbf{x}}) = \nabla \cdot (\rho_0 g z \hat{\mathbf{y}}) = 0 \quad (8)$$

两个水平分量为零。可见该结论与“等效法”中得出的一致。

第三章

振动与波动

振动的指数形式

预备知识 简谐振子^[187], 二阶常系数齐次微分方程^[75]

简谐振子的微分方程

$$m\ddot{x} = -kx \quad (1)$$

是一个二阶常系数齐次微分方程. 其复数域的通解可以表示为

$$x(t) = C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t} \quad (2)$$

其中 C_1, C_2 是任意复常数. 由于指数函数的运算往往比三角函数方便, 物理或工程中常常用指数函数表示振动, 即把式 1 的通解记为¹

$$\tilde{x}(t) = \tilde{A} e^{-i\omega t} \quad (3)$$

其中 \tilde{A} 是一个复数², 称为复振幅, \tilde{A} 的模长 $A = |\tilde{A}|$ 就是振幅, \tilde{A} 幅角的相反数 $\varphi_0 = -\arg(\tilde{A})$ 就是初相位³. 当我们用式 3 表示振动时, 其实部表示质点的坐标, 虚部没有物理意义.

为了验证式 3 的确包含了实数域的通解, 我们可以先把复振幅表示为 $\tilde{A} = A e^{-i\varphi_0}$, 代入式 3, 再取实部得

$$x(t) = \operatorname{Re}[\tilde{x}(t)] = A \operatorname{Re}[e^{-i(\omega t + \varphi_0)}] = A \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (4)$$

振动的叠加

这里举一个例子说明使用指数函数比三角函数方便. 假设有若干个频率相同但振幅和初相位各不相同的振动 $x_i(t) = A_i \cos(\omega t + \varphi_{0i})$, 现在我们来计算它们叠加的结果, 即 $\sum_i x_i(t)$. 若用两角和公式直接计算, 得

$$\begin{aligned} \sum_i x_i(t) &= \sum_i [A_i \cos \varphi_{0i} \cos(\omega t) - A_i \sin \varphi_{0i} \sin(\omega t)] \\ &= \sum_i (A_i \cos \varphi_{0i}) \cos(\omega t) - \sum_i (A_i \sin \varphi_{0i}) \sin(\omega t) \end{aligned} \quad (5)$$

¹ 式 3 中 $e^{-i\omega t}$ 里的负号是一种习惯, 有些教材中也会使用正号. 无论使用哪一种, 必须在计算中保持一致.

² 在变量上方加波浪线通常为了强调该变量是一个复数, 但为了书写方便有时候也会省略, 需要从语境中判断.

³ 如果式 3 中没有负号, 则初相位定义为 $\varphi_0 = \arg(\tilde{A})$

分别令 $C = \sum_i A_i \cos \varphi_{0i}$, $D = \sum_i A_i \sin \varphi_{0i}$, 且令 $A = \sqrt{C^2 + D^2}$, 以及令 φ_0 满足 $\cos \varphi_0 = C/A$, $\sin \varphi_0 = D/A$, 则上式变为

$$\sum_i x_i(t) = A[\cos \varphi_0 \cos(\omega t) - \sin \varphi_0 \sin(\omega t)] = A \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (6)$$

可见任意多个相同频率的简谐波叠加仍然是该频率的一个简谐波.

若我们用指数形式的振动来进行同样的计算, 第 i 个振动可表示为 $\tilde{x}_i(t) = \tilde{A}_i e^{-i\omega t}$, 其中 $\tilde{A}_i = A_i e^{-i\omega \varphi_{0i}}$. 求和得

$$\sum_i \tilde{x}_i(t) = \left(\sum_i \tilde{A}_i \right) e^{-i\omega t} \quad (7)$$

令 $\tilde{A} = \sum_i \tilde{A}_i$, $A = |\tilde{A}|$, $\varphi_0 = -\arg(\tilde{A})$, 则最后结果为

$$\sum_i \tilde{x}_i(t) = \tilde{A} e^{-i\omega t} \quad (8)$$

$$\sum_i x_i(t) = \operatorname{Re} [\tilde{A} e^{-i\omega t}] = A \cos(\omega t + \varphi_0) \quad (9)$$

不难证明上式的 A 和 φ_0 与式 6 得到的 A 和 φ_0 相同, 但是这里的推导的过程却更为简洁.

受阻简谐振子

预备知识 简谐振子^[187], 二阶常系数齐次微分方程的^[77]

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 $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ 是固有振动频率 ($\alpha = 0$ 时的振动频率), 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[77]”，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

$$y = C_1 e^{r_1 x} + C_2 e^{r_2 x} \quad (5)$$

这种情况下，阻力系数太大以至于质点直接减速回到平衡位置而无法发生任何振动。

2. 有一个重根 r ($\alpha^2 - 4km = 0$)，方程的通解为

$$y = C_1 e^{rx} + C_2 x e^{rx} \quad (6)$$

这是质点振动与不振动的临界点。

3. 两个复数根 r_1, r_2 ($\alpha^2 - 4km < 0$ ，最常讨论和应用的情况)

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

其中

$$r = -\frac{\alpha}{2m} \quad \omega = \frac{1}{2m} \sqrt{4mk - \alpha^2} = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\alpha^2}{4m^2}} \quad (8)$$

这种情况下，质点做振幅不断衰减的振动，衰减系数 r 与阻力系数成正比。若令（见简谐振子[187] 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 $r^2 + \omega^2 = \omega_0^2$.

简谐振子受迫运动

预备知识 受阻简谐振子^[233], 振动的指数形式^[232]

在受阻弹簧振子的基础上, 若给振子额外施加一个周期变化的力(驱动力), 得到微分方程如下.

$$m\ddot{y} = -\alpha\dot{y} - ky + f(t) \quad (1)$$

以下只讨论 $f(t)$ 为简谐函数的情况, 令其振幅为 B , 频率为 ω . 我们姑且假设经过足够长的时间后, 该弹簧振子也会做简谐振动, 振动频率等于 $f(t)$ 的频率. 若能找到一个这样的解, 就说明该假设是对的.

为了方便计算, 我们用指数形式表示振动, 设

$$\tilde{y}(t) = \tilde{A}e^{-i\omega t} \quad \tilde{f}(t) = \tilde{B}e^{-i\omega t} \quad (2)$$

由于我们的微分方程是线性的, 如果复数形式的 $y(t)$ 和 $f(t)$ 能满足微分方程, 那么它们的实部也能满足该微分方程. 将它们代入式 1, 得

$$\tilde{A} = \frac{\tilde{B}}{k - \omega^2 m - i\alpha\omega} \quad (3)$$

由于弹簧振子的固有频率为 $\omega_0 = \sqrt{k/m}$, 上式可用 ω_0 表示为

$$\tilde{A} = \frac{\tilde{B}}{m(\omega_0^2 - \omega^2) - i\alpha\omega} \quad (4)$$

上式两边求模长, 得到简谐振子的振幅 $A = |\tilde{A}|$ 与驱动力频率 ω 的关系, 称为幅频关系

$$A = \frac{B}{\sqrt{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 m^2 + \alpha^2 \omega^2}} \quad (5)$$

假设 \tilde{B} 的幅角为零, 对 \tilde{A} 求负幅角, 得简谐振子初相位 φ_0 与驱动频率 ω 的关系, 称为相频关系 (arctan 2 的定义见)

$$\varphi_0 = -\arg \tilde{A} = \arctan 2[m(\omega_0^2 - \omega^2), -\alpha\omega] \quad (6)$$

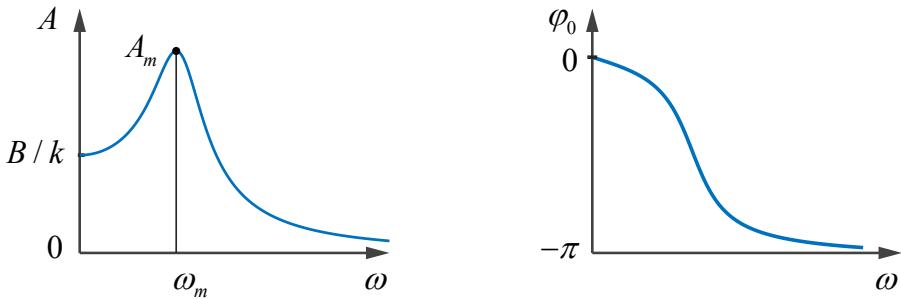


图 1: 幅频曲线和相频曲线

式 5 的根号内是关于 ω^2 的二次函数，求得二次函数最小值的位置为

$$\omega_m = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\alpha^2}{2m^2}} \quad (7)$$

幅频曲线可改写为

$$A = \frac{B}{m\sqrt{(\omega^2 - \omega_m^2)^2 + (\omega_0^4 - \omega_m^4)}} \quad (8)$$

所以 A 的最大值为

$$A_m = \frac{B}{m\sqrt{\omega_0^4 - \omega_m^4}} \quad (9)$$

由式 8 可得，当 $\omega = 0$ 和 $\omega \rightarrow +\infty$ 时，振幅分别为 B/k 和 0。前者代表施加的是一个恒力，结论符合胡克定律。

再来观察相频曲线，注意初相位始终为负，说明简谐运动的相位始终落后于驱动力的相位，且频率越快，落后越多。由式 6 可知当 $\omega \rightarrow +\infty$ 时相位恰好落后 π 。

平面波

预备知识 矢量点乘^[94]，简谐振子^[187]

我们先来看一个一维的平面波，一个常用的例子是一根无限长的弦，静止的时候弦与 x 轴重合，任何时刻 t ，弦的波函数（即形状）可以用 $y(x, t)$ 来描述。若

$$y(x, t) = A \cos(kx - \omega t + \varphi_0) \quad (1)$$

则我们把这个波函数称为平面波，如图 1 所示⁴.

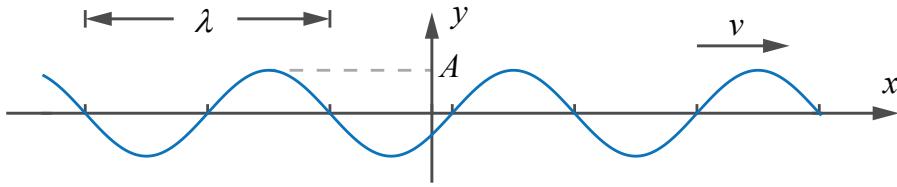


图 1: 平面波

我们定义图中的 A 为振幅，定义一个周期⁵为波长，记为 λ . 与波长一一对应的一个量是式 1 中的 k ，称为波数. 波长与波数的关系可以类比简谐振子^[187]的角频率 ω 与周期 T 的关系，即

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2)$$

我们再来看波函数随时间的变化，如果在弦的某个位置做一个标记并观察其运动，则式 1 中 x 可视为常数，我们立即得到一个简谐振动，角频率为 ω ，初相位为⁶ $-kx - \varphi_0$.

我们在观察平面波的时候，通常会想象它在移动（虽然弦上每个点的 x 坐标并不改变），我们把这种移动的速度叫做波速 v . 把式 1 稍作整理得

$$y(x, t) = A \cos \left[k \left(x - \frac{\omega}{k} t \right) + \varphi_0 \right] \quad (3)$$

由于函数 $f(x - x_0)$ 可以看做 $f(x)$ 向 x 轴正方向平移 x_0 得到的函数，上式也可以看做 $t = 0$ 时刻的波函数向 x 轴正方向平移 $\omega t / k$ 得到的波函数. 将平移距离除以 t 就得到了单位时间移动的距离，即波速

$$v = \frac{\omega}{k} \quad (4)$$

如果将 $\omega = 2\pi/T$ 和 $k = 2\pi/\lambda$ 代入上式，得到波速的另一个表达式

$$v = \frac{\lambda}{T} \quad (5)$$

这里的 T 是振动周期. 也可以令振动频率 $f = 1/T$ ，则上式又变为

$$v = \lambda f \quad (6)$$

⁴需要注意的是，图中的横轴是位置 x 而不是时间 t ，要避免将质点振动的位移—时间图与该图混淆.

⁵不是时间周期而是空间周期

⁶由于余弦函数是偶函数，我们不妨将 \cos 的自变量取相反数使 ωt 的符号为正.

横波与纵波

以上我们看到的波函数表示横波，即质点振动的方向与波的传播方向垂直。与横波相对的另一类波叫做纵波，即质点振动方向与波的传播方向相同。纵波的波函数与横波相同，只是因变量的意义由垂直方向的位移改为了平行方向的位移（不妨记为 ξ ）

$$\xi = A \cos(kx - \omega t + \varphi_0) \quad (7)$$

二维和三维的平面波

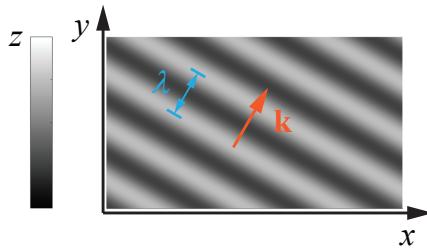


图 2: 二维平面波

如图 2，我们可以用函数 $z(x, y, t)$ 表示一个二维的平面波（横波）。波长的定义与一维情况相同，在 $k = 2\pi/\lambda$ 的基础上，我们定义波矢 \mathbf{k} 的方向为波速的方向。观察图中的波可以发现，沿波矢方向移动 l ，相位变化为 kl ，沿垂直波矢方向移动 l ，相位不改变，沿任意其他方向移动 l ，相位变化为 $kl \cos \theta$ ，其中 θ 是移动方向与 \mathbf{k} 方向的夹角。于是我们可以用点乘来表示相位随空间的变化

$$\Delta\varphi = \mathbf{k} \cdot \Delta\mathbf{r} = k_x \Delta x + k_y \Delta y \quad (8)$$

于是我们可以写出波函数为

$$z = A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varphi_0) \quad (9)$$

要表示纵波，同样把 z 换位 ξ 即可。

类似地，三维空间中的平面波可表示为

$$\mathbf{s} = \mathbf{A} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varphi_0) \quad (10)$$

其中 \mathbf{k} 和 \mathbf{r} 是三维矢量. 注意这里的 \mathbf{r} 表示介质静止时某质点的位矢. 如果波函数表示横波, 矢量振幅 \mathbf{A} 必须垂直于波矢 \mathbf{k} , 其方向叫做极化方向. 如果波函数表示纵波, \mathbf{A} 必须与 \mathbf{k} 同向.

波函数的复数表示

预备知识 振动的指数形式^[232]

用复数表示波函数, 往往可以化简书写和计算. 类比式 3^[232], 我们可以把平面波表示为指数形式⁷

$$\tilde{s} = \mathbf{A} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varphi_0)} \quad (11)$$

注意只有实部表示质点的位移, 虚部无物理意义.

一维波动方程

预备知识 简谐振子^[187], 导数与差分^[56], 平面波^[236]

横波

我们假设有一根无限长的弦, 质量线密度为 λ , 弦的张力(即拉力)为 T , 弦静止时与 x 轴重合. 假设 t 时刻的波函数(即弦的形状)为 $y(x, t)$, 且弦的振幅较小, 下面我们来求波函数所满足的微分方程, 称为**一维波动方程**.

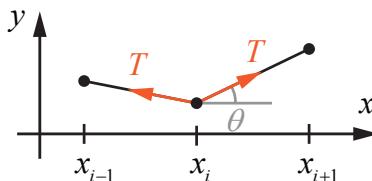


图 1: “微元法”分析弦的波动

我们用“微元法”的思想, 把弦划分为许多小线段, 每段长度为 h , 质量为 $m_i = \lambda h$, 且质量都集中在左端的端点 x_i 处. 下面我们来考察质点 m_i 的受

⁷现在我们知道为什么振动的指数形式中 ωt 要带一个负号了, 这样就可以让波动的指数形式中 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ 项为正.

力情况（图 1）。令 m_{i+1} 对 m_i 的拉力方向与 x 轴夹角为 θ ，由于弦的波动较小，可以认为 θ 很小，这样来自 m_{i+1} 的拉力的两个分量为

$$\begin{cases} F_x = T \cos \theta \approx T \\ F_y = T \sin \theta \approx T \tan \theta = T \frac{y(x_i + h) - y(x_i)}{h} \end{cases} \quad (1)$$

同理，来自 m_{i-1} 的拉力的两个分量为

$$\begin{cases} F'_x \approx -T \\ F'_y \approx T \frac{y(x_i - h) - y(x_i)}{h} \end{cases} \quad (2)$$

把式 1 和式 2 相加，得 m_i 受 x 方向的合力为零， y 方向的合力为

$$F_y = T \frac{y(x_i + h) - 2y(x_i) + y(x_i - h)}{h} \quad (3)$$

结合牛顿定律，并代入 $m_i = \lambda h$ ，有

$$\lambda \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = T \frac{y(x_i + h) - 2y(x_i) + y(x_i - h)}{h^2} \quad (4)$$

注意到 h 很小，由式 5^[56] 可得等式右边为 $T \partial^2 y / \partial x^2$ 。于是我们得到波动方程为

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} - \frac{\lambda}{T} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 0 \quad (5)$$

由于这个方程中未知函数 $y(x, t)$ 是一个多元函数，且出现了偏微分，我们把它叫做偏微分方程。

纵波



图 2: 一个常见的纵波模型

以上弦模型中的波动显然是一个横波，我们也可以建立一个纵波的模型。如图 2，我们假设一条无限长的弹簧上的质量都集中于等间距的 x_i ，间距为 h 。若弹簧的平均线密度为 λ ，则每个质点的质量为 $m_i = \lambda h$ 。为了描述弹簧的弹

性，我们令单位长度弹簧的弹性系数为 k ，则长为 h 的一小段弹簧弹性系数为 k/h 。若用 ξ_i 来描述 m_i 在 x 方向的位移，我们可以列出 m_i 的运动方程为

$$\lambda h \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = F_i = \frac{k}{h} [\xi(x_i + h) - 2\xi(x_i) + \xi(x_i - h)] \quad (6)$$

同样利用式 5^[56] 得波动方程为

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - \frac{\lambda}{k} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = 0 \quad (7)$$

方程的解

第四章

中心力场问题

万有引力 引力势能

预备知识 牛顿运动定律^[177]

万有引力和引力场

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 , 则质点 1 对质点 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, 质点 2 对质点 1 的万有引力为 $\mathbf{F}_{21} = -\mathbf{F}_{12}$, 符合牛顿第三定律.

我们类比高中所学电场的概念, 把以上 m_1 对 m_2 的作用力看做是 m_1 在空间中产生的引力场对 m_2 的作用力. 定义 m_1 产生的引力场为

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}) = -\frac{Gm_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \quad (2)$$

若 m_1 是某天体的质量, 这里的 \mathbf{g} 就是它的重力加速度. 可见重力加速度会随位置的不同而变化.

万有引力势能

预备知识 力场 势能^[181], 球坐标系中的梯度算符

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^[181]. 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^[178]可以用线积分^[145]表示(以 r 作为参数)

$$W = \int_{\mathcal{L}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{r_1}^{r_2} F(r) dr \quad (3)$$

其中第二步是因为

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = F(r)\hat{\mathbf{r}} \cdot (dr\hat{\mathbf{r}} + r d\theta\hat{\boldsymbol{\theta}}) = F(r) dr \quad (4)$$

显然线积分的结果只与初末位置（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^[181] 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

$$V(\mathbf{r}_1) - V(\mathbf{r}_2) = \int_{r_1}^{r_2} F(r) dr = -GMm \int_{r_1}^{r_2} \frac{1}{r^2} dr = -GMm \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) \quad (5)$$

可见任意位置的势能函数可以取

$$V(\mathbf{r}) = V(r) = -\frac{GMm}{r} \quad (6)$$

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

$$V = - \int F(r) dr \quad (7)$$

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

$$\mathbf{F} = -\nabla V = GMm \left(\hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \frac{1}{r} = -\frac{GMm}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (8)$$

也可以使用直角坐标的梯度

$$\mathbf{F} = -\nabla V = GMm \left(\hat{\mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (9)$$

以 x 分量为例

$$\frac{\partial}{\partial x} (x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2} = -x(x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} = -\frac{x}{r^3} \quad (10)$$

另外两个分量类似可得 $-y/r^3$ 和 $-z/r^3$ ，代入式 9 得

$$\mathbf{F} = -\nabla V = -\frac{GMm}{r^3} (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}) = -\frac{GMm}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} = -\frac{GMm}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (11)$$

预备知识 牛顿第二定律^[177], 万有引力^[243]

与数学公式不同, 物理公式中的物理量通常既包含数值又包含量纲, 如 $x = 10 \text{ cm}$. 但有时候 (例如数值计算时) 我们需要将含有量纲的公式转换为不含量纲的物理公式 (因为计算机程序中的变量不含量纲), 且公式中的常量 (如万有引力常数 G) 越少越好以尽可能减少计算量. 我们通过几个例子来说明转换过程.

例 1 牛顿第二定律

国际单位制下的牛顿第二定律公式为

$$F = ma \quad (1)$$

我们先定义几个含量纲的常量例如 $\beta_F = 1 \text{ N}$, $\beta_m = 1 \text{ kg}$, $\beta_a = 1 \text{ m/s}^2$. 把不含量纲的力, 质量和加速度分别为 F_a, m_a, a_a , 则有 $F = F_a \beta_F$, $m = m_a \beta_m$, $a = m_a \beta_a$. 代入上式得

$$F_a = \frac{\beta_m \beta_a}{\beta_F} m_a a_a \quad (2)$$

由于国际单位定义 $1 \text{ N} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m/s}^2$, 上式中 $\beta_m \beta_a / \beta_F = 1$, 所以不含量纲的牛顿第二定律为

$$F_a = m_a a_a \quad (3)$$

以上的做法看起来似乎并没有什么意义, 这是因为我们把每个常量 β 都定义为一个相应的国际单位. 事实上, 只要保证 $\beta_m \beta_a / \beta_F = 1$, 这三个常量是可以任取的. 例如令 $\beta_m = 1 \text{ g}$, $\beta_a = 1 \text{ cm/s}^2$, $\beta_F = 10^{-5} \text{ N}$, 上式仍然成立.

例 2 万有引力公式

国际单位下的万有引力公式为

$$F = G \frac{Mm}{r^2} \quad (4)$$

其中 $G \approx 6.674 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{kg}^{-1} \text{s}^{-2}$. 在例 1 的基础上定义 $r = \beta_x r_a$, 则有

$$F_a = \frac{G \beta_m^2}{\beta_F \beta_x^2} \frac{M_a m_a}{r_a^2} \quad (5)$$

我们若想让新的不含量纲的万有引力公式也不含 G 以减少计算量, 即

$$F_a = \frac{M_a m_a}{r_a^2} \quad (6)$$

只需令所有的 β 满足 $G\beta_m^2/(\beta_F\beta_x^2) = 1$, 例如 $\beta_x = 1 \text{ m}$, $\beta_m = 1.224 \times 10^5 \text{ kg}$, $\beta_F = 1 \text{ N}$.

注意无量纲的物理公式和有量纲的物理公式（无论用什么量纲）存在本质的不同，例如在式 3 中，如果受力物体的质量恰好等于 β_m ，那么公式可以直接写为

$$F_a = a_a \quad (7)$$

而这种写法对含量纲的公式来说是错误的，因为量纲不同的两个物理量不可以相等（或相加）.

无量纲公式转换为含量纲公式

对某个物理量 Q , 有

$$Q = \beta_Q Q_a \quad (8)$$

要把无量纲公式变为含量纲公式，就把式中所有 Q_a 用 Q/β_Q 替换即可. 以式 6 为例，替换后得

$$F = \frac{\beta_x^2}{\beta_F\beta_m^2} \frac{Mm}{r^2} = G \frac{Mm}{r^2} \quad (9)$$

球体的引力场

预备知识 万有引力^[243]

均匀圆环的引力场

我们先来看一个更简单的问题. 如图 1, 求一个质量为 M 半径为 R 的圆环对圆环轴线上任意一点 P 产生的引力场, 已知点 P 到圆环上任意一点的连线长度为 r , 与 z 轴的夹角为 θ .

由问题的对称性, 所求引力场由 P 指向 O . 若我们将圆环划分为许多小段, 每小段质量为 m_i , 则 m_i 在点 P 产生的引力场在 PO 方向的分量为

$$g_i = \frac{Gm_i}{r^2} \cos \theta \quad (1)$$

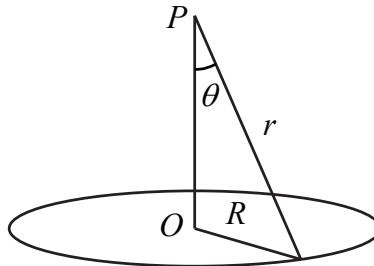


图 1: 圆环的引力场

所以总引力场大小等于

$$g = \sum_i g_i = \frac{GM}{r^2} \cos \theta \quad (2)$$

均匀球壳内的引力场（几何法）

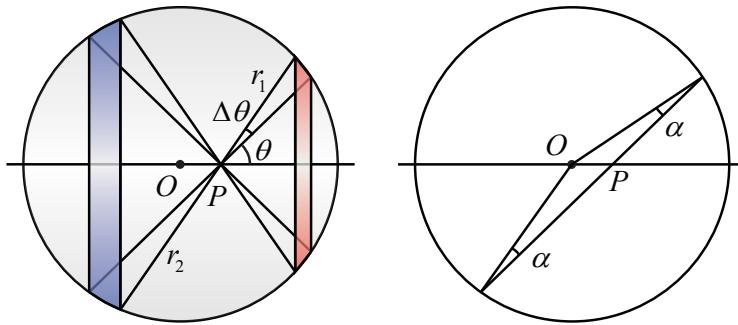


图 2: 几何法

我们现在来证明一个质量面密度为 σ 的均匀球壳在其内部一点 P 产生的引力场为零。如图 2，令球心为 O ，并过 OP 作一个轴，这样球面上任意一点都对应一个张角 θ 。根据不同的 θ ($0 < \theta < \pi/2$) 可将球壳划分为许多对细圆环，每个圆环对应一个 $\Delta\theta$ 。当 $\Delta\theta \rightarrow 0$ 时，如果能证明任意一对细圆环在 P 点产生的引力场都能互相抵消，那么球壳对 P 点的总引力场就为零。

我们先要求出两个圆环的面积，以左图中右边的圆环为例，圆环的周长为 $2\pi r_1 \sin \theta$ ，当 $\Delta\theta \rightarrow 0$ 时，圆环的宽度为 $r_1 \Delta\theta / \cos \alpha$ (α 的定义见右图)，所以圆环的面积等于周长乘以宽度，再乘以面密度 σ 得到右圆环的质量

$$M_1 = 2\pi r_1^2 \sigma \Delta\theta \sin \theta / \cos \alpha \quad (3)$$

同理，左圆环的质量为

$$M_2 = 2\pi r_2^2 \sigma \Delta\theta \sin \theta / \cos \alpha \quad (4)$$

将 M_1, r_1 和 M_2, r_2 分别代入式 2 可得 $g_1 = g_2$ 即两圆环在 P 点产生的引力场大小相等，方向相反，总引力场为零。证毕。

均匀球壳内的引力场（积分法）

下面我们通过直接积分的方法求解球壳内外的引力场分布。注意这个积分较为繁琐，不感兴趣的读者可以直接看结论。

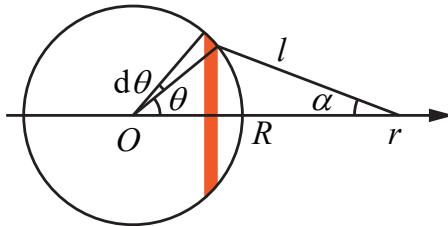


图 3: 积分法

如图 3，令场点离原点 O 的距离为 r （虽然图中 $r > R$ ，但 $r < R$ 时以下推导同样成立）。和以上推导类似，图中圆环的面积为周长乘以宽度，质量为

$$dM = 2\pi R \sin \theta \cdot R d\theta \cdot \sigma = 2\pi R^2 \sigma \sin \theta d\theta \quad (5)$$

圆环在场点产生的引力场为

$$dg = \frac{G dM}{l^2} \cos \alpha \quad (6)$$

其中 $\cos \alpha = (r - R \cos \theta) / l$ 。由余弦定理， $l = \sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta}$ 。将 dM ， $\cos \alpha$ 和 l 代入式 6 再对 θ 作定积分得

$$g = 2\pi R^2 G \sigma \int_0^\pi \frac{(r - R \cos \theta) \sin \theta}{(R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta)^{3/2}} d\theta \quad (7)$$

将上式中的定积分记为 I ，使用第一类换元积分法，令 $x = \cos \theta$ ，得

$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^1 \frac{r - Rx}{(R^2 + r^2 - 2Rrx)^{3/2}} dx \\ &= \frac{1}{2r} \int_{-1}^1 \frac{(r^2 - R^2) + (R^2 + r^2 - 2Rrx)}{(R^2 + r^2 - 2Rrx)^{3/2}} dx \\ &= \frac{r^2 - R^2}{2r} \int_{-1}^1 \frac{1}{(R^2 + r^2 - 2Rrx)^{3/2}} dx + \frac{R^2}{2r} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2Rrx}} dx \end{aligned} \quad (8)$$

这两个积分可以由“积分表^[62]”中的式2结合式1得到.

$$\begin{aligned} I &= \frac{r^2 - R^2}{2r^2 R} \left(\frac{1}{|r - R|} - \frac{1}{|r + R|} \right) - \frac{1}{2r^2 R} (|r - R| - |r + R|) \\ &= \begin{cases} 2/r^2 & (r > R) \\ 0 & (r < R) \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

令球壳的质量为 $M = 4\pi R^2 \sigma$, 则将式9代入式7得引力场为

$$g = \begin{cases} GM/r^2 & (r > R) \\ 0 & (r < R) \end{cases} \quad (10)$$

当 $r < R$ 时, 引力场为零, 与上面的“几何法”结论一致, 当 $r > R$ 时, 我们发现引力场等同于球心处质量相同的质点产生的引力场.

球体的引力场

我们最后来考虑一个体密度为 $\rho(r)$ 的球体在球内外产生的引力场. 我们可以把球体划分成任意多个质量均匀的薄球壳, 若 $r > R$, 每个球壳在场点的引力场都等效于球心处等质量的质点产生的引力场, 所以球体的引力场仍然等于球心处等质量质点产生的引力场.

当 $r < R$ 时, 所有半径大于 r 的球壳在场点的场强为零, 而所有半径小于 r 的球壳在场点的引力场等于球心处等质量的质点产生的引力场. 综上, 有

$$g = \begin{cases} GM_0(r)/r^2 & (r > R) \\ 0 & (r < R) \end{cases} \quad (11)$$

其中

$$M_0(r) = \int_0^r 4\pi r^2 \rho(r) dr \quad (12)$$

中心力场问题

预备知识 极坐标系^[176], 二体系统^[209], 角动量守恒(单个质点)^[186], 机械能守恒(单个质点)^[185]

中心力场问题可以表述为: 在惯性系中, 若一个质点只受来自某固定点的力

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = F(r)\hat{\mathbf{r}} \quad (1)$$

求质点的运动规律.

首先注意力场 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 是一个保守场(见式 3^[243]), 所以中心力场问题也可以用势能函数 $V(r)$ 来描述(式 7^[243]), 且有

$$F(r) = -\frac{dV(r)}{dr} \quad (2)$$

我们已知二体系统^[209]的运动可以等效为单个质点的中心力场问题, 所以在接下来的讨论中, 只需把质点质量 m 和位矢 \mathbf{r} 分别替换成约化质量 μ 和相对矢量 \mathbf{R} 即可拓展到二体系统.

极坐标中的运动方程

由于式 1 中的 $F(r)$ 与位置矢量 \mathbf{r} 的方向无关, 在极坐标系^[9]中处理中心力场问题通常比较简单. 极坐标中质点的速度和加速度^[176]分别为

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\dot{\theta}\hat{\theta} \quad (3)$$

$$\ddot{\mathbf{r}} = (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{r}\frac{d}{dt}(r^2\dot{\theta})\hat{\theta} \quad (4)$$

由式 3 得质点的角动量在极坐标中的表示为

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times (m\dot{\mathbf{r}}) = mr\hat{\mathbf{r}} \times (\dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\dot{\theta}\hat{\theta}) = mr^2\dot{\theta}\hat{\mathbf{z}} \quad (5)$$

其中 $\hat{\mathbf{z}}$ 是垂直于极坐标平面的单位矢量(这个符号来自柱坐标系^[11]).

我们现在把式 4 代入牛顿第二定律^[177] $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$, 由于 \mathbf{F} 只延 $\hat{\mathbf{r}}$ 方向, 有 $d(r^2\dot{\theta})/dt = 0$, 即 $r^2\dot{\theta}$ 为常量, 代入式 5 可知质点角动量守恒. 另外在 $\hat{\mathbf{r}}$ 方向可得

$$m(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) = F(r) \quad (6)$$

使用式 5 消去式 6 中的 $\dot{\theta}$, 得

$$m\ddot{r} = F(r) + \frac{L^2}{mr^3} \quad (7)$$

该式被称为中心力场问题的径向方程.

一维等效势能与稳定轨道

由于式 7 中不含 θ , 我们可以将其等效为一个一维问题, 等号右侧看做等效力 $F'(r)$. 求等效力的反原函数可得一维等效势能

$$V'(r) = V(r) + \frac{L^2}{2mr^2} \quad (8)$$

自然地, 我们可以利用等效一维问题中的能量守恒列出 $r(t)$ 的一阶微分方程¹

$$E = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + V'(r) = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (9)$$

即

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m}[E - V'(r)]} \quad (10)$$

这是一个可分离变量的一阶常微分方程, 分离变量然后两边积分得

$$t = \int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}[E - V'(r)]}} \quad (11)$$

积分后即可逆向得到 $r(t)$.

从一维等效势能还可以判断轨道的稳定性, 我们来看一个例子

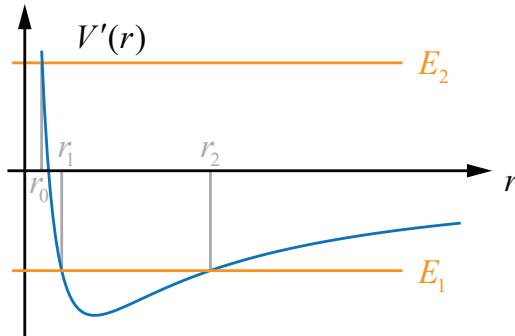


图 1: 万有引力的一维等效势能

例 1 万有引力

对万有引力, $V(r) = -GMm/r$, 等效势能的大致图像如图 1. 注意 $V'(r)$

¹ 式 9 可以在极坐标系中直接推出, 先列出 $E = m\mathbf{v}^2/2 + V(r)$, 再将式 3 代入, 并用式 5 消去 $\dot{\theta}$ 即可.

的形状还取决于常数 L , 但根据 “用极值点确定函数图像^[48]”, 曲线总存在一个最小值, 且 $\lim_{r \rightarrow \infty} V'(r) = 0$, $\lim_{r \rightarrow 0} V'(r) = +\infty$.

若质点具有能量 $E_2 > 0$, 由图可得这个质点不可能一直绕力心旋转, 而是从无穷远处入射, 在距离 r_0 时开始远离力心, 最终回到无穷远. 若质点具有能量 $E_1 < 0$, 由图可知 r 始终在 $[r_1, r_2]$ 区间内往返变动 (在 “开普勒问题^[252]” 中, 我们将会知道 E_1 和 E_2 分别对应椭圆轨道和双曲线轨道). 特殊地, 当质点能量等于 $V'(r)$ 的最小值时, 它与力心的距离将保持不变, 即轨道为圆形. 若给处于圆形轨道的质点一个扰动, r 将在曲线最低点附近振动, 且振动频率由最低点处曲线的二阶导数决定, 我们将这种不会因为扰动而彻底改变的轨道叫做稳定轨道.

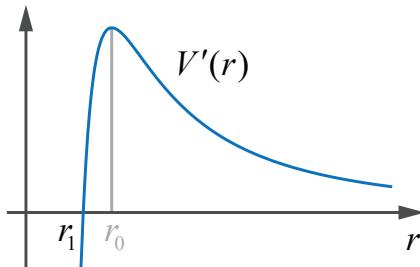


图 2: 四次方反比力的一维等效势能

例 2 四次方反比力

作为一个不稳定轨道的例子, 我们来考察 $V(r) = -k/r^3$, 其中 k 是一个大于零的常数. 等效势能的大致图像如图 2. 若质点的能量大于 $V'(r_0)$, 则质点会从无穷远入射, 穿过力心然后回到无穷远, 若质点的能量小于零, 它将被困在 $r < r_1$ 的圆形势阱内并不断穿过力心. 若质点的能量恰好为 $V'(r_0)$, 那么它将以 r_0 为半径做圆周运动, 然而任何微小的扰动都会使其从势能曲线顶端向两侧滑落, 从而彻底改变轨道的性质. 我们说这样的轨道是不稳定的.

开普勒问题

预备知识 中心力场问题^[249], 万有引力^[243], 椭圆的三种定义^[17], 双曲线的三种定义^[19], 抛物线的三种定义^[21]

在中心力场问题^[249]中, 若 $F(r)$ 是平方反比的吸引力, 即

$$F(r) = -\frac{k}{r^2} \quad V(r) = -\frac{k}{r} \quad (1)$$

(其中 k 为大于零的常数) 则该问题被称为开普勒问题. 对于万有引力, 有 $k = GMm$, 对于电荷间的库仑引力, 有² $k = Qq/(4\pi\epsilon_0)$.

在开普勒问题中, 质点的轨道是圆锥曲线的一种, 能量 E (质点的动能加势能) 和角动量 L 可以唯一地确定轨道的形状和大小. 轨道的形状一般由离心率 e 描述, 大小由半通径 p 描述. $E < 0$ 对应椭圆轨道, $E = 0$ 对应抛物线轨道, $E > 0$ 对应双曲线轨道.

$$e = \sqrt{1 + \frac{2EL^2}{mk^2}} \quad (2)$$

$$p = \frac{L^2}{mk} \quad (3)$$

椭圆或双曲线的大小和形状也可以由参数 a, b 描述. a, b 与 e, p 的对应关系见椭圆和双曲线的三种定义^{[17][19]}.

$$a = \frac{k}{2|E|} \quad (4)$$

$$b = \frac{L}{\sqrt{2m|E|}} \quad (5)$$

证明

我们暂且假设质点轨道为圆锥曲线, 证明过程以后会在“普勒第一定律的证明^[258]”中看到.

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 , 列出总能量 (动能加势能) 守恒

$$\frac{1}{2}mv_1^2 - \frac{k}{r_1} = \frac{1}{2}mv_2^2 - \frac{k}{r_2} \quad (6)$$

²高中所学的库仑定律的系数 k 在大学物理中通常记为 $1/(4\pi\epsilon_0)$, 其中 ϵ_0 为真空中的电介质常数.

以及角动量守恒

$$mv_1r_1 = mv_2r_2 \quad (7)$$

把式 7 中的 v_2 代入式 6, 可得

$$v_1^2 = \frac{2k/m}{r_1 + r_2} \frac{r_2}{r_1} \quad (8)$$

代入式 6 的左边, 并使用 $r_1 + r_2 = 2a$ (式 10^[17]) 得到总能量

$$E = -\frac{k}{2a} \quad (9)$$

把式 8 代入式 7 的左边, 并使用 $r_1r_2 = (a+c)(a-c) = b^2$ 得角动量

$$L = b\sqrt{\frac{mk}{a}} \quad (10)$$

将式 9 和式 10 逆转即可得到式 4 和式 5. 要得到式 2 式 3, 只需使用式 7^[17] 和式 8^[17] 即可.

双曲线轨道

注意开普勒问题中的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 (较远的一支以后会在“反开普勒问题^[261]”中见到). 令双曲线轨道离焦点最近的距离为 r_1 , 可列出总能量守恒

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{1}{2}mv_1^2 - \frac{k}{r_1} \quad (11)$$

该式左边表示质点在无穷远处的总能量, 此时势能为 0, 总能量等于动能. 再来看角动量守恒

$$mv_0b = mv_1r_1 \quad (12)$$

该式左边为无穷远处的角动量. 由式 11^[19] 可知, 在无穷远处, 双曲线的渐近线与焦点的距离为 b .

用以上两式消去 v_1 , 再利用 $r_1 = a - c$, 得

$$E = \frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{k}{2a} \quad (13)$$

再将该式的 v_0 代入式 12 左边得到与式 10 同样的结果.

抛物线轨道

已知抛物线轨道的总能量为零，抛物线轨道离焦点的最近距离为焦距 $p/2$ ，该点处，动量和能量为

$$L = mv_0 \frac{p}{2} \quad (14)$$

$$0 = E = \frac{1}{2}mv_0^2 - \frac{k}{p/2} \quad (15)$$

两式消去 v_0 得角动量为 $L = \sqrt{mkp}$. 证毕.

开普勒三定律

预备知识 开普勒问题[\[252\]](#)

开普勒定律描述了行星围绕固定中心天体的运动的规律. 第一定律给出了行星运动轨道的几何形状，第二定律描述了行星在轨道不同位置的相对速度，第三定律给出周期与轨道长轴的关系. 开普勒三定律最早是开普勒根据对太阳系中行星的观测数据总结而来的，但牛顿运用他的第二定律[\[177\]](#) 和万有引力定律[\[243\]](#)，将开普勒三定律精确地推导了出来.

第一定律：每一个行星都沿各自的椭圆轨道环绕中心天体，中心天体则处在椭圆的一个焦点上.

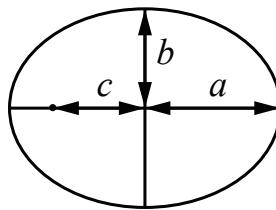


图 1: 开普勒第一定律

第二定律：相等时间内，中心天体与行星的连线所扫过的面积是相等的.

第三定律：椭圆轨道半长轴 (a) 的立方与周期 (公转一圈所用的时间 T) 的平方成正比.

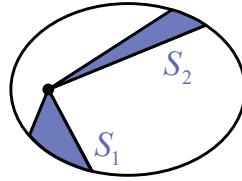


图 2: 开普勒第二定律

数值模拟及证明

以下的推导中，需要忽略行星与恒星的大小，行星之间的相互引力以及中心天体的运动。在进行解析推导之前，不妨先看看更为直观的数值模拟。

- 天体运动的简单数值计算^[313]
- 开普勒第一定律的证明^[258]
- 开普勒第二和第三定律的证明^[260]

拉普拉斯—龙格—楞次矢量

预备知识 开普勒问题^[252]

在开普勒问题中，我们定义拉普拉斯—龙格—楞次矢量（Laplace-Runge-Lenz Vector）（缩写为 LRL 矢量）为

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk\hat{\mathbf{r}} \quad (1)$$

其中 \mathbf{p} 为质点动量， \mathbf{L} 为轨道角动量， k 是一个常数（对万有引力 $k = GMm$ ，对库仑力 $k = Qq/(4\pi\epsilon_0)$ ）。 $\hat{\mathbf{r}}$ 为质点位矢 \mathbf{r} 的单位矢量。在开普勒问题中，可以证明 \mathbf{A} 是一个守恒量。

守恒证明

我们下面证明 $\dot{\mathbf{A}} = 0$ 。对式 1 求时间导数，考虑到中心力场中质点角动量 \mathbf{L} 守恒，有

$$\dot{\mathbf{A}} = \dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} - mk\dot{\hat{\mathbf{r}}} \quad (2)$$

其中由牛顿第二定律^[17] 和万有引力定律^[243]，有

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = -\frac{k}{r^2}\hat{\mathbf{r}} \quad (3)$$

又由“极坐标中单位矢量的偏导^[139]”得

$$\dot{\hat{\mathbf{r}}} = \frac{\partial \hat{\mathbf{r}}}{\partial \theta} \frac{d\theta}{dt} = \dot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} \quad (4)$$

最后由式 5^[249]，极坐标系中的角动量等于

$$\mathbf{L} = mr^2\dot{\theta}\hat{\mathbf{z}} \quad (5)$$

将式 3 至式 5 代入式 2 得

$$\dot{\mathbf{A}} = -\frac{k}{r^2}\hat{\mathbf{r}} \times (mr^2\dot{\theta}\hat{\mathbf{z}}) - mk\dot{\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} = -mk\dot{\theta}(\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{z}} + \hat{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{0} \quad (6)$$

最后一个等号成立是因为 $\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{z}} = -\hat{\boldsymbol{\theta}}$ ，可以类比直角坐标系中的 $\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{z}} = -\hat{\mathbf{y}}$ 。
证毕。

轨道方程 比耐公式

预备知识 中心力场问题^[249]

我们来看“中心力场问题^[249]”中得到的两条运动方程（式 6 和式 5）

$$\ddot{r} - r\dot{\theta}^2 = F(r)/m \quad (1)$$

$$mr^2\dot{\theta} = L \quad (2)$$

为了得到极坐标中 $r(\theta)$ 的微分方程（轨道方程），我们以下用式 2 消去式 1 中的 t 。首先可以把 r 看做复合函数 $r[\theta(t)]$ ，再用链式法则^[51] 处理式 1 的第一项

$$\begin{aligned} \ddot{r} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{dr}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} \right) = \frac{d}{d\theta} \left(\frac{dr}{d\theta} \right) \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{dr}{d\theta} \frac{d^2\theta}{dt^2} \\ &= \frac{d^2r}{d\theta^2} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \frac{dr}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{d\theta}{dt} \right) \frac{d\theta}{dt} \end{aligned} \quad (3)$$

然后把式 2 代入式 1 消去所有 $\dot{\theta} = d\theta/dt$, 得到 r 关于 θ 的微分方程

$$\frac{d^2r}{d\theta^2} \left(\frac{L}{r^2} \right)^2 + \frac{dr}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{L}{r^2} \right) \frac{L}{r^2} - r \left(\frac{L}{r^2} \right)^2 = m^2 F(r) \quad (4)$$

即

$$\frac{d^2r}{d\theta^2} + r^2 \frac{dr}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\frac{1}{r^2} \right) - r = \frac{m^2 r^4}{L^2} F(r) \quad (5)$$

这就是轨道方程. 这个方程比较复杂, 但可以通过换元法化为十分简洁的形式.

令

$$u \equiv \frac{1}{r} \quad (6)$$

代入式 5, 得到 u 关于 θ 的微分方程

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{L^2 u^2} F\left(\frac{1}{u}\right) \quad (7)$$

这个二阶微分方程被称为比耐公式.

开普勒第一定律的证明

预备知识 开普勒三定律[\[255\]](#)

结论

行星轨道是以中心天体为焦点的任意圆锥曲线³. 极坐标中, 圆锥曲线的方程[\[15\]](#) 为

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

令太阳中心天体在坐标原点, 则行星沿该轨道运行.

证明 (LRL 矢量)

³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, 不会绕中心天体旋转. 所以开普勒定律作为行星运动的经验公式, 只描述了椭圆.

预备知识 拉普拉斯—龙格—楞次矢量^[256]

我们先来看一种无需微分方程的推导，将开普勒问题中的 LRL 矢量 \mathbf{A} 点乘位矢 \mathbf{r} 得

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{r} = (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) \cdot \mathbf{r} - mkr \quad (2)$$

由矢量混合积公式式 2^[106]，右边第一项为

$$(\mathbf{p} \times \mathbf{L}) \cdot \mathbf{r} = (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{L} = L^2 \quad (3)$$

令 θ 为从 $\hat{\mathbf{A}}$ 转向 $\hat{\mathbf{r}}$ 的夹角，则式 2 变为

$$Ar \cos \theta = L^2 - mkr \quad (4)$$

可得极坐标中的轨道为圆锥曲线的极坐标方程⁴

$$r(\theta) = \frac{p}{1 + e \cos \theta} \quad (5)$$

其中通径为 $p = L^2/(mk)$ ，离心率为 $e = A/(mk)$.

证明（比耐公式）

预备知识 比耐公式^[257]，二阶常系数非齐次微分方程的通解^[77]

将平方反比力 $F(r) = -k/r^2$ 即 $F(1/u) = -ku^2$ 代入比耐公式

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{L^2 u^2} F\left(\frac{1}{u}\right) \quad (6)$$

通解^[77] 为

$$u(\theta) = \frac{1}{p}[1 - e \cos(\theta + \phi_0)] \quad (7)$$

其中

$$p = \frac{L^2}{mk} \quad (8)$$

将式 7 代入 $r = 1/u$ ，得到圆锥曲线式 1. 证毕.

⁴对比式 1 会发现分母的正负号反了，这相当于把圆锥曲线旋转了 180° ，并不影响形状。

开普勒第二和第三定律的证明

预备知识 开普勒三定律[\[255\]](#)

第二定律

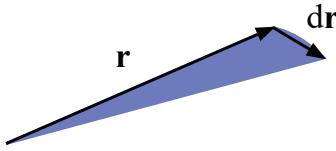


图 1: 微小时间 dt 内位矢扫过的面积

令质点的位矢为 \mathbf{r} , 在很小一段时间 dt 内移动了 $d\mathbf{r}$, 于是位矢扫过的面积就是以 \mathbf{r} 和 $d\mathbf{r}$ 为两条边的三角形的面积

$$dS = |\mathbf{r}| |d\mathbf{r}| (\sin \theta) / 2 \quad (1)$$

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

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{v} = \frac{\mathbf{L}}{2m} \quad (2)$$

其中 \mathbf{L} 是质点的轨道角动量. 我们已知在中心力场问题[\[249\]](#) 中, 角动量守恒. 把上式记为标量形式, 即

$$\frac{dS}{dt} = \frac{L}{2m} \quad (3)$$

这说明面积 S 随时间增加的速率为常数. 证毕.

第三定律

我们要试图找到开普勒问题中椭圆轨道的周期与其形状大小之间的关系. 一个直接的思路就是用椭圆的面积除以开普勒第二定律中的面积变化率得到周期. 用式 10 [\[252\]](#) 将式 3 [\[260\]](#) 中的角动量用轨道参数 a, b 表示, 有

$$\frac{dS}{dt} = \frac{L}{2m} = \frac{b}{2} \sqrt{\frac{k}{ma}} \quad (4)$$

另外已知椭圆的面积为 $S = \pi ab$, 除以上式可得周期

$$T = \frac{S}{\mathrm{d}S/\mathrm{d}t} = 2\pi a^{3/2} \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (5)$$

这就证明了轨道周期的平方和半长轴的三次方成正比.

反开普勒问题

预备知识 开普勒问题^[252]

在中心力场问题^[249]中, 若 $F(r)$ 是平方反比的斥力, 即

$$F(r) = \frac{k}{r^2} \quad V(r) = \frac{k}{r} \quad (1)$$

(其中 k 为大于零的常数) 则该问题被称为反开普勒问题. 在我们学过的各种力中, 只有两个同种点电荷间的库仑力满足这一要求.

在反开普勒问题中, 力心为双曲线的一个焦点, 质点的轨迹为双曲线离力心较远的一支. 与开普勒问题相同, 反开普勒问题中质点的能量 E (质点的动能加势能, $E > 0$) 和角动量 L 可以唯一地确定轨道的形状和大小, 且 式 2^[252] 到 式 5^[252] 仍然成立

$$a = \frac{k}{2E} \quad (2)$$

$$b = \frac{L}{\sqrt{2mE}} \quad (3)$$

推导的过程也和开普勒问题中的类似, 我们只需要将 式 11^[252] 到 式 13^[252] 过程中的所有负号变为正号即可.

轨道方程推导

预备知识 比耐公式^[257]

将平方反比斥力 $F(r) = k/r^2$ 即 $F(1/u) = ku^2$ 代入比耐公式

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\theta^2} + u = -\frac{m}{L^2 u^2} F\left(\frac{1}{u}\right) \quad (4)$$

通解^[77] 为

$$u(\theta) = -\frac{1}{p}[1 + e \cos(\theta + \phi_0)] \quad (5)$$

其中

$$p = \frac{L^2}{mk} \quad (6)$$

与开普勒问题中的双曲线轨道（式 7^[258]）相比，式 5 中的常数项由正号变为负号，这使得极坐标的双曲线方程表达双曲线离焦点较远的一支（见式 6^[15]）。

散射

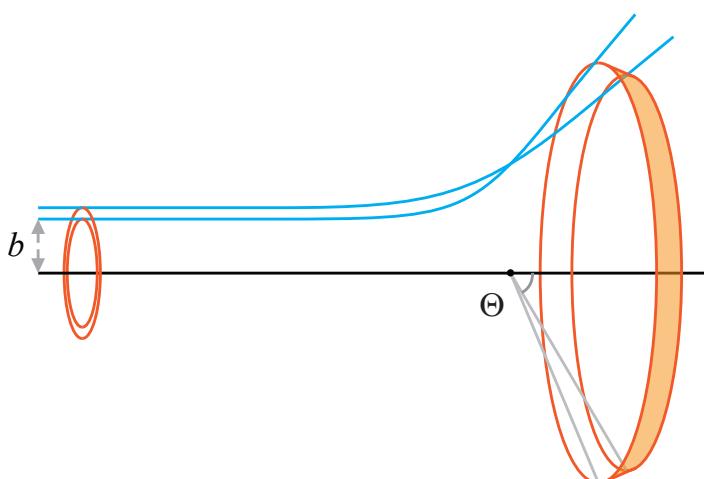


图 1: 微分截面的定义

卢瑟福散射

预备知识 反开普勒问题^[261], 散射

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 .

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{kQq}{4E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (4)$$

第三部分

计算物理

第一章

Matlab 及其他工具

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，绘制各种图表等都在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，使用 Matlab 编程，且尽量使用简单的语法，这样即使读者熟悉的编程语言不是 Matlab，也能轻易地改写出相应的代码。本章使用的所有 Matlab 语法都会在前几个词条中介绍，不要求读者有任何编程基。

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，而编程和调试的难易反而相对次要。

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/>。

常用算法

为了让读者熟悉一些科学计算中常用的算法，顺便熟悉 Matlab 编程，本章还介绍了用于求函数根值的二分法^[297] 和多区间二分法^[298]，用于排序的冒泡法^[301]，用于搜索多元函数局部最小值的 Nelder-Mead 算法^[303]，以及用于曲线拟合的最小二乘法.

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一些问题才存在. 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^[317].

我们先用一阶微分近似的方法^{[312][313]} 举例介绍一般的思路，再介绍更精确的中点法^[318] 和四阶龙格—库塔法^[321].

Matlab 简介

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.

界面介绍

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.

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.

⁴界面语言默认与操作系统语言相同，本书使用英文界面.

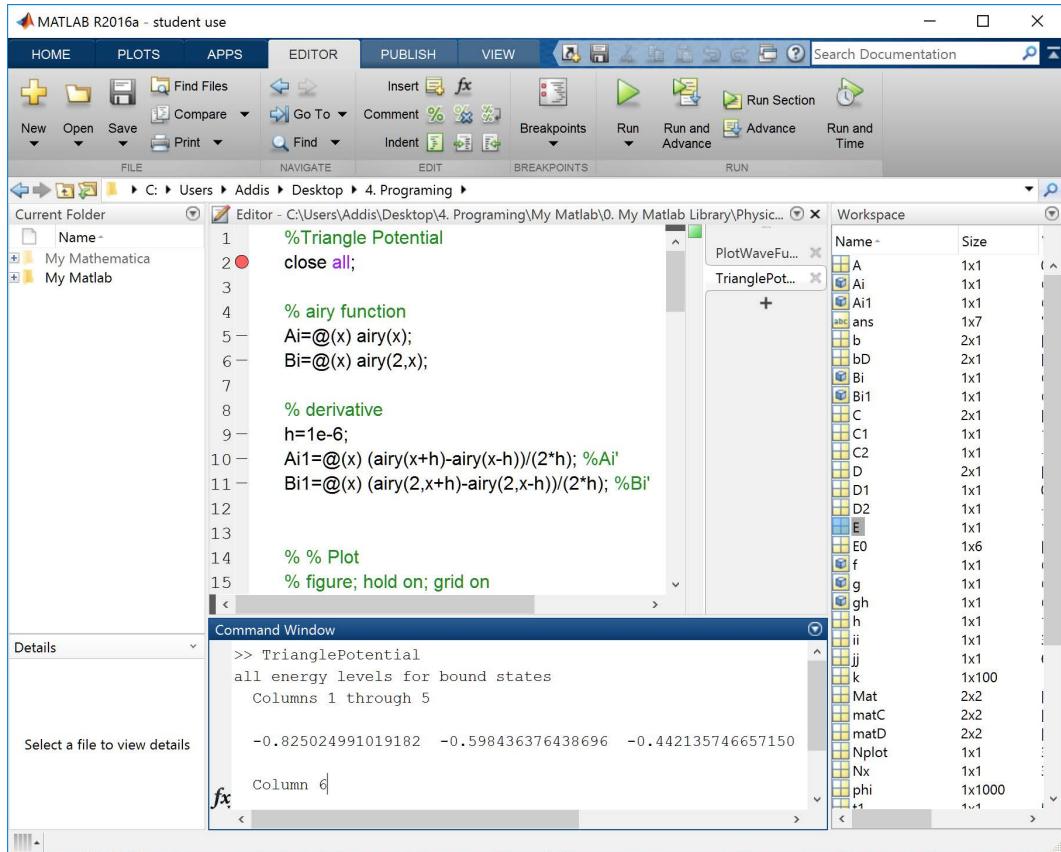


图 1: Matlab 的 IDE 界面

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。

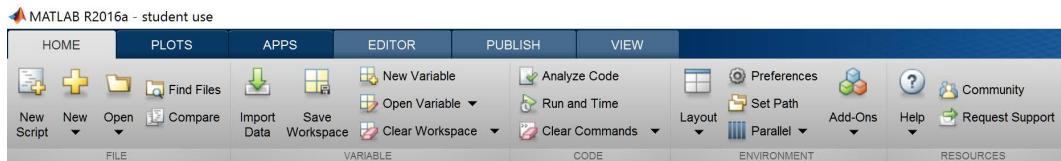


图 2: Home 菜单

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。

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.

Matlab Online

Matlab Online 是 Matlab 网页版, 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 littleshi.cn/PhysWiki 提供免费的 Matlab 账号供读者试用和体验 Matlab Online.

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. 在 Command Window 中, “ $>>$ ” 提示符表示用户在该位置输入命令, ans 是一个特殊的变量^[270] 用于储存计算结果.

```
>> 1.2/3.4 + (5.6+7.8)*9 -1
ans = 119.9529
>> ans + 1
ans = 120.9529
```

```
>> 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`, 好的习惯是在 `i` 前面加数字 (上面的第三条命令). `pi` 是圆周率, 注意是小写.

`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.

`sign(num)` 函数用于求实数 `num` 的符号. 如果 `num > 0`, 则返回 1, 若 `num < 0` 则返回 -1, 若 `num = 0` 则返回 0.

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.

如果需要在输出中显示多位小数, 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
```

Matlab 的变量与矩阵

预备知识 Matlab 简介[\[267\]](#), 自然对数底[\[36\]](#), 矩阵[\[110\]](#)

变量与矩阵

变量（variable）可用于储存数据并通过变量名获取变量值。变量名可以由多个字母，数字和下划线组成。注意变量名区分大小写，且首字符只能是字母。合法的变量名如 `ii`, `a3`, `odd_number`, `evenNumber`。用等号可以对变量赋值，被赋值的变量放在等号左边，等号右边的表达式的运算结果会储存在被赋值的变量中，直到再次被赋值。表达式由若干变量，常数和算符组成。注意同一个变量可以出现在等号左边以及右边的表达式中。

```
>> a = 1.2/3.4 + (5.6+7.8)*9 -1  
a = 119.9529  
>> a = atan(a + 1)  
a = 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。另外两个特殊的变量是 `pi`（圆周率）和 `i`（虚数单位），一般也不要对他们赋值。自然对数底没有对应的变量，若要使用自然对数底，用 `exp(1)` 即可。

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。

```
>> 1 + 1; a = ans^2  
a = 4
```

用 Editor 编写程序时，每个命令后面都需要加分号，需要在 Command Window 输出时，用 `disp` 函数。

```
>> disp('something'); disp(10);  
something  
10
```

`clear` 命令可以清空 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` 命令可以清空 Command Window（按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

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矢量（row vector）或列矢量（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，如果使用两个输入变量，则第二个用于指定维度（行是第一个维度，列是第二个）。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，如果不提供输入变量，`rand` 相当于 `rand(1,1)`。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
```

如果只用一个冒号, 那么间隔默认为 1

```
>> 1:3
ans = 1 2 3
```

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. 形状相同的矩阵可以进行 + 和 - 运算, 矩阵和标量也可以, 结果是把每个矩阵元加 (减) 标量; 矩阵乘法 “*” 既可以常数与矩阵相乘, 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
```

若两个矩阵尺寸相同, 可进行逐个元素运算, 如

```
>> a .* b
ans =
1 -2
6 -8
```

这里把 `a` 的每个矩阵元和 `b` 的对应矩阵元相乘, 得到新矩阵的对应矩阵元. 为了区分矩阵乘法, 需要在乘号前面加一个英文句号. 类似地, 我们也可以进行逐个元素的除法运算 (“./”) 和幂运算 (“.^”).

```
>> a ./ b
ans =
    1.0000   -2.0000
    1.5000   -2.0000
>> a.^2
ans =
    1   4
    9   16
```

逐个元素运算也可以用于一些尺寸不同的情况，例如对 2×3 的矩阵与 2×1 的矢量进行逐个元素运算，相当于将后者复制成 2×3 的矩阵再进行运算。又例如 1×3 的矢量与 2×1 的矢量进行逐个元素运算，相当于把两个矢量都复制成 2×3 的矩阵再进行运算。再例如一个标量和一个矩阵做逐个元素运算相当于把标量复制成同尺寸的矩阵再进行运算。

```
>> m1 = [1 3 5; 2 4 6]; m2 = [1; 2];
>> m1.*m2
ans =
    1   3   5
    4   8   12
>> m1 = [1, 2, 3]; m2 = [2; 3];
>> m1 + m2
ans =
    3   4   5
    4   5   6
>> a = [1 2; 3 4];
>> 24./a
ans =
    24   12
     8    6
```

单引号 “`‘!`” 可以使实数矩阵转置，或使复矩阵取厄米共轭（即转置并取复共轭）。若只需要对复矩阵转置，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
```

使用 `fliplr` 和 `flipud` 函数可以分别把矩阵左右翻转和上下翻转，例如

```
>> fliplr(a)
ans =
    2  1
    4  3
>> flipud(a)
ans =
    3  4
    1  2
```

用 `sum` 函数可以分别求矩阵每列或每行的和。当矩阵为行矢量或列矢量时，`sum` 对所有矩阵元求和。其他情况下，`sum` 默认对每列求和，若想对每行求和，可以在第二个输入变量中输入 2（行是矩阵的第二个维度）。例如

```
>> a = [1,2; 3,4];
>> sum(a)
ans = 4  6
>> sum(a,2)
ans =
    3
    7
```

用 `mean` 函数可以求平均值，使用格式与 `sum` 相同。

给 `norm` 函数输入一个行矢量或列矢量时，得到该矢量的模长（即各矢量元的平方和再开根号）。

用 `det` 函数可以求方阵的行列式^[104]，用“\”算符可以解线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 。如⁶

```
>> A = [1,2; 3,4]; det(A)
ans = -2
>> x = [-1; 1]; b = A*x
b =
    1
    1
>> A\b
ans =
    1
    -1
```

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。这样的函数叫做矢量化（vectorized）的函数。

```
>> cos(0:pi/4:pi)
ans =
    1.0000  0.7071  0.0000  -0.7071  -1.0000
```

用矢量化的运算可以使代码简短易懂，且提高计算效率（因为只需要进行一次函数调用）。

矩阵索引

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)
```

⁶若 $\det(\mathbf{A}) = 0$ ，即方程组存在无数个解的时候，\ 算符只能得到一个特解。若 \mathbf{A} 是一个超定方程组，即行数大于列数，算法见“超定线性方程组^[363]”。

```
ans = 2
```

索引括号中的两个数或变量分别代表行标和列标，也可以是矩阵，例如

```
>> a(2:3,1)
ans =
    4
    7
>> a(2:3,1:2)
ans =
    4  5
    7  8
>> a([3,2],[1,2])
ans =
    7  8
    4  5
>> a(:,2)
ans =
    2
    5
    8
>> a(1:end-1,2:3)
ans =
    2  3
    5  6
```

其中单独一个冒号表示某个维度的全部索引，`end` 表示某维度的最大索引。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）。虽然上面都是以双精度矩阵为例，但这些索引方法适用于任何数据类型的矩阵。

字符串

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(ans)
ans = 24
```

把双精度类型变为字符串可以用 `num2str` 函数（注意 2 的英文读音与“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

逻辑变量只能具有 0 或 1 两个值，分别代表假（**false**）和真（**true**）。以下算符

```
>, >= (大于等于), <, <=, == (等于), ~= (不等于)
```

可用于比较双精度数组，返回逻辑型数组

```
>> L = 1 + 1 > 3  
L = logical 0
```

在控制行中，输出的 **logical** 与 0 各占一行，这里为了节约空间将其写成一行。

逻辑“与”，“或”，“非”算符分别为（仅用于逻辑标量）**&&**，**||**，**~**。当算符两边都为真时，与运算才能为真，若至少有一边为真，或运算就为真。非运算用于把真假互换。例如

```
>> 1 > 0 && 2 > 1  
ans = logical 1  
>> 1 > 0 || 2 < 1  
ans = logical 1  
>> ~(1 > 0)  
ans = logical 0
```

注意由于非运算的优先级比 **>** 运算要高，所以最后一条命令必须要加括号。

在需要的时候，双精度变量可以自动转换为逻辑变量，规则是只有双精度的 0 转换为逻辑 0，其他双精度值一律转换为逻辑 1。如

```
>> 1.3 && -0.8  
ans = logical 1
```

其中 1.3 和 0.8 分别转换为逻辑 1，然后进行与运算得到逻辑 1。

除了上文中介绍的索引方法外，我们还可以用相同大小逻辑数组索引任意矩阵。注意逻辑索引的输出结果是一个列矢量，以下为了节约空间我们将输出结果改为行矢量。

```
>> a = [1 2 3; 4 5 6; 7 8 9];
>> mark = logical([1 0 0; 0 0 1; 1 0 0]); a(mark)
ans = 1 7 6 (列矢量)
```

逻辑索引常见的例子如

```
>> a(a <= 4)
ans = 1 4 2 3 (列矢量)
```

注意逻辑索引中不能使用双精度类型代替逻辑类型.

`find` 函数可以用于寻找逻辑矩阵中所有值为 1 的矩阵元的位置. 如果只提供一个输出变量 (或不提供输出变量), 函数返回单索引, 如果提供两个输出变量, 函数返回行标和列标. 例如

```
>> a = [1, 0; 0, 1]
a =
1 0
0 1
>> find(a)
ans = 1 4
>> [r, c] = find(a)
r = 1 2 (列矢量)
c = 1 2 (列矢量)
```

注意以上的双精度矩阵 `a` 被自动转换为逻辑矩阵.

`any` 函数用于判断逻辑矩阵中的每一列是否存在任何值为“真”的矩阵元, 若有, 则返回真, 否则返回假. `all` 函数用于判断逻辑矩阵中的每一列是否所有矩阵元都为“真”, 若是, 返回真, 否则返回假. 这两个函数的使用格式与 `sum` 和 `mean` 类似, 当第二个输入变量为 2 时, 对每行进行操作.

```
>> a = [1 6 7; 2 7 1; 3 8 9];
>> all(a > 5)
ans = 1×3 logical array
0 1 0
>> any(a > 7, 2)
ans = 3×1 logical array
0
```

```
0  
1  
>> all(a(:) < 10)  
ans = logical 1
```

Matlab 的判断与循环

预备知识 Matlab 的变量与矩阵[\[270\]](#)

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（注意需要将所在文件夹添加到搜索路径）。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。

```
>> disp('good'); a = 3; disp(['a = ',num2str(a)])  
good  
a = 3
```

在脚本文件中，可以在行首或命令后用百分号 % 进行注释（comment）⁷。注释是程序的说明，使程序更易读，但在执行程序时会被忽略（图 1）。

判断结构

现在来看一段代码（脚本文件）。要生成新的脚本文件，可以在 Editor 菜单（图 1[\[267\]](#)）的左边单击 New，然后选 Script，或者用快捷键 Ctrl+N。在生成的 Editor 中输入以下代码

⁷ 截止到 Matlab 2017b，在英文版 Matlab IDE 中，任何中文注释都会在 Matlab 重启后变为乱码。若要使用中文注释，建议使用中文操作系统和中文 Matlab。

```
1 a = rand(1,1); b = 0.5;
2 if a > b % a 较大
3     disp('a is larger');
4 else % b 较大
5     disp('b is larger');
6 end
```

这段程序用 `rand` 函数随机生成一个从 0 到 1 的数，如果随机数大于 0.5 则输出第一段文字，否则输出第二段文字。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。注意 `else` 语句可以不在判断结构中出现，若不出现，当判断条件不满足时程序将直接执行 `end` 后面的代码。

要执行该代码，在 Editor 菜单中单击 Run 图标（绿色三角形），如果代码没有保存，Matlab 会先弹出保存对话框。再次强调文件必须保存在 Matlab 的搜索路径下。

`elseif` 语句可用于在判断结构中产生多个分支，如

```
1 a = rand(1,1);
2 if a > 0.9
3     disp('a in (0.9, 1]');
4 elseif a > 0.6
5     disp('a in (0.6, 0.9]');
6 elseif a > 0.3
7     disp('a in (0.3, 0.6]');
8 else
9     disp('a in [0, 0.3]');
10 end
```

这个程序用于判断随机数 `a` 的区间。若 `if` 的条件判断成功，判断结构就只执行 `if` 到第一个 `elseif` 之间的命令。若 `if` 判断失败，程序就继续判断第一个 `elseif` 中的条件，若判断成功，就只执行第一个 `elseif` 到第二个 `elseif` 之间的命令，以此类推。如果 `if` 和所有的 `elseif` 条件都判断失败，则执行 `else` 后面的命令。

循环结构

我们先来看 `for` 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，当然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); % 预赋值
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。

再来看另一种循环叫做 `while` 循环。下面来看一个例程，输出 100 以内的斐波那契数列 ($a_1 = 1, a_2 = 1, a_{n+1} = a_n + a_{n-1}$)。

fibonacci.m

```
1 a1 = 1; disp(a1);
2 a2 = 1; disp(a2);
3 a3 = a1 + a2;
4 while a3 <= 100
5     disp(a3);
6     a1 = a2;
7     a2 = a3;
8     a3 = a1 + a2;
9 end
```

`while` 结构在每个循环开始会判断 `while` 后面的条件，如果条件成立，则进行一次循环，否则退出循环。以上的程序中由于我们事先并不知道我们要进行几次循环，所以选用 `while`，当最后一项大于 100 时，循环终止。运行结果为（每个数占一行）：

```
1 1 2 3 5 8 13 21 34 55 89
```

在 `for` 循环或 `while` 循环的内部，使用 `continue` 命令可以直接进入下一个循环（`while` 的仍然要先判断条件），使用 `break` 命令可以跳出循环。以下例程计算 100 以内的斐波那契数列的所有奇数项

fibonacciOdd.m

```
1 a1 = 1; a2 = 1;
2 disp(a1); disp(a2);
3 a3 = a1 + a2;
4 while 1
5     a1 = a2;
6     a2 = a3;
7     a3 = a1 + a2;
8     if a3 > 100
9         break;
```

```
10    elseif mod(a3, 2) == 0
11        continue;
12    end
13    disp(a3);
14 end
```

先来看第 4 行，`double` 类型的非零数在这里会自动转换为 `logical` 类型的 1 (`true`)，只有 `double` 类型的 0 才会转换为 `logical` 类型的 0 (`false`). 乍看之下，`while` 循环将永远执行下去（称为死循环），然而第 9 行的 `break` 在 $a3 > 100$ 时就会使程序跳出循环. 如果 $a3 \leq 100$ 且为偶数，则第 10 行的 `elseif` 判断为真，`continue` 命令被执行，程序将直接跳过之后的 `disp` 函数直接进入下一个循环，所以数列的偶数项都不会被输出. 程序的运行结果为（每个数占一行）

```
1  1  3  5  13  21  55  89
```

return 命令

在一个脚本文件的任何地方，如果 `return` 命令被执行，则程序将结束该脚本文件的执行. 如果该脚本文件是被单独执行的，程序将终止. 如果该脚本文件是被其他脚本文件或函数文件调用的，程序将继续执行调用命令的下一个命令.

Matlab 的函数

预备知识 Matlab 的判断与循环[\[282\]](#)

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. Matlab 中定义了函数的文件叫做函数文件. 函数文件同样以“.m”作为后缀名，文件中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，即函数在执行的过程中，只能读写输入变量，函数内部定义的定量，以及全局变量（暂不介绍，不建议使用），而不能读取调用该函数的代码中的变量。相比之下，调用脚本相当于把脚本的代码直接插入到调用命令处，所以脚本中可以获取调用脚本的代码中的变量。注意函数只能通过函数文件定义，不能在脚本文件或控制行中定义。

函数句柄

函数句柄（**function handle**）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;
```

若要将一个含有变量的表达式变为函数句柄，要在 @ 后面用小括号指定函数句柄的变量

```
>> A = 3; w = 5; phi = pi/2;  
>> f1 = @(x) A*sin(w*x+phi) + (2*x/pi).^2;  
>> f1([0,pi/2])  
ans =  
    3.0000 1.0000;  
>> f2 = @(x,phi) A*sin(w*x+phi) + (2*x/pi).^2;  
>> f2([0,pi/2],pi/2)  
ans =  
    3.0000 1.0000;
```

以上的函数句柄在定义时用了逐个元素的幂运算 “.^”，使函数句柄支持矩阵输入。其中 f1 的变量仅为 x，f2 的变量为 x 和 phi。注意如果在函数句柄定义后改变定义表达式中的变量，函数句柄不变。

```
>> A = 5; f1(0)
ans = 3.0000
```

有时候一些函数并不支持矢量运算，这时可以通过 `arrayfun` 函数来进行矢量运算，例如

```
>> f = @(x) x^2 + 1/x;
>> arrayfun(f, [1,2;3,4])
ans =
    2.0000  4.5000
    9.3333  16.2500
```

这样做相当于以下代码

```
1 f = @(x) x^2 + 1/x;
2 x = [1,2; 3,4];
3 ans = zeros(size(x));
4 for ii = 1:numel(x)
5     ans(ii) = f(x(ii));
6 end
```

自定义函数 (function)

自定义函数的格式为

```
[< 输出 1>,< 输出 2>,...] = function < 函数名 >(< 变量 1>,< 变量 2>...)
< 函数体 >
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，若只有一个输出，方括号也可省略。在一些情况下，如果函数体中没有使用某些输入变量，就可以把这些变量用“`~`”符号代替。

函数的调用格式为

```
[< 输出变量 1>,< 输出变量 2>,...] = < 函数名 >(< 输入变量 1>,< 输入变量 2>...)
```

调用函数时，如果输出变量个数少于函数定义中的输出变量个数，则函数仅输

出前几个变量. 若调用函数时不需要前面的某几个变量, 也可用“~”符号代替.

调用函数时, 输入变量的个数也可以少于函数定义中的输入变量, 但是函数体内部必须要做出相应的措施以防止函数体使用未生成的变量. 我们来看下面一个函数

```
1 function y = myfun(x, A, phi, y0)
2 if nargin < 4
3     y0 = 0;
4     if nargin < 3
5         phi = 0;
6         if nargin < 2
7             A = 1;
8         end
9     end
10 end
11 y = A*cos(x + phi) + y0;
12 end
```

注意函数体中使用了一个特殊的变量 `nargin`, 每当函数被调用时, 这个变量的值将会等于输入变量的个数 (同理, `nargout` 将等于输出变量的个数). 以上定义的函数允许 1-4 个输入变量, 函数体中的 2-10 行根据 `nargin` 的值对没有输入的几个变量依次赋值. 例如在控制行中调用该函数

```
>> myfun([0, pi/2])
ans = 1.0000 0.0000
>> myfun(0, 1, pi/2)
ans = 0.0000
```

调用函数时的一种特殊格式是, 如果被调用的函数的输入变量是若干个没有空格的字符串, 则可以省略括号, 逗号和双引号. 例如我们之前见过的 `format` 函数

```
>> format long;
```

和将在 “Matlab 画图^[290]” 中见到的

```
>> hold on; axis equal; xlabel x;
```

与脚本文件相同，若函数文件中执行了 `return` 命令，该函数的执行将立即终止，程序将执行调用该函数的命令的下一个命令。若该函数是单独被调用的（例如按开始按钮或在控制行被直接调用），则程序结束。

Matlab 画图

预备知识 Matlab 的函数[\[286\]](#)

Matlab 具有强大的画图功能，这里仅介绍一些基础知识。最常用的画图函数是 `plot`，例如

```
>> x = linspace(0, 2*pi, 100); y = sin(x);
>> plot(x, y);
```

结果如图 1（左）所示。如果要在该坐标系继续画图，要用 `hold on` 命令（`on` 是 `hold` 的输入变量），否则每用一次 `plot`，之前画过的图都会被清除。用 `hold off` 可以重新恢复自动清除。

```
>> y1 = cos(x);
>> hold on; plot(x, y1);
```

结果如图 1（右）所示，注意新增曲线的颜色变化。

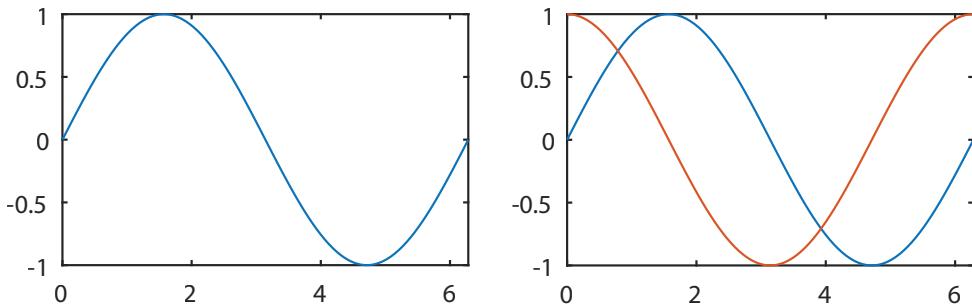


图 1: `plot` 函数

如果我们要新建一个画图窗口，用 `figure` 函数。若要指定画图的颜色，可以添加 `figure` 的第三个变量，用一个字符表示颜色（`red: 'r'`, `green: 'g'`,

blue: 'b', yellow: 'y', magenta: 'm', cyan: 'c', black: 'k', white: 'w'). 例如

```
>> x2 = cos(x); y2 = sin(x);
>> figure; plot(x2, y2, 'r');
```

在新增的窗口中, 结果如图 2 (左) 所示. 注意根据窗口尺寸的不同, x 轴和 y 轴的单位长度一般不同, 若要使其相同, 可以在 `plot` 后面用 `axis equal` 命令 (其中字符串 `equal` 是 `axis` 函数的输入变量), 得到图 2 (右). 若要调整

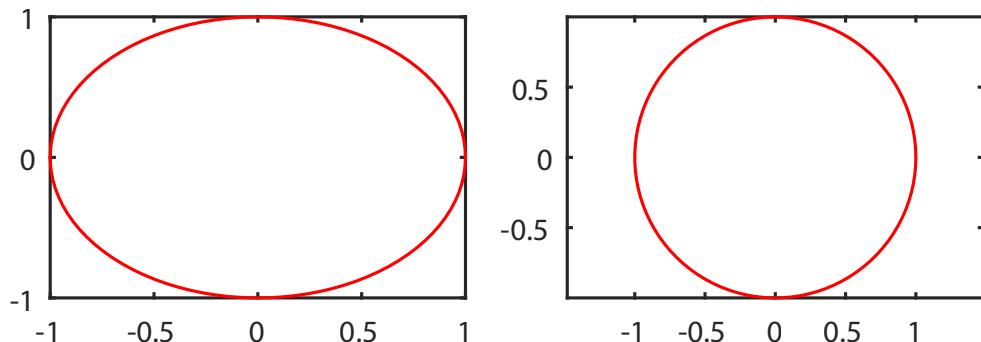


图 2: 红色的单位圆

坐标轴的范围, 也可用 `axis` 函数. 另外可以在 `plot` 的第三个变量的字符串中设定曲线的形状, 用 `xlabel` 和 `ylabel` 函数分别设置 x 轴和 y 轴的文字, 用 `title` 函数设置图片标题

```
>> plot(x2, y2, '-r');
>> axis([-1.2, 1.2, -1.2, 1.2]);
>> xlabel('x'); ylabel('y'); title('unit circle');
```

其中'.'表示带点的连线, 点的坐标由 `x2` 和 `y2` 决定 (另外'+'表示带加号的连线, 'o-'表示带圆圈的连线). `axis` 中行矢量中的四个数分别是 x 轴的最小最大值和 y 轴的最小最大值. 结果如图 3 (左) 所示.

除了 `plot` 以外, 常用的还有 `scatter` 函数, 用于画散点图. 格式与 `plot` 相似. 默认的散点形状是圆圈, 但也可以在第三个变量中设置颜色和 '+', 'x', '.' 等形状. 例如

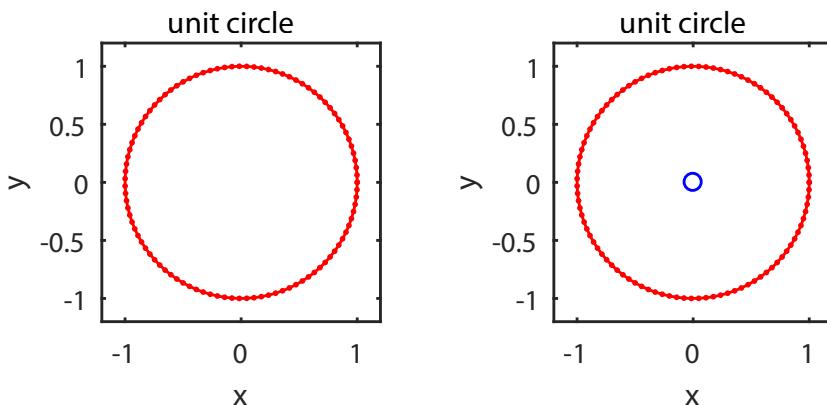


图 3: 红色的单位圆

```
>> hold on; scatter(0, 0, 'b');
```

结果如图 3 (右) 所示.

最后, 如果要关闭当前画图窗口, 用 `close` 函数 (无输入变量), 如果要关闭所有窗口, 用 `close all` 即可.

Matlab 的程序调试及其他功能

预备知识 Matlab 的函数[\[286\]](#)

程序调试

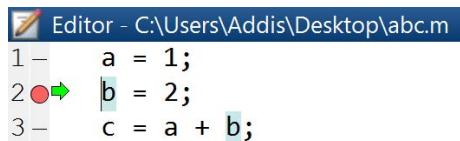


图 1: 在行首设置 Breakpoint

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 1), 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 2）。其中“Continue”（快捷键 F5）是继续运行直到下一个

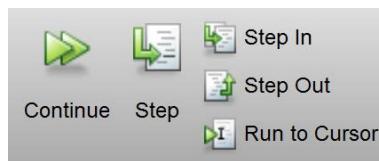


图 2: Step 菜单

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。

warning 和 error 函数

有时候当我们的程序中出现了某个错误时，程序会终止并在控制行中返回一个错误信息，例如我们给 sin 函数输入两个变量时，控制行的 error 信息将提示变量个数太多。

```
>> sin(1,2)
Error using sin
Too many input arguments.
```

另一些情况下当错误不是那么严重时，我们会得到一个 warning 提示，程序在输出提示后将继续运行。

我们可以在我们自己的脚本或函数中用 error 或 warning 函数达到同样的效果

```
1 function myfun(char)
2 if char == 'w'
3     warning('this is a warning');
4 elseif char == 'e'
5     error('this is an error');
6 else
7     disp('Hello World!');
```

```
8 end  
9 end
```

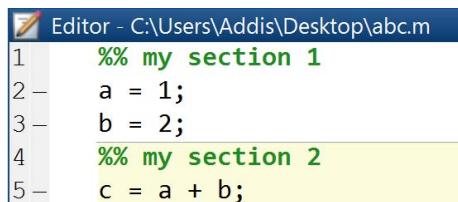
当 `error` 或 `warning` 函数被执行时，控制行不但会输出对应的字符串，还会输出它们所在的文件和行号，如

```
>> myfun w  
Warning: this is a warning  
> In myfun (line 3)
```

单击带下划线的单词，可在 Editor 中显示对应位置。若 `myfun` 函数被其他函数调用，那么调用的位置也会被逐级列出。使用 `warning` 的效果类似，但程序不会被终止。

分节

在行首用两个百分号 “`%%`” 可以对代码进行分节（图 3）。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）。



The screenshot shows the MATLAB Editor window with the title "Editor - C:\Users\Addis\Desktop\abc.m". The code is divided into two sections by the %% markers:

```
1 %% my section 1  
2 a = 1;  
3 b = 2;  
4 %% my section 2  
5 c = a + b;
```

图 3：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。

第二章

数值验证及常用算法

二项式定理（非整数幂）的数值验证

预备知识 二项式定理（非整数）[\[4\]](#), Matlab 编程基础[\[267\]](#)

这里介绍一个简单的 Matlab 程序用于计算表 1[\[4\]](#). 第 7-10 行的循环中，每个循环通过 $x^{(ii-1)}$ 项的系数计算 x^{ii} 项的系数，并将 x^{ii} 项累加到求和结果 result 上.

binomial.m

```
1 % 验证二项式定理(非整数幂)
2 u = -3.5; % 幂
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     % 由 x^(ii-1) 项系数计算 x^ii 项系数
9     Coeff = Coeff*(u-ii+1) / ii;
10    % 将 x^(ii-1) 项累加到求和结果上
11    result = result + Coeff * x^ii;
12 end
13 disp('求和结果为')
14 disp(result)
15 format short % 恢复默认显示
16 disp('精确结果为')
17 format long % 显示全部小数位
18 disp((1+x)^u)
```

二分法

二分法是数值计算中一种求连续一元函数零点的简单方法. 先来看一个显然的结论: 如果我们知道一个连续函数在某个开区间左端的值和右端的值(假设都不为0)乘积小于0(即正负号不同), 那么这个函数在该区间内必有至少一个根. 为了进一步缩小这个根所在的区间, 我们在区间中点求函数值, 如果中点处的函数值与区间左端的函数值同号(相乘大于0), 则函数的根必然在区间中点和区间右端之间, 于是我们可以把区间左端移动到区间中点处, 再来求新区间的中点. 如果区间中点的函数值与区间右端的函数值同号, 同理我们也可以把区间右端移动到区间中点处得到新的区间. 如果区间中点的函数值恰好为0, 我们便找到了一个根, 另一方面, 如果区间的长度小于我们对根的精度的要求, 那么我们就找到了一个根的近似值.

Matlab 中自带的 `fzero` 函数如果按照以下格式使用, 大致可以认为是二分法

```
>> f = @(x)x-1;
>>fzero(f, [0,2])
ans = 1
```

`fzero` 的默认精度是 $2.2e-16$. 注意要把一个函数作为其他函数的输入变量, 必须使用函数句柄. 下面我们给出一个二分法的 Matlab 程序.

bisection.m

```
1 % 二分法求函数的根
2 function x = bisection(f, int, err)
3 fl = f(int(1)); fr = f(int(2));
4 % 两端点是否为 0
5 if fl == 0
6     x = int(1); return;
7 elseif fr == 0
8     x = int(2); return;
```

```
9 end
10 % 两端点是否同号
11 if fl * fr > 0
12     error('两端点同号');
13 end
14 % 主循环
15 while(int(2) - int(1) > err)
16     mid = 0.5*(int(1) + int(2));
17     fm = f(mid);
18     if fm * fl > 0
19         int(1) = mid;
20     elseif fm * fr > 0
21         int(2) = mid;
22     else % fm = 0
23         break;
24     end
25 end
26 x = mid;
27 end
```

我们先来看函数的自变量，与 `fzero` 类似，该函数的前两个输入变量分别是函数句柄和求根区间，第三个变量是误差值，当区间的长度小于 `err` 时，函数将输出区间中点作为输出。函数的第 3-13 行做了一些必要的检查，确保区间两端的函数值为异号。第 15 行开始主循环，每循环一次，函数的区间长度减半，直到区间中点处的函数值为 0 或区间长度小于 `err` 时跳出循环，最后返回区间中点的函数值。

多区间二分法

预备知识 二分法[\[297\]](#)

这里介绍一种多区间二分法，可以求出连续函数在某区间内几乎全部的

根. 方法就是把这个区间等分为若干个相等的小区间, 然后分别判断这些小区间两端函数值的符号, 对所有两端异号的区间使用二分法即可. 显然, 小区间个数越多, 越有可能找到所有的根. 例程如下.

bisectionN.m

```

1 function roots = bisectionN(f, int, N)
2 x = linspace(int(1), int(2), N); % 划分区间
3 y = arrayfun(f, x); % 求所有 f(x(ii))
4 figure; plot(x, y, '-.') % 画图
5 title('f(x)')
6 Sign = sign(y);
7 ind = find(Sign(1:end-1) .* Sign(2:end) <= 0); % 找符合
    条件的区间序号
8 Nroot = numel(ind);
9 roots = zeros(1, Nroot); % 预赋值
10 for ii = 1:Nroot
11     roots(ii) = fzero(f, [x(ind(ii)), x(ind(ii)+1)]);
12 end
13 end

```

函数的前两个输入变量分别是需要求根的函数句柄和求根区间 (二元行矢量或列矢量), 第三个变量 N 是子区间端点的个数 (即子区间的个数加一). 函数中先求出所有的端点 x , 以及对应的函数值 y , 然后画图. 第 6-7 行寻找所有两端异号或有一端为 0 的区间的序号, 然后在第 10 行的循环中对这些区间逐个使用二分法. 为了提高运算效率, 这里并没有使用“二分法^[297]”中的例程, 而是使用了 Matlab 自带的 `fzero` 函数.

`bisectionN` 的画图功能是为了让用户判断是否有可能出现漏根, 以下举两个例子说明.

```

>> f = @(x)exp(-0.2*x)*sin(x);
>> roots = bisectionN(f, [0, 15], 50)
roots = 0 3.1416 6.2832 9.4248 12.5664

```

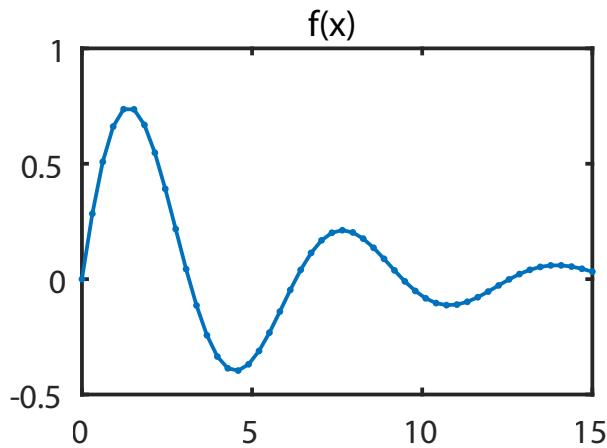


图 1: 运行结果

运行结果如图 1, 由于画出的曲线较为光滑, 可判断漏根的可能性很小. 再看另一个例子

```
>> f = @(x)sin(1/x);
>> roots = bisectionN(f, [0, 0.3], 50)
roots = 0.0245 0.0398 0.0455 0.0531 0.0637 0.0796 0.1061 0.1592
```

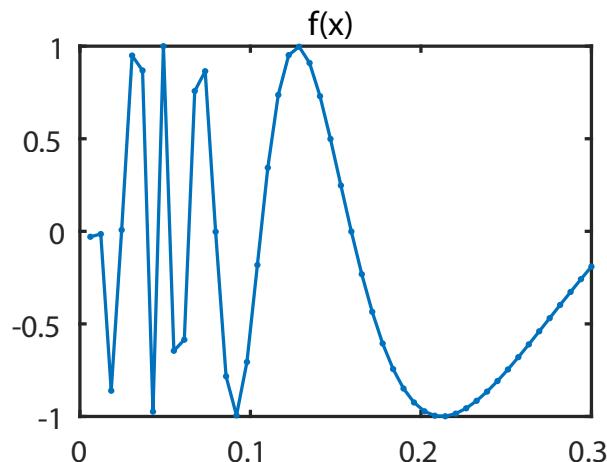


图 2: 运行结果

我们已经知道函数 $\sin(1/x)$ 在该区间上有无数个根, 且越接近 $x = 0$, 相邻根之间的距离越小. 运行结果如图 2, 可见在区间 $[0, 0.1]$ 内, 子区间端点的函数值非常不平滑, 极有可能出现漏根. 为了求得更多的根, 我们可以增加子区间的个数.

冒泡法

预备知识 Matlab 的函数[\[286\]](#)

我们先来看 Matlab 自带的排序函数 `sort`. 假设数列 `age` 是几个小朋友的年龄, `name` 是这几个小朋友对应的名字, 现在按年龄从小到大排序如下

```
>> age = [1, 6, 2, 5, 3];
>> name = ['a', 'b', 'c', 'd', 'e'];
>> [age1, order] = sort(x);
age1 = 1 2 3 5 6
order = 1 3 5 4 2
>> name1 = name(order);
name1 = 'acedb'
```

其中输出变量 `order` 是排序后每个数字在原来数列中的位置索引, 即 `name1` 等于 `name(order)`. 现在我们用冒泡法实现 `sort` 的功能. `sort` 函数默认把数列升序排列, 即第二个输入变量默认为 '`ascend`'. 若要降序排列, 可以用 '`descend`' 作为第二个输入变量.

冒泡法是一种简单的排序算法, 效率没有 `sort` 中的算法快, 所以在实际使用时还是建议用 `sort`. 冒泡法的算法为: 以升序排列为例, 给出一个数列, 先把第一个数与第二个进行比较, 若第一个数较大, 就置换二者的位置 (具体操作是, 把第一个数的值赋给一个临时变量, 再把第二个数的值赋给第一个, 最后把临时变量的值赋给第二个), 再把第二个数与第三个进行比较, 若第二个较大, 就置换二者的位置, 这样一直进行到最后两个数, 完成第一轮. 然后再进行第二轮, 第三轮, 直到某一轮没有出现置换操作, 即可确定排序完成. 至于输出变量 `order`, 我们可以先令 `order = 1:N`, 每置换数列的两个数, 就把 `order` 中对应的两个数也置换即可. 这样, 数列与其原来的索引将始终一一对应.

bubble.m

```
% 冒泡法排序
```

```
2 function [x, order] = bubble(x, option)
3 N = numel(x); % 数列个数
4 order = 1:N; % 索引
5 changed = 1; % 是否有置换
6 while(changed == 1)
7     changed = 0;
8     for ii = 1:N-1
9         if x(ii) > x(ii + 1)
10            % 置换
11            changed = 1;
12            temp = x(ii);
13            x(ii) = x(ii + 1);
14            x(ii + 1) = temp;
15            temp = order(ii);
16            order(ii) = order(ii + 1);
17            order(ii + 1) = temp;
18        end
19    end
20 end
% 是否是降序排列
21 if nargin > 1 && option(1) == 'd'
22     x(:) = flipud(x(:));
23     order = fliplr(order);
24 end
25 end
26 end
```

第 6 行的循环每循环一次，数列将从头到尾被扫描一遍。每个循环开始时 `changed` 的值被设为 0，若有任何置换，`changed` 则变为 1（第 11 行），使 `while` 的判断条件成立，循环继续。为了使第一个循环发生，在循环前必须把 `changed` 设为 1。再来看第 9-18 行的判断结构。如果前一个数大于后一个数，则置换发生。注意要置换数列中的两个数，必须要设一个临时变量 (`temp`)。函数的最后，判断输入变量的个数，如果只有一个变量，则默认按照前面的代码。

升序排列，若第二个变量为 'descend'，则把 x 和 $order$ 翻转一下即可。

Nelder-Mead 算法

预备知识 Matlab

Nelder-Mead 算法是一种求多元函数局部最小值的算法，其优点是不需要函数可导并能较快收敛到局部最小值。Matlab 自带的 `fminsearch` 函数就是使用该算法。对 N 元函数 $f(\mathbf{x})$ （这里把函数自变量用 N 维矢量来表示），该算法需要提供函数自变量空间中的一个初始点， \mathbf{x}_1 ，算法从该点出发寻找局部最小值。以下讲解具体算法。

我们先根据初始点另外生成 N 个初始点 $\mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_{N+1}$ ，使 \mathbf{x}_{1+i} 在第 i 个分量比 \mathbf{x}_1 的大 5%，其他分量保持相同。如果 \mathbf{x}_1 的第 i 个分量为零，那么 \mathbf{x}_{1+i} 的第 i 个分量设为 0.00025。得到 $N+1$ 个初始点后，开始按照以下步骤进行循环，直到满足特定的精度条件时退出循环。

1. 先给这些点按照 $f(\mathbf{x}_i)$ 从小到大的顺序重新排序并重命名，使 i 越大 $f(\mathbf{x}_i)$ 越大。
2. 计算前 N 个点的平均位置为

$$\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i \quad (1)$$

3. 计算 \mathbf{x}_{N+1} 关于点 \mathbf{m} 的反射点为

$$\mathbf{r} = 2\mathbf{m} - \mathbf{x}_{N+1} \quad (2)$$

4. 如果 $f(\mathbf{x}_1) \leq f(\mathbf{r}) < f(\mathbf{x}_N)$ ，令 $\mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{r}$ ，并进入下一个循环。

5. 如果 $f(\mathbf{r}) < f(\mathbf{x}_1)$ ，计算拓展点为

$$\mathbf{s} = \mathbf{m} + 2(\mathbf{m} - \mathbf{x}_{N+1}) \quad (3)$$

如果 $f(\mathbf{s}) < f(\mathbf{r})$ ，令 $\mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{s}$ 并进入下一个循环，否则令 $\mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{r}$ 。并进入下一循环。

6. 如果 $f(\mathbf{x}_N) \leq f(\mathbf{r}) < f(\mathbf{x}_{N+1})$, 令

$$\mathbf{c}_1 = \mathbf{m} + (\mathbf{r} - \mathbf{m})/2 \quad (4)$$

如果 $f(\mathbf{c}_1) < f(\mathbf{r})$, 令 $\mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{c}_1$ 并进入下一循环, 否则执行最后一步.

7. 如果 $f(\mathbf{x}_{N+1}) \leq f(\mathbf{r})$ 令

$$\mathbf{c}_2 = \mathbf{m} + (\mathbf{x}_{N+1} - \mathbf{m})/2 \quad (5)$$

如果 $f(\mathbf{c}_2) < f(\mathbf{x}_{N+1})$, 令 $\mathbf{x}_{N+1} = \mathbf{c}_2$ 并进入下一循环, 否则执行最后一步.

8. 令

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{x}_1 + (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1)/2 \quad (i = 2 \dots N+1) \quad (6)$$

并用 \mathbf{v}_i 赋值给 \mathbf{x}_i , 进入下一循环.

观察以上步骤可知, 当局部最小值的位置在 $N+1$ 个围成的图形以外时, 图形倾向于变大且加速向最小值移动. 当最小值的位置在图形内部时, 图形倾向于缩小. 随着循环次数增加, 这 $N+1$ 个点最终将向局部最小值聚拢.

我们可以在每个循环的第一步之后计算 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_{N+1} 的距离来估算自变量的误差, 如果该误差小于某个值, 即可结束循环并使用 \mathbf{x}_1 作为最终结果. 作为一种方法, 我们也可以在每个循环的第一步之后计算 $f(\mathbf{x}_{N+1}) - f(\mathbf{x}_1)$ 来估算最小值的误差.

以下是该算法的 Matlab 代码.

NelderMead.m

```

1 % f 是函数句柄, 只接受一个 N 维行矢量作为输入变量, 并返
   回一个函数值
2 % x0 是 N 维行矢量, xerr 是一个标量
3 function [xmin, fmin] = NelderMead(f, x0, xerr)
4 N = numel(x0); % f 是 N 元函数
5 x = zeros(N+1, N); % 预赋值
6 y = zeros(1, N+1);

```

```
7 % 计算 N+1 个初始点
8 x(1,:) = x0;
9 for ii = 1:N
10    x(ii+1,:) = x(1,:);
11    if x(1,ii) == 0
12        x(ii+1,ii) = 0.00025;
13    else
14        x(ii+1,ii) = 1.05 * x(1,ii);
15    end
16 end
17 % 主循环
18 for kk = 1:10000
19     % 求值并排序
20     for ii = 1 : N + 1
21         y(ii) = f(x(ii,:));
22     end
23     [y, order] = sort(y);
24     x = x(order,:);
25     if norm(x(N+1,:) - x(1,:)) < xerr % 判断误差
26         break;
27     end
28     m = mean(x(1:N,:)); % 平均位置
29     r = 2*m - x(N+1,:); % 反射点
30     f_r = f(r);
31     if y(1) <= f_r && f_r < y(N) % 第 4 步
32         x(N+1,:) = r; continue;
33     elseif f_r < y(1) % 第 5 步
34         s = m + 2*(m - x(N+1,:));
35         if f(s) < f_r
36             x(N+1,:) = s;
37         else
```

```
38 x(N+1,:) = r;
39 end
40 continue;
41 elseif f_r < y(N+1) % 第 6 步
42 c1 = m + (r - m)*0.5;
43 if f(c1) < f_r
44     x(N+1,:) = c1; continue;
45 end
46 else % 第 7 步
47     c2 = m + (x(N+1,:)-m)*0.5;
48     if f(c2) < y(N+1)
49         x(N+1,:) = c2; continue;
50     end
51 end
52 for jj = 2:N+1 % 第 8 步
53     x(jj,:) = x(1,:)+ (x(jj,:)-x(1,:))*0.5;
54 end
55 end
% 输出变量
56 xmin = x(1,:);
57 fmin = f(xmin);
58 end
```

该程序中有几个需要注意的地方。首先，主循环并没有用 `while 1`，而是用 `for` 循环指定一个最大循环次数。这是为了避免少数情况下可能发生的死循环（例如 $f(\mathbf{x})$ 在某个区域中的值处处相等时）。第二，4-7 步中对 $f(\mathbf{r})$ 的判断有且仅有一个成立，所以我们可以用 `if`, `elseif`, `else` 结构来选择。最后，4-5 步的情况下程序必定会执行 `continue` 语句而跳过第 8 步，只有 6-7 步中的 `if` 判断失败程序才会执行第 8 步。

最小二乘法的数值计算

预备知识 最小二乘法^[124], Nelder-Mead 算法^[303]

我们在“最小二乘法^[124]”见到的三个例子中，方差函数都是待定系数的线性组合，这种情况下我们令偏导为零后得到的是线性方程组，便于求解。然而当方差不是待定系数的线性组合时，得到的方程组往往非常复杂，这时就需要借助数值计算。相比用数值计算解 N 元的非线性方程组，更简单的方法是直接用数值方法寻找方差函数的极小值（如 Nelder-Mead 算法）。实践证明，大多数情况下极小值点仅有一个，那就是最小值点。

为了验证结果的正确性，我们先来用数值方法拟合 $A \cos(x + \varphi_0) + C$ ，并与“最小二乘法^[124]”中的方法比较结果。

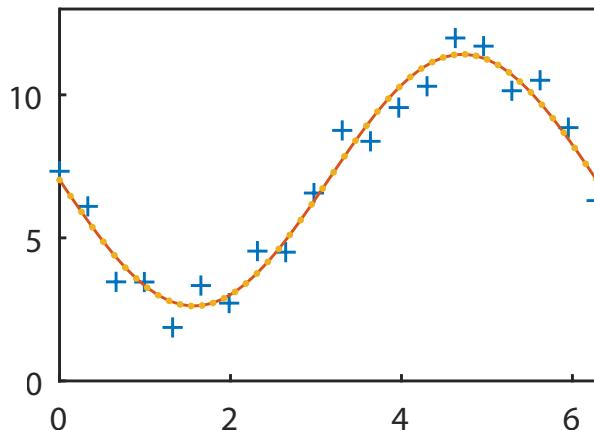


图 1: 运行结果

curveFit.m

```
1 function curveFit
2 close all;
3 % 随机生成简谐曲线
4 N = 20;
5 x0 = linspace(0, 2*pi, N);
```

```
6 y0 = 5*rand * sin(x0 + 2*pi * rand) + 10 * rand;
7 y0 = y0 + 2*rand(1,20); % 产生随机误差
8 scatter(x0, y0, '+'); % 画出散点
9 hold on;
10
11 % Nelder-Mead 求方差最小值点
12 f = @(x) norm( x(1)*sin(x0 + x(2)) + x(3) - y0 )^2;
13 c = NelderMead(f, [5, 1, 5], 1e-7);
14 % 画拟合结果
15 x = linspace(0, 2*pi, 50);
16 y1 = c(1) * sin(x + c(2)) + c(3);
17 plot(x, y1);
18
19 % 解线性方程组求方差最小值点
20 c = sinfit(x0, y0);
21 % 画拟合结果
22 y2 = c(1)*cos(x) + c(2)*sin(x) + c(3);
23 plot(x, y2, '.');
24 end
25
26 % 拟合简谐曲线
27 % y = C(1)*cos(x) + C(2)*sin(x) + C(3)
28 function C = sinfit(x, y)
29 N = numel(x);
30 cosx = cos(x); sinx = sin(x);
31 sc = sum(sinx.*cosx);
32 s = sum(sinx); c = sum(cosx);
33 % 系数矩阵
34 M = [sum(cosx.^2), sc, c;
35 sc, sum(sinx.^2), s;
36 c, s, N];
```

```

37 b = [sum(y.*cosx); sum(y.*sinx); sum(y)];
38 C = M\b; % 解线性方程组
39 end

```

运行结果如图 1 所示，可见两种方法拟合出的曲线一致（红色的曲线和黄色的点线）。注意第 13 行使用了“Nelder-Mead 算法^[303]”中的函数 NelderMead 求函数句柄 f 的最小值。

数值积分（梯形法）

预备知识 Matlab 的函数^[286]，定积分^[67]

本词条介绍一种简单的梯形算法计算数值积分。如图 1 若要用梯形法计算定积分 $\int_a^b f(x) dx$ ，则可将区间 $[a, b]$ 划分为 N 个长度为 $h = (b - a)/N$ 的等长的小区间，区间端点从 a 到 b 分别为 $x_1 = a, x_2 = a + h, \dots, x_{N+1} = b$ 。

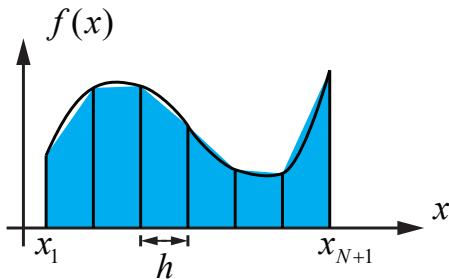


图 1: 梯形法数值积分

接下来将每个区间的被曲线围出的面积用梯形来计算，第 i 个梯形面积为（两底和乘以高除以二） $[f(x_{i+1}) + f(x_i)]h/2$ 。定积分约等于所有梯形面积

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_i^N \frac{h}{2}[f(x_{i+1}) + f(x_i)] = h \left[\frac{1}{2}f(x_1) + \sum_{i=2}^N f(x_i) + \frac{1}{2}f(x_{N+1}) \right] \quad (1)$$

显然，当 N 取越大时，右边的求和就越接近定积分。

这里给出 Matlab 代码

trapezoidInt.m

```

1 % 梯形法数值积分
2 % f 是被积函数的函数句柄
3 % [a, b] 为积分区间
4 % N 为子区间个数
5 function I = trapezoidInt(f, a, b, N)
6 x = linspace(a, b, N+1);
7 y = arrayfun(f, x); % 求所有 y(i) = f(x(i))
8 h = (b - a)/N;
9 I = h*(0.5*y(1) + 0.5*y(N+1) + sum(y(2:N)));
10 end

```

下面来看两个例子，由算法可知，当被积函数具有 $c_1x + c_2$ 的形式时，函数曲线围成的面积可由梯形精确解算，所以即使 N 取很小也可以精确到 double 类型的精度（16 位左右）。

```

>> format long;
>> trapezoidInt(@(x)x, 0, 1, 4)
ans = 0.5000000000000000

```

对其他一些函数，需要较大的 N 才能获得较高的精度。我们已知 $\sin x$ 在 $[0, \pi]$ 内的积分等于 2，再看数值积分

```

>> trapezoidInt(@(sin, 0, pi, 10)
ans = 1.983523537509455
>> trapezoidInt(@(sin, 0, pi, 100)
ans = 1.999835503887444
>> trapezoidInt(@(sin, 0, pi, 1000)
ans = 1.999998355065662
>> format short;

```

第三章

微分方程

简谐振子受迫运动的简单数值计算

预备知识 简谐振子受迫运动^[235], 微分近似^[49], Matlab 编程基础^[267]

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).

在简谐振子受迫运动^[235] 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.

SHOf.m

```
1 % 参数设定
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 dt = T/Nstep; % 计算步长
10 y2 = zeros(step,1); y1 = y2; y = y2; % 矩阵预赋值
11 y(1) = 0; y1(1) = 0; % 初值, y1 是 y 的一阶导数
12
13 % 迭代循环
14 for ii = 2:step
15     y2(ii) = (-a*y1(ii)-k*y(ii)+2*sin(w*(ii*dt)))/m; %
16                 代入微分方程求出 y''.
17     y(ii) = y(ii-1) + y1(ii-1)*dt; % y 的微分近似
18     y1(ii) = y1(ii-1) + y2(ii-1)*dt; % y' 的微分近似
19 end
20
21 % 画图
22 t=(0:step-1)*dt;
23 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.

天体运动的简单数值计算

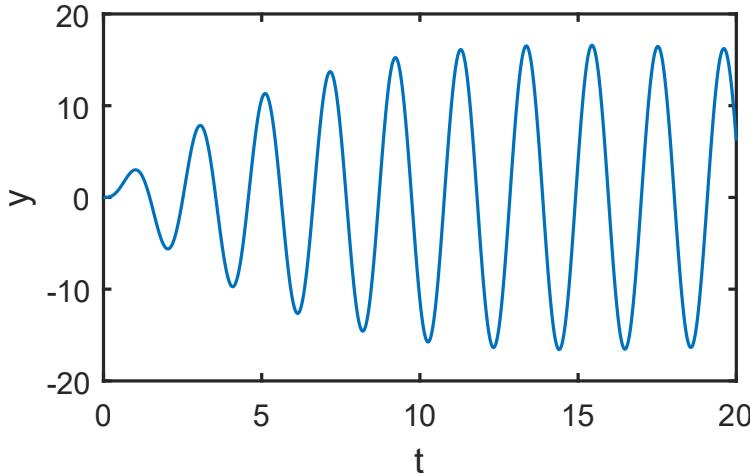


图 1: 运行结果

预备知识 万有引力^[243], 弹簧振子受迫运动的简单数值计算^[312]

直角坐标系中, 设中心天体质量为 M , 固定在原点不动. 根据牛顿万有引力定律, 质量为 m 的行星受到中心天体的力为

$$\mathbf{F} = -G \frac{Mm}{r^2} \hat{\mathbf{r}} = -G \frac{Mm}{r^3} \mathbf{r} \quad (1)$$

其中 \mathbf{r} 为行星的位矢 (设行星在 xy 平面上运动). 根据牛顿第二定律^[177], 加速度为

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m} = -G \frac{M}{r^3} \mathbf{r} \quad (2)$$

用 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ 以及 $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}$, 其中 x, y 看成 t 的函数. 考虑到 $a_x = d^2x/dt^2$, $a_y = d^2y/dt^2$, 可以列出二阶微分方程组

$$\begin{cases} \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{GM}{(x^2 + y^2)^{3/2}} x \\ \frac{d^2y}{dt^2} = -\frac{GM}{(x^2 + y^2)^{3/2}} y \end{cases} \quad (3)$$

假设已知初值条件 $x(0) = x_0$, $y(0) = y_0$, $\dot{x}(0) = v_{x0}$, $\dot{y}(0) = v_{y0}$. 下面用“弹簧振子受迫振动的简单数值计算^[312]”中类似的方法求接下来行星的运动轨迹.

1. 将初始条件代入式 3, 得到初始加速度

$$\begin{cases} \ddot{x}(0) = -\frac{GM}{(x_0^2 + y_0^2)^{3/2}} x_0 \\ \ddot{y}(0) = -\frac{GM}{(x_0^2 + y_0^2)^{3/2}} y_0 \end{cases} \quad (4)$$

2. 设经过一段极微小的时间步长 Δt (例如 0.0001, 数值越小误差越小), 根据微分近似 (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)

$$\begin{cases} \dot{x}(\Delta t) \approx \ddot{x}(0)\Delta t + x(0) \\ \dot{y}(\Delta t) \approx \ddot{y}(0)\Delta t + y(0) \end{cases} \quad \begin{cases} x(\Delta t) \approx \dot{x}(0)\Delta t + x(0) \\ y(\Delta t) \approx \dot{y}(0)\Delta t + y(0) \end{cases} \quad (5)$$

3. 把 $x(\Delta t), y(\Delta t)$ 再次代入式 3, 得到 $x''(\Delta t), y''(\Delta t)$, 再次利用微分近似求出 $x(2\Delta t), y(2\Delta t), x'(2\Delta t), y'(2\Delta t) \dots$ 如此循环下去就可以得到每隔 Δt 的数值解.

kepler.m

```

1 % 参数设定
2 GM = 1; % 万有引力常数乘以中心天体质量
3 x0 = 1; y0 = 0; % 初始位置
4 vx0 = 0; vy0 = 0.7; % 初始速度
5 T = 4; Nstep = 4000; % 总时间和步数
6 dt = T/Nstep; % 步长
7
8 % 矩阵预赋值
9 x = nan(Nstep,1); y = x;
10 x1 = x; y1 = x;
11 x2 = x; y2 = x;
12
13 % 初始位置, 速度, 加速度
14 x(1) = x0; y(1) = y0; % 初位置
15 x1(1) = vx0; y1(1) = vy0; % 初速度
16 x2(1) = -GM*x(1)/(x(1)^2+y(1)^2)^(3/2); % 代入方程得到 x
17 y2(1) = -GM*y(1)/(x(1)^2+y(1)^2)^(3/2); % 代入方程得到 y
18
19 % 迭代循环

```

```

20 for ii = 2:Nstep
21     x(ii) = x(ii-1)+x1(ii-1)*dt; % x 的微分
22     y(ii) = y(ii-1)+y1(ii-1)*dt; % y 的微分
23
24     x1(ii) = x1(ii-1)+x2(ii-1)*dt; % x' 的微分
25     y1(ii) = y1(ii-1)+y2(ii-1)*dt; % y' 的微分
26
27     x2(ii) = -GM*x(ii)/(x(ii)^2+y(ii)^2)^(3/2); % 代入微
28         分方程求出 x'''
29     y2(ii) = -GM*y(ii)/(x(ii)^2+y(ii)^2)^(3/2); % 代入微
30         分方程求出 y'''
31 end
32
33 % 画图
34 plot(x,y); % 画行星轨道
35 axis equal; % xy坐标长度一致
36 hold on; % 继续画图
37 scatter(0,0); % 标出中心天体

```

程序运行结果如图 1 所示。注意行星轨道并不是一个闭合的椭圆，这是由于这种算法误差较大，为了减小误差，可以增加程序中 Nstep 的值。

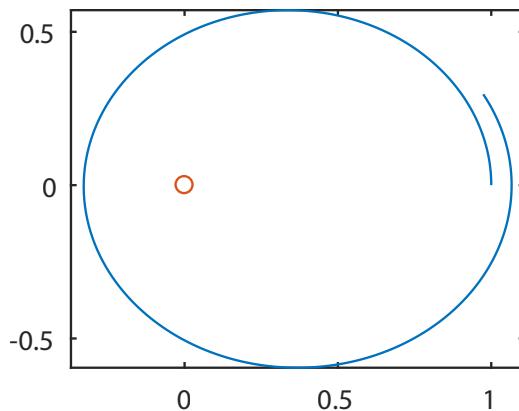


图 1: 运行结果

常微分方程（组）的数值解

预备知识 弹簧振子受迫运动的简单数值计算^[312]，天体运动的简单数值计算^[313]

数值解微分方程或微分方程组时，一般需要先把微分方程（组）化成一阶微分方程组。例如在“弹簧振子受迫运动的简单数值计算^[312]”中列出的微分方程为

$$my'' = \alpha y' - ky + f(t) \quad (1)$$

新增变量，令 $v = y'$ ，则可变为一阶微分方程组

$$\begin{cases} v' = [-\alpha u - ky + f(t)]/m \\ y' = v \end{cases} \quad (2)$$

方程组中， t 是自变量， y 和 u 是因变量。给出某时刻的 $y(t), u(t), t$ 就可以通过方程组求出 $u'(t)$ 和 $y'(t)$ 的数值。

又例如在“天体运动的简单数值计算^[313]”中，列出的二阶微分方程组为

$$\begin{cases} x'' = -\frac{GM}{(x^2 + y^2)^{3/2}}x \\ y'' = -\frac{GM}{(x^2 + y^2)^{3/2}}y \end{cases} \quad (3)$$

新增变量，令 $v_x = x'$, $v_y = y'$ ，上式也可变为一阶微分方程组

$$\begin{cases} x' = v_x \\ v'_x = -GMx/(x^2 + y^2)^{3/2} \\ y' = v_y \\ v'_y = -GMy/(x^2 + y^2)^{3/2} \end{cases} \quad (4)$$

该式中同样 t 是自变量，其他都是因变量，给出某时刻的 x, y, v_x, v_y, t 就可以由该方程组求出因变量的一阶导数。

在以上两个词条中，我们使用了一种较为原始的方法（微分近似）。这种方法相当于把某时刻 t 的各因变量代入一阶微分方程组，得到 t 时刻各因变量

的一阶导数，再通过微分近似由这些一阶导数来计算其 $[t, t + \Delta t]$ 时间内的增量，得到 $t + \Delta t$ 时刻的各因变量，再代入一阶方程组得到 $t + \Delta t$ 时刻各因变量的一阶导数，如此一直循环，得到各因变量每隔 Δt 时间的值。这种方法叫做欧拉法。对一阶常微分方程 $y'(t) = f(y, t)$ ，令 $h = \Delta t$, $t_n = t_0 + nh$, $y_n = y(t_n)$ 欧拉法可以表示为

$$y_{n+1} = y_n + h f(y_n, t_n) \quad (5)$$

以下介绍三种更精确的算法，在步长 (Δt) 相同时它们的精确度递增。注意虽然大多数问题中自变量是时间，但这些方法适用于大多数单个自变量的微分方程（组）。

- 中点法^[318]
- 四阶龙格库塔法^[321]
- Matlab 中的 Ode45 算法

中点法解常微分方程（组）

预备知识 常微分方程（组）的数值解^[317]

我们先来尝试用欧拉法解一阶微分方程

$$y'(t) = y \quad (1)$$

令初始条件为 $y(0) = 1$ 。令步长为 $h = 0.5$ ，步数为 5，结果如图 1 所示（代码见词条最后）。

由“”我们知道该方程的解析解为 $y = e^t$ 。对比数值解和解析解，不难分析出误差产生的原因：我们仅用每段步长区间左端的导数预测整个区间的曲线增量。如果我们能利用每个区间中点的导数计算整个区间的增量，这个预测将会比欧拉法更精确。

考虑微分方程 $y'(t) = f(y, t)$ 在区间 $[t_n, t_{n+1}]$ 的曲线，若我们已知区间左端的函数值为 y_n ，我们可以先用微分近似估计曲线中点的函数值为

$$y\left(t_n + \frac{h}{2}\right) = y_n + \frac{h}{2} f(y_n, t_n) \quad (2)$$

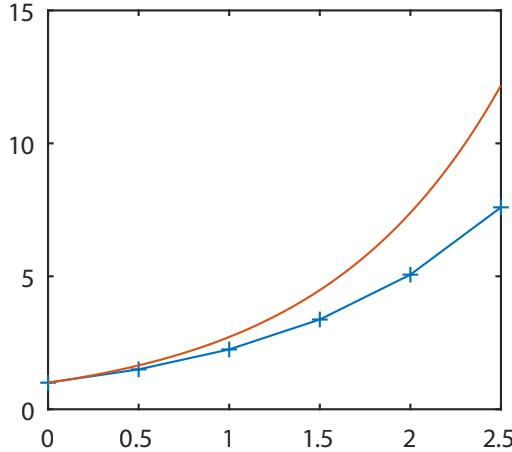


图 1: 欧拉法数值解 (蓝) 和解析解 (红)

然后再求出这个近似中点的导数为

$$y'\left(t_n + \frac{h}{2}\right) = f\left[y_n + \frac{h}{2}f(t_n, y_n), t_n + \frac{h}{2}\right] \quad (3)$$

最后我们利用这个导数估算该区间的曲线增量

$$y_{n+1} = y_n + hy'\left(t_n + \frac{h}{2}\right) = y_n + hf\left[y_n + \frac{h}{2}f(t_n, y_n), t_n + \frac{h}{2}\right] \quad (4)$$

这就是解常微分方程的中点法.

我们再来用中点法取同样的步长计算式 1, 结果如图 2 所示.

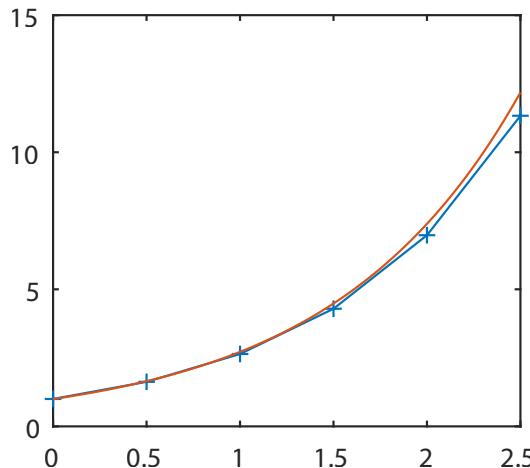


图 2: 中点法数值解 (蓝) 和解析解 (红)

可见虽然中点法每一步的计算过程比欧拉法稍微复杂一些，但精度却大大地提高了。

中点法同样适用于微分方程组，例如对于常微分方程组

$$\begin{cases} x'(t) = f(x, y, t) \\ y'(t) = g(x, y, t) \end{cases} \quad (5)$$

首先计算近似中点为

$$\begin{cases} x_{n+1/2} = x_n + h f(x_n, y_n, t_n) \\ y_{n+1/2} = y_n + h g(x_n, y_n, t_n) \end{cases} \quad (6)$$

然后有

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + h f\left(x_{n+1/2}, y_{n+1/2}, \frac{h}{2}\right) \\ y_{n+1} = y_n + h g\left(x_{n+1/2}, y_{n+1/2}, \frac{h}{2}\right) \end{cases} \quad (7)$$

odeMid.m

```

1 % 设置参数
2 N = 6;
3 h = 0.5;
4 t = linspace(0, (N-1)*h, N); % 自变量
5 t0 = linspace(0, (N-1)*h, 100); % 用于画图
6
7 % 欧拉法
8 y = zeros(1,N); % 预赋值
9 y(1) = 1; % 初值
10 for ii = 1:N-1
11     y(ii+1) = y(ii) + h*y(ii);
12 end
13
14 % 画图
15 figure;
```

```

16 plot(x,y,'+-');
17 hold on;
18 plot(t0, exp(t0));
19
20 % 中点法
21 y = zeros(1,N);
22 y(1) = 1;
23 for ii = 1:N-1
24     y(ii+1) = y(ii) + h*(y(ii) + 0.5*h*y(ii));
25 end
26
27 % 画图
28 figure;
29 plot(x,y,'+-');
30 hold on;
31 plot(x0, exp(x0));

```

四阶龙格库塔法

预备知识 中点法解常微分方程（组）[\[318\]](#)

龙格库塔法是一类数值解微分方程的算法，其中较常见的是四阶龙格库塔法。这里不进行推导，仅仅给出公式如下（ y_n, t_n, h 的定义类比[式 5^{\[317\]}](#)）

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_n, t_n) & k_2 &= f\left(y_n + h\frac{k_1}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right) \\ k_3 &= f\left(y_n + h\frac{k_2}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right) & k_4 &= f(y_n + hk_3, t_n + h) \end{aligned} \quad (2)$$

由以上两式，不难把该算法拓展到方程组的情况。对于 N 元微分方程组

$$\begin{cases} y'_1(t) = f_1(y_1, \dots, y_N, t) \\ y'_2(t) = f_2(y_1, \dots, y_N, t) \\ \vdots \\ y'_N(t) = f_N(y_1, \dots, y_N, t) \end{cases} \quad (3)$$

我们可以把该式记为矢量函数的形式

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t) \quad (4)$$

现在我们仅需要把[式 1](#) 和 [式 2](#) 中的所有 y_i 和 k_i 都变为 N 维列矢量 \mathbf{y}_i 和 \mathbf{k}_i 即可将微分方程拓展为微分方程组。

例程

到目前为止，我们每求一个微分方程的数值解都要重新写一次程序，对于一些较为复杂的算法这样做效率较低。我们这里不妨把四阶龙格库塔法写到一个单独的函数文件 `odeRK4.m` 中，当我们要解某个特定的方程时，只需把[式 2](#) 中的 $f(y, t)$ 作为自变量输入即可解出 $y(t)$ 。

odeRK4.m

```

1 function [Y, t] = odeRK4(f, tspan, Y0, Nt)
2 Nvar = numel(Y0); % 因变量的个数
3 dt = (tspan(2) - tspan(1)) / (Nt-1); % 计算步长
4 Y = zeros(Nvar, Nt); % 预赋值
5 Y(:, 1) = Y0(:, ); % 初值
6 t = linspace(tspan(1), tspan(2), Nt);
7
8 for ii=1:Nt-1
9     K1 = f(Y(:, ii), t(ii));
10    K2 = f(Y(:, ii)+K1*dt/2, t(ii)+dt/2);
11    K3 = f(Y(:, ii)+K2*dt/2, t(ii)+dt/2);

```

```

12 K4 = f(Y(:,ii)+K3*dt      , t(ii)+dt    );
13 Y(:,ii+1) = Y(:,ii) + dt/6 * (K1+2*K2+2*K3+K4);
14 end
15 end

```

我们先来看第 1 行的函数声明, 输入变量中, f 是式 4 中 $f(y, t)$ 的函数句柄^[286], $tspan$ 是一个 2×1 的列矢量, $tspan(1)$ 是初始时间, $tspan(2)$ 是终止时间, Y_0 是一个列矢量, $Y_0(ii)$ 是第 ii 个因变量的初始值, Nt 是 t_n 的个数, $tspan$ 定义的时间区间被等分为 $Nt - 1$ 个小时. 因变量中, Y 的行数是因变量的个数, 列数是 Nt , t 是一个行矢量, 由第 6 行定义, $Y(ii, jj)$ 就是第 ii 个变量在 $t(jj)$ 时刻的值. 第 5 行把初值 Y_0 赋给 Y 的第 1 列, 第 8-14 行的循环根据式 1 和式 2 的矢量形式由 Y 的第 ii 列 (y_i) 求第 $ii+1$ 列 (y_{i+1}).

我们先来用这个函数来计算“天体运动的简单数值计算^[313]”中的问题. 我们令因变量 y 的四个分量依次为一阶方程组 (式 4^[317])

$$\begin{cases} x' = v_x \\ y' = v_y \\ v'_x = -GMx/(x^2 + y^2)^{3/2} \\ v'_y = -GMy/(x^2 + y^2)^{3/2} \end{cases} \quad (5)$$

中的 x, y, v_x, v_y . 程序代码如下

keplerRK4.m

```

1 function keplerRK4
2 % 参数设定
3 GM = 1; % 万有引力常数乘以中心天体质量
4 x0 = 1; y0 = 0; % 初始位置
5 vx0 = 0; vy0 = 0.7; % 初始速度
6 tspan = [0; 4]; % 总时间和步数
7 Nt = 100; % 步数
8
9 Y0 = [x0; y0; vx0; vy0]; % 因变量初值

```

```

10 f = @(Y, t) fun(Y, t, GM);
11 [Y, ~] = odeRK4(f, tspan, Y0, Nt);
12
13 % 画图
14 figure; hold on;
15 plot(Y(1, :), Y(2, :));
16 scatter(0, 0);
17 axis equal;
18 end
19
20 function Y1 = fun(Y, ~, GM)
21 % 因变量
22 x = Y(1); y = Y(2);
23 vx = Y(3); vy = Y(4);
24 Y1 = zeros(4, 1); % 预赋值
25 Y1(1) = vx;
26 Y1(2) = vy;
27 temp = -GM / (x^2 + y^2)^(3/2);
28 Y1(3) = temp * x;
29 Y1(4) = temp * y;
30 end

```

运行结果如图 1 所示。

我们先来看函数 `fun` (20 行), 这个函数就相当于式 5. 第一个输入变量 Y 是一个列矢量, 是 \mathbf{y}_n 的值, 第二个输入变量是 t , 但由于式 5 中没有出现 t , 我们用波浪线代替. 第三个输入变量是参数 GM , 即万有引力常数和中心天体质量之积. 输出变量 $Y1$ 是一个列矢量, 是 \mathbf{y}'_n 的值.

再来看主函数 `KeplerRK4` (第 1 行), 参数设定中除了步数从 4000 变为了 100, 其他都和“天体运动的简单数值计算^[313]”中的程序一样, 然而这里运行结果却精确得多 (曲线几乎闭合), 可见这种算法的优越性.

主函数第 10 行中将 `fun(Y, t, GM)` 变为函数句柄 `f(Y, t)`, 这样 GM 就可以在“参数设定”中设置, 而不用在 `fun` 函数内部设置. 第 11 行调用了上文

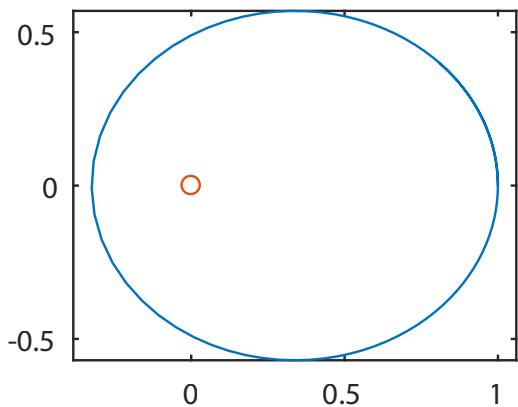


图 1: 运行结果

中的 `odeRK4` 函数解方程组，由于我们在画图时不需要用 t ，所以把第二个输出变量改为波浪线。

第四部分

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 $C_a^b = a! / [(a-b)!b!] = C_a^{a-b}$, 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.

选择的展开定理

预备知识 排列组合

证明 $C_{a+b}^n = \sum_i C_a^i C_b^{n-i}$

命题

对正整数 a, b, n :

$$1. \text{ 若 } a, b \geq n, \text{ 则 } C_{a+b}^n = \sum_{i=0}^n C_a^i C_b^{n-i} = \sum_{i=0}^n C_a^{n-i} C_b^i.$$

$$2. \text{ 若 } a \geq n, b < n, \text{ 则 } C_{a+b}^n = \sum_{i=n-b}^n C_a^i C_b^{n-i} = \sum_{i=0}^b C_a^{n-i} C_b^i$$

$$3. \text{ 若 } a+b \geq n, \text{ 且 } a < n, b < n. \text{ 则 } C_{a+b}^n = \sum_{i=n-b}^a C_a^i C_b^{n-i} = \sum_{i=n-a}^b C_a^{n-i} C_b^i$$

证明

假设有编了号的 $a+b$ 个小球. 不分顺序抓取 n 个, 求总共有几种情况 (用 N 表示).

方法 1: 根据定义, 有 $N = C_{a+b}^n$ 种情况.

方法 2: 先把球分成 A, B 两组, 分别有 a 个和 b 个. 如果在 A 组中抽取 i 个球 (有 C_a^i 种情况), 在 B 组中只能抽取 $n-i$ 个 (有 C_b^{n-i} 种情况), 所以一个 i 对应 $C_a^i C_b^{n-i}$ 种情况. 所有可能的 i 一共有 $N = \sum_i C_a^i C_b^{n-i}$ 种情况.

由于这个问题只有一个答案, 所以有 $C_{a+b}^n = \sum_i C_a^i C_b^{n-i}$.

但 i 的范围具体从多少取到多少, 由 a, b 是否大于 n 来决定. 当 a, b 都大于 n 时, i 可以从 0 取到 n , 如果其中至少有一个小于 n , 那么 i 的取值不能使 C 的上标大于下标.

证毕.

中心极限定理

预备知识 高斯分布

结论

若一个随机变量 x 的平均值为零, 方差为 $\langle x^2 \rangle$, 令 $X = \sum_i^N x_i$, 当 $N \gg 1$ 时, X 满足高斯分布, 且方差为

$$\langle X^2 \rangle = N \langle x^2 \rangle \quad (1)$$

证明略.

二维随机走动

预备知识 中心极限定理[\[329\]](#)

结论

若平面上某点从坐标原点出发, 每一步沿随机方向走动一个随机步长, 步长的分布函数为 $f(r)$, N ($N \gg 1$) 步之后, 该点的位置分布可以用圆高斯分布表示

$$P(X, Y) = \frac{a}{\pi} e^{-a(X^2+Y^2)} \quad \text{或} \quad P(R) = 2aR e^{-aR^2} \quad (1)$$

其中

$$a = \frac{1}{N \langle r^2 \rangle} \quad \langle r^2 \rangle = \int_0^\infty r^2 f(r) dr \quad (2)$$

由分布函数可得, 随机点最终离原点的距离的平均值和方均根为

$$\langle R \rangle = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{N \langle r^2 \rangle} \quad \sqrt{\langle R^2 \rangle} = \sqrt{N \langle r^2 \rangle} \quad (3)$$

推导

我们先来分析随机点的 x 坐标. 假设每一步在 x 方向投影的长度为 x_i , N 步以后, 该点的 x 坐标为 X , 则

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} (r \cos \theta)^2 \cdot f(r) dr \cdot \frac{1}{2\pi} d\theta = \frac{1}{2} \langle r^2 \rangle \quad (4)$$

根据中心极限定理^[329], X 满足高斯分布, 且

$$\langle X^2 \rangle = N \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} N \langle r^2 \rangle \quad (5)$$

对 y 轴分析也有类似的结果, 将 $P(X, Y)$ 分布归一化后, 可以得到式 1. 我们由式 1 求 $\langle X^2 \rangle$, 得

$$\langle X^2 \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty X^2 P(X, Y) dX dY = \int_0^\infty \sqrt{\frac{a}{\pi}} X^2 e^{-aX^2} dX = \frac{1}{2a} \quad (6)$$

对比式 5 和式 6 即可得到式 2. 证毕.

狄拉克 δ 函数

预备知识 定积分^[67]

在物理中我们经常会遇到一些模型, 如质点和点电荷等, 这类模型使用了极限的思想 (如令体积趋于无穷小). 如果考察质点的密度或点电荷的电荷密度, 将得到无穷大, 然而将其密度 (电荷密度) 在空间中积分却又能得到有限的质量与电荷. 为了描述这样的密度 (电荷密度) 分布, 我们引入狄拉克 δ 函数.

一维情况

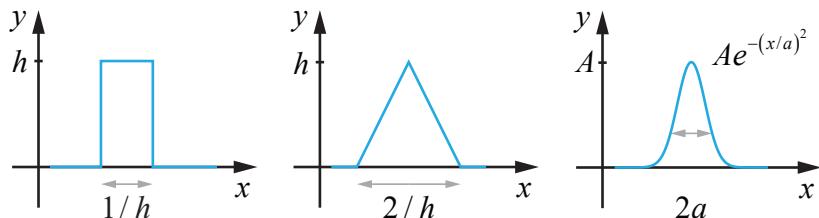


图 1: $\delta(x - x_0)$ 的几个例子

我们来考虑一个函数 (图 1 左)

$$f(x) = \begin{cases} h & \left(|x - x_0| \leq \frac{1}{2h} \right) \\ 0 & \left(|x - x_0| > \frac{1}{2h} \right) \end{cases} \quad (1)$$

其中 h, x_0 是常数. 由函数图像易得函数曲线下面的面积为 $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$. 现在我们令 $h \rightarrow 0$, 长方形的高将趋于无穷大, 宽将趋于零, 而定积分结果不变.

我们定义狄拉克 δ 函数¹ $\delta(x)$ 为满足以下两个性质的函数²

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty & (x = 0) \\ 0 & (x \neq 0) \end{cases} \quad (2)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (3)$$

这样, 上面的 $f(x)$ 就可以表示为 $\delta(x - x_0)$. 当然, 我们还可以选取其他含有参数的 $f(x)$ 来逼近 δ 函数, 如图 1 中的另外两种函数.

例 1 高斯波包

我们来

性质

对任意连续函数 $f(x)$, 有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \quad (4)$$

要证明这个性质, 我们可以把积分上下限变为 $x_0 \pm \epsilon$, 这样并不会改变积分结果, 因为在区间 $[x_0 + \epsilon, +\infty)$ 和 $(-\infty, x_0 - \epsilon]$ 中, $\delta(x - x_0) = 0$. 然后我们令 $\epsilon \rightarrow 0$, 这样 $f(x)$ 在 $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ 区间内的值就趋近于常数 $f(x_0)$. 所以有

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx &= \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} f(x) \delta(x - x_0) dx \\ &= f(x_0) \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \end{aligned} \quad (5)$$

证毕.

δ 函数的另一个性质是

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (6)$$

¹严格来说, 这并不是一个数学上的函数, 但在物理中却经常出现.

²事实上, $\delta(x)$ 并不是数学中一个严格意义上的函数, 而是被称为广义函数.

我们不妨从几何上来证明这个性质，与 $\delta(x)$ 相比较， $\delta(ax)$ 的图像在 x 方向缩小了 $|a|$ 倍（当 $a < 0$ 时，还另需要关于 y 轴翻转），所以 $\delta(ax)$ 下的面积是 $1/|a|$ （注意翻转并不影响面积），故 $|a|\delta(ax)$ 下的面积是 1，且满足式 2 和式 3，所以有 $|a|\delta(ax) = \delta(x)$. 证毕.

三维情况

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

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial x / \partial u & \partial x / \partial v & \partial x / \partial w \\ \partial y / \partial u & \partial y / \partial v & \partial y / \partial w \\ \partial z / \partial u & \partial z / \partial v & \partial z / \partial w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} du \\ dv \\ dw \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中 \mathbf{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

$$\begin{pmatrix} dx_1 \\ dy_1 \\ dz_1 \end{pmatrix} = \mathbf{J} \begin{pmatrix} du \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{11} \\ J_{21} \\ J_{31} \end{pmatrix} du \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} dx_2 \\ dy_2 \\ dz_2 \end{pmatrix} = \mathbf{J} \begin{pmatrix} 0 \\ dv \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{12} \\ J_{22} \\ J_{32} \end{pmatrix} dv \quad (4)$$

$$\begin{pmatrix} dx_3 \\ dy_3 \\ dz_3 \end{pmatrix} = \mathbf{J} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ dw \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_{13} \\ J_{23} \\ J_{33} \end{pmatrix} dw \quad (5)$$

由于平行六面体的体积是同一起点三条矢量的混合积

$$dV = \begin{vmatrix} dx_1 & dy_1 & dz_1 \\ dx_2 & dy_2 & dz_2 \\ dx_3 & dy_3 & dz_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} dx_1 & dx_2 & dx_3 \\ dy_1 & dy_2 & dy_3 \\ dz_1 & dz_2 & dz_3 \end{vmatrix} = |\mathbf{J}| du dv dw \quad (6)$$

其中 $|\mathbf{J}|$ 叫做雅可比行列式.

高斯积分

预备知识 极坐标中的二重积分^[142]

以下定积分被定义为高斯积分

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \quad (1)$$

求解高斯积分最简单的方法是在极坐标中求解以下面积分

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \quad (2)$$

在极坐标系中, $r^2 = x^2 + y^2$, 上式变为

$$I^2 = \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} e^{-r^2} r dr d\theta = 2\pi \int_0^{+\infty} r e^{-r^2} dr \quad (3)$$

用换元积分法, 令 $t = r^2$, $dt = 2r dr$, 得

$$I^2 = \pi \int_0^{+\infty} e^{-t} dt = \pi (-e^{-t}) \Big|_0^{+\infty} = \pi \quad (4)$$

最后开方即可得到高斯积分为

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad (5)$$

更一般地, 由换元积分法式 5^[58] 可得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (6)$$

多元泰勒展开

多元泰勒展开公式如下

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}_0) + [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\nabla]f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2!}[(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\nabla]^2f(\mathbf{x}_0) + \dots \\ &\quad + \frac{1}{n!}[(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\nabla]^n f(\mathbf{x}_0) + \mathcal{O}(x^{N+1}) \end{aligned} \quad (1)$$

Γ 函数

预备知识 定积分^[67]

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³.

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 $x! = x(x - 1) \dots 1$ 相同。首先

$$0! = \Gamma(1) = \int_0^{+\infty} e^{-t} dt = 0 - (-1) = 1 \quad (4)$$

³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。

使用分部积分法^[60], 令 t^x 为“求导项”, e^{-t} 为积分项, 可得递推公式⁴
(式 2)

$$\begin{aligned} x! &= \Gamma(x+1) = \int_0^{+\infty} t^x e^{-t} dt = -t^x e^{-t} \Big|_{t=0}^{t=+\infty} + \int_0^{+\infty} x t^{x-1} e^{-t} dt \\ &= x \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt = x \Gamma(x) = x(x-1)! \end{aligned} \quad (5)$$

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的阶乘为

$$\left(-\frac{1}{2}\right)! = \int_0^{+\infty} \frac{e^{-x}}{\sqrt{x}} dx = \sqrt{\pi} \quad (7)$$

该积分可以用换元法令 $x = t^2$ 变为高斯积分^[334]

$$\left(-\frac{1}{2}\right)! = 2 \int_0^{+\infty} e^{-t^2} dt = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2} dt \quad (8)$$

进行计算, 结果为 $\sqrt{\pi}$.

对任意大于零的半整数 $n/2$, 有

$$\frac{n}{2}! = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} - 1\right)! = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} - 1\right) \dots \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\right)! = \frac{n}{2} \left(\frac{n}{2} - 1\right) \dots \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (9)$$

高斯分布（正态分布）

预备知识 定积分^[67], 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.

⁴该证明仅对 $x > 0$ 适用, 这样才有 $0^x e^{-0} = 0$, 使第三个等号成立.

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^[58] ($x = \sqrt{t}$) 以及 Γ 函数^[335] 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。

拉格朗日乘数法

预备知识 导数与函数极值^[47]，梯度^[149]

若要求函数 $f(x_1, \dots, x_N)$ 在 m 个约束条件 $g_i(x_1, \dots, x_N)$ ($i = 1, \dots, M$) 下的极值，可用拉格朗日乘数法，令拉格朗日函数为

$$\Lambda(x_1, \dots, x_N) = f + \sum_{i=1}^M \lambda_i g_i \quad (1)$$

其中 λ_i 为未知任意常数。同时满足约束条件和

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial x_i} = 0 \quad (i = 1, \dots, N) \quad (2)$$

的点，就是函数 $f(x_1, \dots, x_N)$ 的极值点或稳定点。

几何理解

下面举一个二元函数的例子以说明拉格朗日乘数法的几何意义.

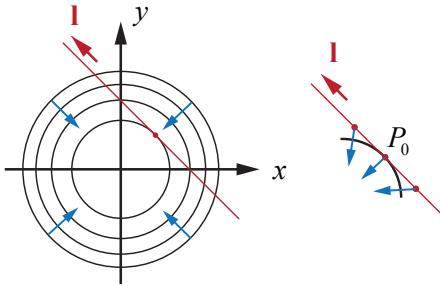


图 1: 例 1

例 1

求函数 $f(x, y) = -a(x^2 + y^2)$ 在轨迹 $x + y = c$ 约束下的最值 (a, c 均为常数).

从几何上来理解, 函数 $f(x, y)$ 是一个倒置的抛物面, 其等高线的俯视图如图 1 蓝色的箭头代表函数值增加最大的方向, 即梯度的方向. 考察点沿着同一条等高线的位置变化时, 函数值不变. 曲面上任意一点的梯度为

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial x} \hat{x} + \frac{\partial f}{\partial y} \hat{y} = -2ax \hat{x} - 2ay \hat{y} = -2a\mathbf{r} \quad (3)$$

其中 \mathbf{r} 为位矢. 这说明, 梯度的方向总是延径向向内, 与距离成正比.

约束条件如图 1 中红线所示, 我们要求的就是红线上面函数 f 的极值. 在该题的情况下, 所求的极值显然在红线离原点最近的地方出现.

但是如何总结出约束条件下多元函数极值点的一般的判断条件并用梯度表示呢? 根据梯度的性质, 如果考察点沿红线的切向移动 $d\mathbf{l}$, 函数值的微分为

$$df = \nabla f \cdot d\mathbf{l} \quad (4)$$

类比用导数求极值的条件, 我们要找的极值点满足: 函数在极值点处延红线切向的方向导数为零. 即

$$\nabla f \cdot d\mathbf{l} = 0 \quad (5)$$

这说明 ∇f 只可能具有极值点处红线的法向量分量而切向分量为 0, 即 ∇f 与法向量共线. 令约束条件即红线的方程为

$$g(x, y) = x + y - c = 0 \quad (6)$$

$g(x, y)$ 的梯度就是其法向量. 由矢量共线的定义, 存在常数 λ , 使

$$\nabla f + \lambda \nabla g = 0 \quad \text{即} \quad \nabla(f + \lambda g) = 0 \quad (7)$$

这就是拉格朗日乘数法. 其中 $f + \lambda g$ 就是拉格朗日函数. 下面根据该条件, 对本题进行求解. 本题中拉格朗日函数梯度的两个分量分别为

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial x}(f + \lambda g) = -2ax + \lambda \\ 0 &= \frac{\partial}{\partial y}(f + \lambda g) = -2ay + \lambda \end{aligned} \quad (8)$$

两式消去 λ , 得 $x = y$. 再结合约束条件 $x + y - c = 0$, 得极值点为 $(c/2, c/2)$. 可见拉格朗日乘数法求出的偏导条件并没有包含约束条件, 而是需要再次联立约束条件才可以得出最后答案.

以上的推导可以很容易地拓展到多元函数和多个限制条件中去. 例如求三元函数 $f(x, y, z)$ 中 (可看作空间的标量场), 在两个约束条件 $g_1(x, y, z) = 0, g_2(x, y, z) = 0$ 下的极值. 注意两个约束条件分别代表一个曲面, 同时成立代表两个曲面相交的空间曲线. 我们要在该曲线上求函数 f 的极值. 同样, 若曲线上的某点是极值, 那必须满足曲线在该点的切线方向 f 的方向导数为零, 即 ∇f 与该点法向量共线. 然而这是个三维问题, 空间曲线的任意一点可以有两条不共线的法向量 (不一定互相垂直), 该点的任何其它法向量可以由这两个法线的线性组合来表示. 即存在常数 λ_1 和 λ_2 , 使得

$$\nabla f + \lambda_1 \nabla g_1 + \lambda_2 \nabla g_2 = 0 \quad (9)$$

即

$$\nabla(f + \lambda_1 g_1 + \lambda_2 g_2) = 0 \quad (10)$$

其中 $f + \lambda_1 g_1 + \lambda_2 g_2$ 就是拉格朗日函数. 当然, 限制条件的数目不一定是 2, 若只有一个限制条件 $g_1 = 0$, 就是求曲面 $g_1 = 0$ 上函数 f 取得极值的点, 条件是函数的梯度 ∇f 与曲面的法向量 ∇g_1 共线.

例 2

椭圆方程为 $x^2/a^2 + y^2/b^2 = 1$, 求其内接长方形的最大面积 (长方形的边平行于 x 轴和 y 轴).

令长方型的右上角与椭圆的切点为 (x, y) , 则长方型的面积为 $S = 4xy$. 约束函数为 $g = x^2/a^2 + y^2/b^2 - 1$. 拉格朗日函数为

$$\Lambda(x, y) = S + \lambda g = 4xy + \lambda \left(\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - 1 \right) \quad (11)$$

令 x, y 偏导都为 0, 得

$$\begin{cases} 4y + 2\lambda x/a^2 = 0 \\ 4x + 2\lambda y/b^2 = 0 \end{cases} \quad (12)$$

两式消去 λ , 得 $x/y = a/b$. 再联立椭圆方程, 解得 $(x, y) = (a/\sqrt{2}, b/\sqrt{2})$, 面积最大值为 $2ab$.

多维球体的体积

预备知识 定积分^[67], Γ 函数^[335]

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 维, 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 。

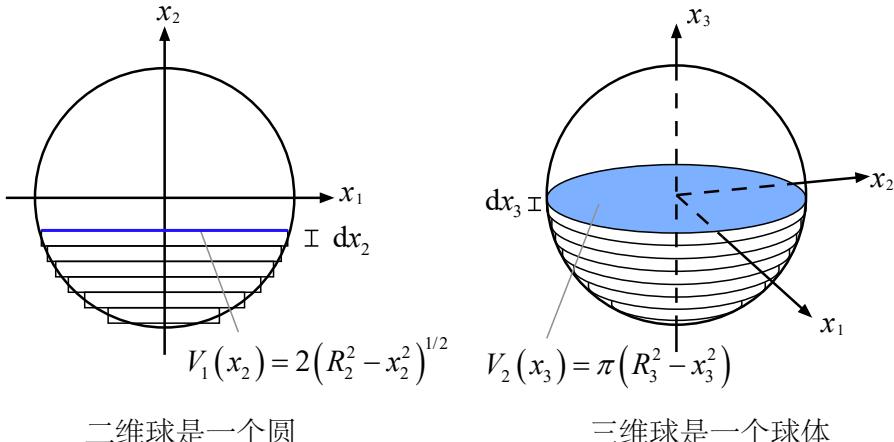


图 1: 二维和三维球的体积

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

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

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，这是说把球沿 $x_1 x_2$ 平面切成许多二维球（圆），然后把球的体积（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 $-R_2 < x_2 < R_2$ ）

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

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^[335] 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^[335] 表示以上结果, 就是

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

矢量空间

矢量空间（向量空间，线性空间）是一种特殊的集合，该集合内的元素都称为矢量。这里的矢量是广义的矢量，我们熟悉的几何矢量只是其中的一种。

定义

矢量空间内有矢量的加法（用“+”表示）和数乘（省略乘号）两种的闭合运算，可作用于集合内任意矢量，结果也是矢量。“闭合”是指运算得到的矢量也属于同一个矢量空间。两种运算的性质如下（ a, b 为任意两个实数， $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ 为空间中任意三个矢量）

1. 加法运算

- (a) 满足加法交换律 $\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u}$.
- (b) 满足加法结合律 $(\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w})$.
- (c) 存在零矢量，使得 $\mathbf{v} + \mathbf{0} = \mathbf{v}$.
- (d) 存在逆元素 $\tilde{\mathbf{v}}$ ，使得 $\mathbf{v} + \tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$.

2. 数乘运算

- (a) 乘法分配律 $a(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = a\mathbf{u} + a\mathbf{v}$
- (b) 乘法分配律 $(a + b)\mathbf{v} = a\mathbf{v} + b\mathbf{v}$
- (c) 乘法结合律 $a(b\mathbf{v}) = (ab)\mathbf{v}$

例 1

所有不大于 n 阶的多项式 $c_nx^n + c_{n-1}x^{n-1} + \dots + c_1x + c_0$ 可以构成一个矢量空间. 加法定义为代数加法运算, 数乘定义为“多项式乘以常数”运算.

例 2

三维空间中所有具有方向和长度的量的几何矢量成一个矢量空间⁵ (只有起点不同的矢量视为同一个矢量). 加法用矢量的三角形法则或平行四边形法则定义, 任意几何矢量的数乘就是把该矢量的长度乘以一个常数, 方向保持不变. 证明略.

点乘

原则上点乘运算不是矢量空间所必须的, 但物理中的矢量空间几乎都定义了点乘运算. 不同的空间有不同的定义两个矢量点乘

证明

两个不大于 n 阶的多项式相加还是不大于 n 阶的多项式 (加法闭合性), 多项式相加满足交换律和结合律 (1a, 1b), 零向量取 0 阶多项式 0, 任何多项式加 0 不会改变 (1c), 每个多项式取相反数就可得到其逆矢量, 且与原多项式相加为零 (1d). 多项式的数乘不改变阶数, 仍在集合内 (数乘的闭合性), 显然满足两种乘法分配律和乘法结合律 (性质 2a, 2b, 2c). 点乘运算按照点乘的几何定义矢量空间的证明略.

推论

矢量空间中必须包含无穷多的矢量, 否则不可能在数乘由于加法运算和数乘运算都具有闭合性, 线性组合 $c_1\mathbf{v}_1 + \dots + n\mathbf{v}_n$ 也具有闭合性.

⁵注意这个定义中并没有涉及任何坐标系的选取

线性相关和线性无关

如果矢量空间内的一个矢量能表示成空间内其他几个矢量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n$ 的线性组合,

$$\mathbf{u} = c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + \dots + c_n\mathbf{v}_n \quad (c_i \neq 0) \quad (1)$$

就说 \mathbf{u} 与 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n$ 线性相关. 但事实上, 上式中 \mathbf{u} 并不特殊, 因为只要上式成立, \mathbf{v}_i 中的任何一个也都能表示成其他几个矢量的线性组合. 所以线性相关的概念可以变为: 对 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n$, 如果能找到不为零的系数 c_i 使

$$c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + \dots + c_n\mathbf{v}_n = \mathbf{0} \quad (2)$$

那么这 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n$ 线性相关. 如果不存在非零的 $c_1, c_2 \dots c_n$, 那么 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \dots \mathbf{v}_n$ 线性无关, 即任何一个 \mathbf{v}_i 都不能用其他几个矢量的线性组合表示.

基底和维数

如果一个矢量空间中存在 N 个线性无关的非零矢量 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N$, 使得空间中的任何矢量都可以用 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N$ 的线性组合表示 (系数可以为零), 那么 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_N$ 就是这个空间的一组基底, 且这个空间是一个 **N 维空间**. 这个定义并没有歧义, 因为可以证明, 一个空间只要存在一组基底是 N 个线性无关的矢量, 那么该空间的任何基底都只能是 N 个线性无关的矢量 (证明略).

代数矢量

预备知识 正交归一基底^[97], 复数^[22]

我们可以把 N 个有序的数排成一行或一列, 分别称为**代数行矢量**或**代数列矢量**, 简称**行矢量**或**列矢量**, 本书中同样用加粗正体字母表示. 若一个代数矢量中所有的数都是实数, 且 $N \leq 3$ 时, 我们可以把它看做是一个几何矢量在一组 (往往是正交归一的) 基底上的展开式^{5[90]}. 这样就可以很自然地定义这种代数矢量的加法和数乘分别为式^{8[90]} 和式^{9[90]}.

当 $N > 3$ 或代数矢量中含有复数时，不存在对应的几何矢量，但我们仍然可以定义加法和数乘分别为

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \sum_{i=1}^N u_i + v_i \quad (1)$$

$$\lambda \mathbf{v} = \sum_{i=1}^N \lambda v_i \quad (2)$$

注意 N 维行矢量只能与 N 维行矢量相加，列矢量也一样。有了这两个定义，我们就可以类似几何矢量得到其他重要的概念，如**共线**，**线性组合**，**线性相关**，**线性无关**，**基底**，和**坐标**。代数矢量也可以组成许多不同的矢量空间，例如所有的 N 维的实数行矢量组成一个 N 维矢量空间，所有的 N 维复数列矢量组成一个 N 维矢量空间，等等。

为了便于理解，我们仍然可以想象代数矢量与某种抽象的矢量一一对应，这种抽象矢量不依赖于任何基底，其对应的代数矢量是这些个体在某组基底上的展开系数（线性组合的系数）。

例 1 用代数矢量表示多项式

作为上述“抽象矢量”的一个例子，我们可以把以所有小于 N 阶的多项式

$$P(x) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n x^n \quad (3)$$

看做一个 N 维矢量空间，矢量的加法就是多项式相加，数乘就是多项式与常数相乘。一组简单的基底是

$$\beta_n = x^n \quad (n = 0, 1, \dots, N-1) \quad (4)$$

显然这组基底是线性无关的，且空间中所有矢量（多项式）都可以在该基底上展开。任意 N 维代数矢量 $(c_0, \dots, c_{N-1})^\top$ 可以看做是一个多项式的坐标，且有一一对应的关系。代数矢量的加法和数乘对应多项式的加法和多项式与常数相乘。

点乘

由于代数矢量没有一般的几何意义，我们直接定义同一空间中两代数矢量的点乘为

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^N u_i^* v_i \quad (5)$$

其中 u_i^* 是 u_i 的复共轭（式 6^[22]），所以对于实数矢量，点乘化简为

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^N u_i v_i \quad (6)$$

现在我们可以定义任意代数矢量 \mathbf{v} 的模长为（注意模长都是非负的实数）

$$|\mathbf{v}| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}} = \left(\sum_i |v_i|^2 \right)^{1/2} \quad (7)$$

且定义若两个代数矢量点乘为 0，则它们互相正交。

现在我们可以类比几何矢量定义代数矢量的正交归一基底，事实上在“正交归一基底^[97]”中，我们并没有要求所有的矢量都是几何矢量，而只要存在“点乘”，“模长”和“正交”的概念。

若我们把代数矢量看做另一种矢量的坐标，那么只要这种矢量的点乘运算定义合理，我们就可以用代数矢量（坐标）的点乘来计算。

例 2 正弦级数矢量空间

区间 $[0, \pi]$ 内所有小于 N 阶的正弦级数（这里规定系数可以是复数）

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} C_n \sin(nx) \quad (8)$$

可以看做一个 N 维矢量空间，加法和数乘的定义就是函数相加和函数乘以常数。除此之外，我们还可以定义两个任意矢量 $f(x)$ 和 $g(x)$ 的点乘为

$$\int_0^\pi f^*(x) g(x) dx \quad (9)$$

不难证明 $\sin(x), \sin(2x), \dots, \sin[(N-1)x]$ 就是一组正交归一基底（证明见“三角傅里叶级数^[81]”）。

令 $f(x)$ 的坐标为 $(a_1, \dots, a_{N-1})^T$, $g(x)$ 的坐标为 $(b_1, \dots, b_{N-1})^T$, 则空间中任意两个矢量的点乘可以表示为两个代数矢量的点乘

$$\begin{aligned} \int_0^\pi f^*(x)g(x) dx &= \int_0^\pi dx \sum_{m=0}^{N-1} a_m^* \sin(mx) \sum_{n=0}^{N-1} b_n \sin(nx) \\ &= \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} a_m^* b_n \delta_{mn} = \sum_k a_k^* b_k \end{aligned} \quad (10)$$

我们知道两个几何矢量的点乘不需要任何坐标系（基底）的概念，所以我们可以使用它们在任意单位正交基底中的坐标计算点乘，结果相同。我们下面来证明代数矢量也满足类似的性质。

首先由式 5 易证点乘的分配律，即

$$(\mathbf{u}_1 + \dots + \mathbf{u}_m)(\mathbf{v}_1 + \dots + \mathbf{v}_n) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{v}_j \quad (11)$$

令两个代数矢量分别为 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_N)^T$ 和 $\mathbf{v} = (v_1, v_2, \dots, v_N)^T$, 我们可以把它们看做是某矢量空间中两个抽象矢量在某组正交归一基底上的坐标。这组基底对应的代数矢量分别为 $(1, 0, 0, \dots)^T$, $(0, 1, 0, \dots)^T$ 等。若另有一组正交归一基底 $\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N$, 关于原基底的坐标分别为 $(x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1N})^T$, $(x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2N})^T$ 等，则 \mathbf{u}, \mathbf{v} 可以在新基底上展开为 $(u'_1, u'_2, \dots, u'_N)^T$ 和 $(v'_1, v'_2, \dots, v'_N)^T$ 。所以有

$$\sum_k u_k^* v_k = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \left(\sum_{i=1}^N u'_i \hat{\mathbf{x}}_i \right) \cdot \left(\sum_{j=1}^N v'_j \hat{\mathbf{x}}_j \right) = \sum_{ij} u'_i^* v'_j \delta_{ij} = \sum_{k=1}^N u'_k^* v_k \quad (12)$$

矩阵与矢量空间

我们从矢量空间的角度来看式 5 的意义， n 维代数矢量 \mathbf{x} 可以看做任意 n 维矢量空间中的一个矢量在任意基底 $\{\alpha_i\}$ 上的坐标，而 m 维代数矢量 \mathbf{y} 可以表示任意 m 维矢量空间中的一个矢量在任意基底 $\{\beta_i\}$ 上的坐标。所以一个矩阵定义了从第一个空间到第二个空间的一个映射，即把第一个空间的任意一个矢量对应到第二个空间中的一个矢量。

我们先来看第一空间的基底 α_1 如何映射到第二空间. α_1 对应的列矢量是 $(1, 0, \dots)^T$, 作为 x 输入矩阵 A 得 y 等于 A 的第一列. 同理, 矩阵的第 i 列就是 α_i 映射到第二个空间的矢量在基底 $\{\beta_i\}$ 上的坐标.

显然, 这里讨论的映射是线性的, 即第一空间中任意几个矢量的线性组合的映射等于这几个矢量先映射到第二空间再进行同样的线性组合, 这从矩阵的乘法分配律易证. 所以要将第一空间任意矢量的映射到第二空间, 就先将它表示成第一空间基底的线性组合, 然后再对矩阵每一列在第二空间对应的矢量做同样的线性组合即可.

映射有一一映射

逆矩阵

逆矩阵

如果两个方阵的乘积是单位矩阵,

$$BA = I \tag{1}$$

那么 B 就叫做 A 的逆矩阵, 记为 A^{-1} . 从矢量空间的角度来看, 矩阵 A 把第一个矢量空间映射到第二个空间, 而 B 则可以看做把第二个空间的矢量逆映射到第一个空间. 这里的一个隐含要求是 A 必须代表一一映射, 如果是多对一的映射, 将不存在反射, 因为不存在代表一对多映射的矩阵. 一一映射要求 A 的每一列都线性无关, 所以 A 的行数必须大于等于列数. 另外显然一个矩阵最多只能有一个逆矩阵.

我们讨论逆矩阵时一般假设 A 和 A^{-1} 都是方阵⁶, 所以 A 是一个 N 维方阵, 代表两个 N 维矢量空间的一一映射, 即每个空间中任何一个矢量在另一个空间中都能找到唯一对应的矢量. 同理, A^{-1} 的性质也相同.

从以上的分析中易证, 如果 B 是 A 的逆矩阵, 那么 A 必定也是 B 的逆矩阵, 我们说 A 和 B 互逆, 即

$$AB = BA = I \tag{2}$$

⁶以后如无特殊说明, 我们都使用这个规定.

求逆矩阵

令 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 为 N 维列矢量, 如果有

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{y} \quad (3)$$

那么我们在等式两边左乘 \mathbf{A}^{-1} 得

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y} \quad (4)$$

要求逆矩阵, 一种简单直接但低效的方法就是先令 $\mathbf{y} = (1, 0, \dots)^T$, 代入式 3 解线性方程组得 x , 将 \mathbf{x}, \mathbf{y} 代入式 4 可知 x 就是 \mathbf{A} 的第一列, 再令 $\mathbf{y} = (0, 1, 0, \dots)^T$, 解线性方程组可得 \mathbf{A} 的第二列, 以此类推.

在一些实际问题中, 我们需要大量求解式 3 形式的方程组, 每个方程组都有同样的 \mathbf{A} 和不同的 y , 一个高效的做法是先求出 \mathbf{A}^{-1} , 这样解每个方程组就只需要做一次矩阵乘法 (式 4) 即可.

酉矩阵

预备知识 正交矩阵

酉矩阵也叫么正矩阵, 是正交矩阵的复数拓展, 即矩阵元可以是复数. 酉矩阵 \mathbf{U} 的定义同样为

$$\sum_k U_{ki} U_{kj} = \delta_{ij} \quad (1)$$

但由于复数的列矢量没有对应的几何矢量, 所以这里的正交完全是代数意义上的.

单位正交矩阵的超纲内容

预备知识 正交归一基底^[97], 逆矩阵^[349]

若一个实数方阵的每一列的模长都等于 1, 且任意两列都正交, 那么这个矩阵就是一个单位正交阵. 若 \mathbf{U} 为单位正交阵, 则其矩阵元满足

$$\sum_k U_{ki} U_{kj} = \delta_{ij} \quad (2)$$

其中 δ_{ij} 是克罗内克 δ 函数. 所以若把 N 阶单位正交阵的每一列看做 N 维空间中的一个单位矢量的直角坐标, 那么这些单位矢量就组成该空间的一组正交归一基底.

[式 2](#) 也可以用矩阵转置和矩阵乘法表示为

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I} \quad (3)$$

其中 \mathbf{I} 是单位矩阵. 根据逆矩阵的定义, 我们得到单位正交矩阵的一个重要性质, 即其逆矩阵等于转置矩阵.

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T \quad (4)$$

由逆矩阵的性质 ([式 2^{\[349\]}](#)) 得

$$\mathbf{U} \mathbf{U}^T = \mathbf{U} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{I} \quad (5)$$

表示为矩阵元的运算就是

$$\sum_k U_{ik} U_{jk} = \delta_{ij} \quad (6)$$

所以单位正交矩阵的所有行同样正交归一. 易证[式 2](#) 和[式 6](#) 互为充分必要条件, 都可以作为单位正交阵的定义.

几何理解

为了更形象地理解单位正交阵的上述性质, 我们以二维几何矢量和二维实数方阵为例讨论, 三维的情况同理可得.

任意的二维实数方阵可以看做是两个单位几何矢量 $\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{v}}$ 在正交归一基底 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 上的坐标 (即点乘).

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{x}} \\ \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{y}} \end{pmatrix} \quad (7)$$

显然矩阵的两个列矢量满足正交归一. 由点乘的交换律, 我们同样可以把矩阵的两行分别看做单位矢量 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 在正交归一基底 $\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{v}}$ 上的坐标, 所以矩阵的两个行矢量同样正交归一.

现在我们令任意几何矢量以 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ 为基底的坐标为 (x, y) , 以 $\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{v}}$ 为基底的坐标为 (u, v) , 即

$$\hat{\mathbf{v}} = u\hat{\mathbf{u}} + v\hat{\mathbf{v}} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} \quad (8)$$

由正交归一基底的性质,

$$\begin{cases} x = (u\hat{\mathbf{u}} + v\hat{\mathbf{v}}) \cdot \hat{\mathbf{x}} \\ y = (u\hat{\mathbf{u}} + v\hat{\mathbf{v}}) \cdot \hat{\mathbf{y}} \end{cases} \quad \begin{cases} u = (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}) \cdot \hat{\mathbf{u}} \\ v = (x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}}) \cdot \hat{\mathbf{v}} \end{cases} \quad (9)$$

写成矩阵的形式, 就是

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{x}} & \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{x}} \\ \hat{\mathbf{u}} \cdot \hat{\mathbf{y}} & \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{y}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{u}} & \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{u}} \\ \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{v}} & \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{v}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (10)$$

注意上式左边的矩阵是 \mathbf{U} , 右边的矩阵是 \mathbf{U}^T , 而右边的变换是左边的逆变换, 所以 $\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1}$.

傅里叶变换（三角）

预备知识 傅里叶级数（三角）[\[81\]](#)

为了把整个实数范围的非周期函数用三角函数展开, 在三角傅里叶级数中我们取极限 $l \rightarrow \infty$ 这时角频率的间隔趋于 0.

$$\Delta k = k_{n+1} - k_n = \frac{(n+1)\pi}{l} - \frac{n\pi}{l} = \frac{\pi}{l} \rightarrow 0 \quad (1)$$

傅里叶变换（指数）

预备知识 傅里叶级数（指数）[\[85\]](#), 傅里叶变换（三角）[\[352\]](#)

结论

用三角傅里叶变换[\[352\]](#) 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

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (1)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dx \quad (2)$$

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

离散傅里叶变换 (**Discrete Fourier Transform**) (**DFT**) 是一个复数域的线性变换^[109]. 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⁷

$$g_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} pq\right) f_q \quad (1)$$

$$f_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=0}^{N-1} \exp\left(\frac{2\pi i}{N} pq\right) g_p \quad (2)$$

一个更常见的名词是快速傅里叶变换（Fast Fourier Transform）（FFT），其定义与离散傅里叶变换一样，只是优化了算法使程序运行更快⁸.

离散傅里叶变换与傅里叶变换

预备知识 傅里叶变换（指数函数）[\[352\]](#)

在详细分析 DFT 的性质之前，我们先看看它与解析的傅里叶变换如何对应。函数 $f(x)$ 和 $g(k)$ 间的傅里叶变换为

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (3)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (4)$$

如果 $f(x)$ 和 $g(k)$ 分别只在区间 $[-L_x/2, L_x/2]$ 和 $[-L_k/2, L_k/2]$ 内不为零，积分就可以只在这两个区间内进行。我们再给两个区间划出 N 个等间距的格点 $\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots$ 和 $\dots, k_{-1}, k_0, k_1, \dots$ ($x_0 = k_0 = 0$)，并规定相邻格点的间距为

$$\Delta x = L_x/N \quad \Delta k = L_k/N \quad (5)$$

注意 x 和 k 的首尾格点分别相距 $L_x(N-1)/N$ 和 $L_k(N-1)/N$. 若 N 是奇数，我们令中间的格点为 x_0 和 k_0 ，如果 N 是偶数，我们令中间靠右的格点为 x_0 和 k_0 .

现在我们用求和近似上面的积分得⁹

$$g(k_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_q f(x_q) e^{-ik_p x_q} \Delta x \quad (6)$$

⁷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.

⁸参考 Numerical Recipes 3ed

⁹事实上，学习了下文的采样定理会发现这里用求和代替积分是没有任何误差的.

$$f(x_q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_p g(k_p) e^{ik_p x_q} \Delta k \quad (7)$$

式中 $k_p x_q = (\Delta x \Delta k)pq$, 对比 DFT 中的指数项, 得

$$\Delta x \Delta k = \frac{2\pi}{N} \quad (8)$$

但我们会发现这里的 p, q 可以是负整数, 而 DFT 中的 p, q 都是非负整数. 但稍加计算就会发现当 p 或 q 是负值时, 把它们加上 N , 指数项并不改变, 例如 $k_{p+N} x_q = k_p x_q + 2\pi$, 并不影响指数项. 所以, 我们只要将所有小于零的格点编号加上 N 并重新排列即可. 例如 $N = 4$ 时, x 格点为 x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1 , 令 $x_2 = x_{-2}, x_3 = x_{-1}$, 这四个格点的名字就变为 x_0, x_1, x_2, x_3 . 现在再来对比 DFT 和 式 6 式 7, 就只是相差两个常数因子而已了.

式 8 是 DFT 一个重要的性质. 结合式 5 得

$$N \Delta x \Delta k = L_x \Delta k = L_k \Delta x = \frac{L_x L_k}{N} = 2\pi \quad (9)$$

离散傅里叶变换只有两个自由度, 只要决定 $N, L_x, \Delta x, L_k, \Delta k$ 中的任意两个, 就可以完全决定变换公式. 注意 L_x 与 Δk 成反比, L_k 与 Δx 成反比, $L_x L_k$ 与 N 成正比.

总结起来, 要用 DFT 数值求解一个函数 $f(x)$ 的傅里叶变换, 就先用上述方法生成的格点将该函数等间距采样, 然后左半和右半调换(负脚标加上 N)得到 f_i , 代入 DFT 公式(在程序中使用 FFT)得到 g_i 再左半和右半调换得到 $g(k)$ 的离散点. 反傅里叶变换同理.

以后如无特殊说明, 默认 DFT 前后各将数列的左半右半交换一次.

变换矩阵

预备知识 酉矩阵

DFT 显然是一个线性变换, 我们来看变换矩阵的性质. 把变换和逆变换的系数矩阵用 \mathbf{F} 和 \mathbf{F}^{-1} 来表示, 令列矢量 $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_{N-1})^T$, $\mathbf{g} = (g_0, g_1, \dots, g_{N-1})^T$, 变换和逆变换分别记为

$$\mathbf{g} = \mathbf{F}\mathbf{f} \quad \mathbf{f} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{g} \quad (10)$$

其中

$$F_{pq} = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left(-\frac{2\pi i}{N} pq\right) \quad (11)$$

下面证明, \mathbf{F} 是一个酉矩阵, 所以逆变换矩阵就是 \mathbf{F} 的厄米共轭.

$$\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{F}^\dagger \quad (12)$$

不难验证式 2 的变换矩阵的确等于 \mathbf{F}^\dagger .

根据酉矩阵的定义, 我们需要证明

$$\sum_{p=0}^{N-1} F_{pq_1}^* F_{pq_2} = 0 \quad (q_1 \neq q_2) \quad (13)$$

而

$$\sum_{p=0}^{N-1} F_{pq_1}^* F_{pq_2} = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-1} \exp\left[\frac{2\pi i}{N}(q_2 - q_1)p\right] \quad (14)$$

注意到求和的每一项在复平面上都对应模长为 $1/N$, 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.

采样定理 (Sampling Theorem)

从以上的分析中, DFT 似乎只是一种近似, 且有种种限制, 例如我们只能取关于原点对称的区间, 又例如变换只有两个自由度. 我们不禁想定义更广义的离散傅里叶变换, 使式 6 和式 7 中 x_i 和 k_j 可以取任意区间的任意多个等间距格点. 但事实上, 这样的定义并不比 DFT 更精确, 而且不能用 FFT 算法提高运算速度.

这里给出傅里叶变换的采样定理, 采样定理的详细表述是: 如果 $g(k)$ 不超出 $[-L_k/2, L_k/2]$ (即 $f(x)$ 是有限带宽的), 那么我们只需要用 $\Delta x = 2\pi/L_k$ (DFT 恰好满足这个条件) 来对 $f(x)$ 采样就可以用以下插值公式精确还原出 $f(x)$ ¹⁰

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_n) \operatorname{sinc}[\pi(x - x_n)/\Delta x] \quad (15)$$

其中 $\operatorname{sinc} x = \sin x/x$ (且定义 $\operatorname{sinc} 0 = 1$).

¹⁰其实我并不确定是否需要 $x_0 = 0$ 或者 x_i 的位置有什么其他要求, 现在姑且认为 $x_0 = 0$ 好了.

现在我们将插值公式代入傅里叶变换得

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_n) \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}[\pi(x - x_n)/\Delta x] e^{-ikx} dx \quad (16)$$

结果是

$$g(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_n) e^{-ikx_n} \Delta x & (|k| \leq L_k/2) \\ 0 & (|k| > L_k/2) \end{cases} \quad (17)$$

当 $k = k_p$ 时, 这正是式 6, 所以这里用求和代替积分是没有误差的. 不仅如此, 该式也可以作为 $g(k)$ 的插值公式.

有时候我们并不知道 $f(x)$ 的带宽, 如何决定采样点的最大步长 Δx 呢? 一个简单的方法是先选一个较小的 Δx , 使 $f(x_i)$ 散点看起来较为连续. 这时解析傅里叶变换就可以用 DFT 近似. 得到 $g(k_j)$ 散点后, 再判断合理的 L_k 并计算相应的 Δx 即可.

由于傅里叶变化和反变换是对称的, 所以以上的分析中将 $f(x)$ 和 $g(k)$ 调换同样成立. 一个有趣的问题是, 是否存在一些情况使 $f(x)$ 和 $g(x)$ 都是有限带宽的? 严格来说这种情况是不存在的¹¹, 但许多时候我们可以近似认为函数在区间外等于零, 其中最常见的就是高斯波包的傅里叶变换.

归一化

我们知道傅里叶变换可以保持函数的模长不变, 或者说保持函数的归一化.

假设采样定理的条件成立, 我们来看如果通过离散点计算函数的模长. 以 $f(x)$ 为例, 用插值公式来计算模长的平方, 得

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) f(x) dx &= \\ \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_m)^* f(x_n) &\int_{-\infty}^{\infty} \text{sinc}[\pi(x - x_m)/\Delta x] \text{sinc}[\pi(x - x_n)/\Delta x] dx \end{aligned} \quad (18)$$

¹¹我们可以用反证法做一个不太严谨的证明: 如果这种情况存在, 那么 $f(x)$ 就可以用有限个 $\text{sinc}(x)$ 函数的线性组合来表示, 然而从定义上来看 $\text{sinc}(x)$ 函数在 x 的区间外不可能恒为零.

果然，这个积分的结果是

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} |f_i|^2 \Delta x \quad (19)$$

即函数的模方等于列矢量的模方乘以步长，这对 $g(k)$ 也同样成立。既然 DFT 是精确的，我们预期变换矩阵 \mathbf{F} 能保证变换前后列矢量的模长相等，而这恰好是酉矩阵的性质。

插值与添零

上面我们看到，如果 $f(x)$ 是有限带宽的，就可以使用式 15 进行插值，称为 sinc 插值¹²。然而在实践中，由于直接用 sinc 插值计算量太大，我们往往用下面介绍的添零法代替。

假设我们要对 N 个散点 $f(x_i)$ 插值，可以先做 DFT 得到 N 个 $g(k_j)$ ，由式 9 可知，要缩小 Δx 而保持 L_x 不变，就要保持 Δk 不变且增加 L_k 和 N 。所以我们可以 $g(k_j)$ 数列的两边添加相同数量的 0，然后再做反 DFT 变换即可¹³。

然而这么做与 sinc 插值得到的结果并不完全相同。sinc 插值得到的 $f(x)$ 往往会超出原来的区间（因为 sinc 函数只以 $\Delta x/x$ 的速度衰减）。所以我们首先需要在误差能接受的范围内取一个更大 L_x （即更小的 Δk ）。由于 sinc 插值函数的带宽严格小于 $L_k = 2\pi/\Delta x$ ，所以 L_k 不需要改变。现在我们可以认为两个函数都是有限带宽的了，要得到“包含所有信息”的 DFT，就要先保持 Δx 不变，对 $f(x_i)$ 在新区间补零，做 DFT 得到 $g(k_j)$ 。现在两个函数的地位完全平等，都可以用式 15 和式 17 中的任意一个来精确插值。而注意补零插值法就相当于式 17。所以这时再对 $g(k_j)$ 补任意多的零，就可以得到 $f(x)$ 任意密度的插值。在误差范围内，现在得到的 $f(x)$ 就与 sinc 插值得到的相等了。

如果直接按照 DFT 公式计算添零法，程序的速度未必比 sinc 插值要快，但如果用 FFT，那添零法将会更快¹⁴。

¹²注意实现的时候只能对有限项求和。

¹³不难证明如果新的长度是 N 的整数倍，反变换后在老格点处仍能得到同样的 $f(x_i)$ 。

¹⁴如果 FFT 中只有部分格点不为零，那么 FFT 理论上可以变得更快，称为 pruned FFT，然而 FFTW 的相关页面中介绍，只要非零格点的个数大于 1%，pruned FFT 都不会有显著的性能提升。

任意区间的 DFT

上面提到 DFT 或 FFT 的另一个限制就是只能在以零点为中心的两个区间之间变换 $f(x)$ 和 $g(k)$. 但事实上我们只需要把数据稍作处理就可以在两个任意的区间 $[x_a, x_b]$ 和 $[k_a, k_b]$ 进行变换.

我们先定义两个新函数¹⁵

$$f_1(x) = f(x + x_0)e^{-ik_0x} \quad g_1(k) = g(k + k_0)e^{i(k+k_0)x_0} \quad (20)$$

其中 $x_0 = (x_a + x_b)/2$, $k_0 = (k_a + k_b)/2$. 另外定义 $L'_x = x_b - x_a$, $L'_k = k_b - k_a$, $\Delta x' = 2\pi/L'_k$, $\Delta k' = 2\pi/L'_x$. 根据傅里叶变换的平移性质¹⁶, $f_1(x)$ 的傅里叶变换就是 $g_1(k)$. 注意 $f_1(x)$ 和 $g_1(k)$ 的 DFT 区间 $[-L_x/2, L_x/2]$ 和 $[-L_k/2, L_k/2]$ 分别关于原点对称. 现在我们只需要做 $f_1(x)$ 和 $g_1(k)$ 间的 DFT, 就能得到 $f(x)$ 和 $g(k)$ 间的离散变换, 不妨称为**广义 DFT**.

经过简单的推导可以发现广义 DFT 仍然可以用式 6 和式 7 表示, 只是 x 和 k 的 N 个格点分别落在 $[x_a, x_b]$ 和 $[k_a, k_b]$ 内¹⁷. 但在程序中, 最高效的做法还是先将 \mathbf{f} 先变为 \mathbf{f}_1 , 做 FFT 得到 \mathbf{g}_1 再变为 \mathbf{g} .

由采样定理易证, 如果 $g(k)$ 只在 $[k_a, k_b]$ 不为零, 那么只需用 $\Delta x' = 2\pi/L'_k$ 对 $f(x)$ 采样就可以用以下插值公式精确还原出¹⁸ $f(x)$.

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x_n) \operatorname{sinc}[\pi(x - x_n)/\Delta x] e^{ik_0(x-x_n)} \quad (21)$$

实际应用中同样也可以用补零法来插值.

广义 DFT 的好处是什么呢? 例如有时候非零区间 $[x_a, x_b]$ 或 (和) $[k_a, k_b]$ 很窄但却远离原点, 则 L_k 或 L_x 仍需取较大的值, 这时 DFT 就没有发挥最大效率, 因为大部分格点的函数值都是 0. 但如果用广义 DFT, 就可以大大减少格点数.

例 1 高斯波包

我们现在来用 FFT 数值计算以下高斯波包的傅里叶变换.

$$f(x) = e^{-x^2} e^{100ix} \quad (22)$$

¹⁵ 式 20 也可以改为 $f_1(x) = f(x + x_0)e^{-ik_0(x+x_0)}$ 和 $g_1(k) = g(k + k_0)e^{ikx_0}$

¹⁶ 容易证明, DFT 也精确满足这个性质.

¹⁷ 同样, 如果 N 是奇数, x_0, k_0 是中间格点, 否则就是中间靠右格点.

¹⁸ 对离散的 $f_1(x)$ 使用之前的插值公式, 再由 $f_1(x)$ 求 $f(x)$ 就可以推导出式 21.

为了便于验证数值结果, 解析的傅里叶变换结果是

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-(k-100)^2/4} \quad (23)$$

我们分别取 x, k 的区间为 $[-5, 5]$ 和 $[90, 110]$ (区间外的函数值不超过 1.4×10^{-11}). 所以我们采用式 21 的傅里叶变换, 令 $x_0 = 0, k_0 = 100$, 则 $L_x \geq 10, L_k \geq 20$. 为了满足 $L_x L_k = 2\pi N$ (见式 9), N 取最小值 32. 所以不妨令 $L_x = 10, L_k = 2\pi N/L_x = 20.106\dots$. 所以 $\Delta x = L_x/N = 0.313\dots, \Delta k = L_k/N = 2\pi/L_x = 0.628\dots$. 现在我们就可以生成 x, k 的格点并且做 FFT 了.

离散正弦变换

由正弦级数 ($n = 1, 2, 3 \dots$)

$$f(x) = \sum_n C_n \sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right) \quad (1)$$

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

不难推出正弦变换

$$g(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty f(x) \sin(kx) dx \quad (3)$$

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty g(k) \sin(kx) dk \quad (4)$$

注意这是一个正半轴的变换, 且正反变换相同.

正弦变换同样有采样定理, 即若 $g(k)$ 的区间为 $[0, L_k]$, 那么只需要取 $\Delta x = \pi/L_k$ 对 $f(x)$ 采样即可用以下插值公式精确还原 $f(x)$

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f(x_n) \frac{2x_n}{x + x_n} \operatorname{sinc}[\pi(x - x_n)/\Delta x] \quad (5)$$

离散正弦变换

把插值公式做正弦变换, 得

$$g(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{n=1}^{\infty} f(x_n) \sin(kx_n) \Delta x \quad (6)$$

现在假设 $f(x)$ 和 $g(k)$ 都只在 $[0, L_x]$ 和 $[0, L_k]$ 内，所以有

$$\Delta x L_k = \Delta k L_x = N \Delta x \Delta k = \frac{L_x L_k}{N} = \pi \quad (7)$$

可得无损的离散正弦变换为

$$g_q = \sum_{p=1}^{N-1} f_p \sin(\pi pq/N) \quad (8)$$

$$f_p = \sum_{q=1}^{N-1} g_q \sin(\pi pq/N) \quad (9)$$

可以证明变换矩阵是对称的单位正交矩阵，所以逆矩阵就是矩阵本身.

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

$$\begin{aligned} \oint_{\Omega} d\mathbf{s} &= \oint_{\Omega} [(\hat{\mathbf{x}} d\mathbf{s}) \hat{\mathbf{x}} + (\hat{\mathbf{y}} d\mathbf{s}) \hat{\mathbf{y}} + (\hat{\mathbf{z}} d\mathbf{s}) \hat{\mathbf{z}}] \\ &= \hat{\mathbf{x}} \oint_{\Omega} \hat{\mathbf{x}} d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{y}} \oint_{\Omega} \hat{\mathbf{y}} d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{z}} \oint_{\Omega} \hat{\mathbf{z}} d\mathbf{s} \end{aligned} \quad (1)$$

下面以第一项为例，证明积分结果为 0，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

$$\oint_{\Omega} \hat{\mathbf{x}} d\mathbf{s} = \int_V (\nabla \cdot \hat{\mathbf{x}}) dV = \int_V 0 dV = 0 \quad (2)$$

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

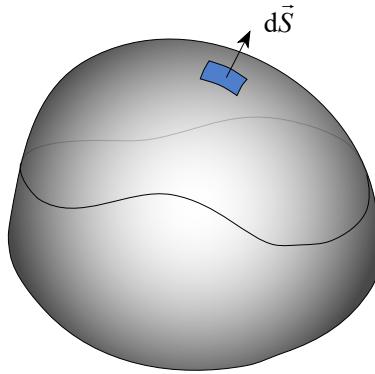


图 1: a

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

$$\sigma_{\bar{x}}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i - \bar{x} \right)^2 f(x_1) f(x_2) \dots f(x_n) dx_1 \dots dx_n \quad (1)$$

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：

$$\iint f(x_1)f(x_2) dx_1 dx_2 = \int f(x_1) dx_1 \int f(x_2) dx_2 = 1 \times 1 = 1 \quad (2)$$

先看 $(x_1 + x_2)/2$ 的平均值，令 $y = (x_1 + x_2)/2$.

$$\begin{aligned} \bar{y} &= \iint \frac{x_1 + x_2}{2} f(x_1)f(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \frac{1}{2} \int x_1 f(x_1) dx_1 \int f(x_2) dx_2 + \frac{1}{2} \int f(x_1) dx_1 \int x_2 f(x_2) dx_2 \\ &= \frac{\bar{x}}{2} + \frac{\bar{x}}{2} = \bar{x} \end{aligned} \quad (3)$$

结论是，进行两次测量取平均值，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。

$$\begin{aligned}\sigma_{\bar{x}}^2 &= \iint \left(\frac{x_1 + x_2}{2} - \bar{x} \right)^2 f(x_1) f(x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \frac{1}{2} (\bar{x}^2 - \bar{x}^2) = \frac{1}{2} \sigma_x^2\end{aligned}\tag{4}$$

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 $\sigma_{\bar{x}} = \frac{1}{\sqrt{n}} \sigma_x$

超定线性方程组

令 A 为 $M \times N$ 的复数矩阵， \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 为复数列矢量，当 $M > N$ 时，以下方程组称为超定方程组

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax} \tag{1}$$

我们把 \mathbf{y} 和 \mathbf{A} 拼接成一个 $M \times (N+1)$ 的矩阵，当这个矩阵的 M 个行矢量中只有 N 个线性无关时，我们只需取上式中 N 个线性无关的行即可得到普通的线性方程组。

如果有大于 N 个线性无关的行，那么超定方程无解。但我们仍然可以寻找一个最优的 \mathbf{x} ，使以下误差函数取最小值

$$|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}|^2 = \sum_k \left(\sum_j A_{kj} x_j - y_k \right) \left(\sum_j A_{kj} x_j - y_k \right)^* \tag{2}$$

所以这时一个最小二乘法问题。令误差函数分别对每个 $\text{Re}[x_i]$ 和 $\text{Im}[x_i]$ 求导等于 0，得

$$\sum_j \left(\sum_i A_{ik}^\dagger A_{kj} \right) x_j = \sum_k A_{ik}^\dagger y_k \tag{3}$$

即

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{y} \tag{4}$$

通常情况下该方程只有一个解，也就是最小二乘法的解。

对比式 1 可以发现式 4 只是在左右两侧同时乘以 \mathbf{A} 的厄米共轭. 所以任何能满足式 1 的解也可以通过式 4 解得.

海森矩阵

一个二阶可导的多元函数 $f(\mathbf{x})$ 的海森矩阵（Hessian） \mathbf{H} 定义为

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \quad (1)$$

$f(\mathbf{x})$ 的泰勒展开^[335] 的前两项可以用梯度矢量和海森矩阵表示为

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \nabla f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \mathbf{H}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathcal{O}((x - x_0)^3) \quad (2)$$

海森矩阵可以看做梯度矢量 ∇f 的雅可比矩阵，即

$$H_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

所以有

$$d(\nabla f) = \mathbf{H} d\mathbf{x} \quad (4)$$

如果 $f(\mathbf{x})$ 是一个二阶函数，海森矩将不随 \mathbf{x} 变化. 所以有

$$\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{x}_0) = \mathbf{H}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (5)$$

则函数的极值点为（令 $\nabla f = 0$ ）

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{H}^{-1} \nabla f(\mathbf{x}_0) \quad (6)$$

这就是牛顿法寻找函数极小值的主要思路.

幂函数（复数）

我们先来看实参数的幂函数 $f(x) = x^a$, $x > 0$ 时函数曲线如图 1 所示. 注意 $x^{1/a}$ 是 x^a 的反函数.

当 $x < 0$ 时，可得

$$x^a = |x|^a (-1)^a = |x|^a e^{i\pi a} \quad (1)$$

当 a 为偶整数时， $x^a = (-x)^a$ 是偶函数， a 为奇整数时， $x^a = -(-x)^a$ 是奇函数. 当 a 为非整数时， x^a 必为复数，其模长仍为 $|x|^a$ ，幅角为常数 $e^{i\pi a}$.

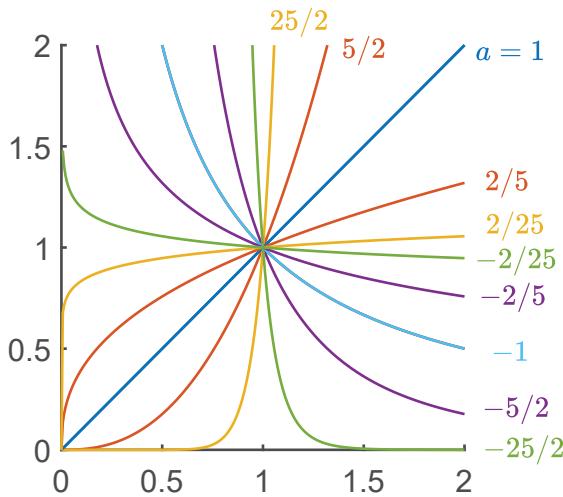


图 1: 实参数的幂函数 (相同颜色的函数互为反函数)

复参数的幂函数

我们再来将复数的幂函数分解为模长和相位的形式 (令 $z = |z|e^{i\phi(z)}$, $a = a_I + ia_R$)

$$z^a = |z|^{a_R} e^{-\phi(z)a_I} e^{i[\ln|z|a_I + \phi(z)a_R]} \quad (2)$$

可见 z^a 的模长和幅角都分别与 z 和 a 有关. 一般情况下, 这是一个比较复杂的函数, 含有不同的分支 (因为 $\phi(z)$ 可以加整数个 2π). 当且仅当 a 为整数时才不会出现分支. 在数值计算中, 分支切割线出现在 $\phi(z) = \pm\pi$ 处, 这是因为数值计算通常取 $\phi(z) \in (-\pi, \pi]$.

超几何函数

广义超几何函数表示为¹⁹

$${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a_1)_n \dots (a_p)_n}{(b_1)_n \dots (b_q)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (1)$$

其中 $(a)_n = a(a+1)\dots(a+n-1)$, 叫做 **Pochhammer 符号**.

¹⁹但据说当 $p > q + 1$ 时级数不收敛

合流超几何函数 ${}_1F_1(a; b; z)$

求平面库仑波函数需要使用 ${}_1F_1(a; b; z)$, 其级数展开为

$${}_1F_1(a; b; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{z^n}{n!} \quad (2)$$

渐进展开为

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a; b; z) &= \frac{(-1)^a \Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(a)_n (a-b+1)_n}{n!} z^{-n-a} \\ &\quad + \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(b-a)_n (1-a)_n}{n!} z^{-n+a-b} e^z \end{aligned} \quad (3)$$

连续分数展开为

$${}_1F_1(a; b; z) = 1 + \frac{az/b}{1+\dots} \frac{-c_1 z}{1+c_1 z+\dots} \frac{-c_2 z}{1+c_2 z+\dots} \quad (4)$$

$$c_n = \frac{a+n}{(n+1)(b+n)} \quad (5)$$

库仑函数

²⁰在球坐标系中解库仑势场中的薛定谔方程，会得到径向方程

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[1 - \frac{2\eta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0 \quad (1)$$

其解为第一类库仑函数 $F_l(\eta, \rho)$ 和第二类库仑函数 $G_l(\eta, \rho)$ 。第一类库仑函数的解析式为²¹

$$F_l(\eta, \rho) = A_l(\eta) \rho^{l+1} e^{\mp i\rho} M(l+1 \mp i\eta, 2l+2, \pm 2i\rho) \quad (2)$$

其中

$$A_l(\eta) = \frac{2^l e^{-\pi\eta/2} |\Gamma(l+1+i\eta)|}{(2l+1)!} \quad (3)$$

²⁰参考 NIST 官网

²¹这里的两套正负号是等效的。

$M(a, b, z)$ 是库默尔 (**Kummer**) **M** 函数, 也叫第一类合流超几何函数^[365], 记为 ${}_1F_1(a; b; z)$. 库仑函数也可以用惠特克 (**Whittaker**) **M** 函数来表示得更紧凑

$$F_l(\eta, \rho) = \left(\frac{\mp i}{2} \right)^{l+1} A_l(\eta) M_{\pm i\eta, l+\frac{1}{2}}(\pm 2i\rho) \quad (4)$$

其中惠特克 **M** 函数与库默尔 **M** 函数的关系为

$$M_{\kappa, \mu}(z) = e^{-z/2} z^{\mu+1/2} M(\mu - \kappa + 1/2, 1 + 2\mu, z) \quad (5)$$

$F_l(\eta, \rho)$ 是一个实函数, 类似 r 乘以第一类球贝赛尔函数^[22], 有

$$F_l(\eta, 0) = 0 \quad \frac{dF_l(\eta, \rho)}{d\rho} \Big|_0 = \begin{cases} A_0(\eta) & (l = 0) \\ 0 & (l > 0) \end{cases} \quad (6)$$

且渐进形式为

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} F_l(\eta, \rho) = \sin[\rho - \pi l/2 - \eta \ln(2\rho) + \sigma_l(\eta)] \quad (7)$$

其中 $\sigma_l(\eta)$ 是库仑相移 (**Coulomb phase shift**)

$$\sigma_l(\eta) = \arg[\Gamma(l + 1 + i\eta)] \quad (8)$$

第二类库仑函数 $G_l(\eta, \rho)$ 可以由 $H_l^\pm(\eta, \rho)$ 得到, 后者是两类库仑函数的线性组合^[23]

$$H_l^\pm(\eta, \rho) = G_l(\eta, \rho) \pm iF_l(\eta, \rho) \quad (9)$$

定义为

$$H_l^\pm(\eta, \rho) = (\mp i)^l e^{\pi\eta/2 \pm i\sigma_l(\eta)} W_{\mp i\eta, l+1/2}(\mp 2i\rho) \quad (10)$$

其中 $W_{\kappa, \mu}(z)$ 是惠特克 (**Whittaker**) **W** 函数

$$W_{\kappa, \mu}(z) = e^{-z/2} z^{\mu+1/2} U(\mu - \kappa + 1/2, 1 + 2\mu, z) \quad (11)$$

其中 $U(a, b, z)$ 是 库默尔 (**Kummer**) **U** 函数, 定义为

$$U(a, b, z) = \frac{\Gamma(1-b)}{\Gamma(a+1-b)} M(a, b, z) + \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b} M(a+1-b, 2-b, z) \quad (12)$$

²²当 $\eta = 0$ 时二者相等.

²³类比 $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$

式 11 代入式 10 得

$$H_l^\pm(\eta, \rho) = e^{\pm i\theta_l(\eta, \rho)} (\mp 2i\rho)^{l+1 \pm i\eta} U(l+1 \pm i\eta, 2l+2, \mp 2i\rho) \quad (13)$$

其中

$$\theta_l(\eta, \rho) = \rho - \eta \ln(2\rho) - \frac{1}{2}l\pi + \sigma_l(\eta) \quad (14)$$

是式 7 中的渐进相位。

$G_l(\eta, \rho)$ 的渐进形式为

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} G_l(\eta, \rho) = \cos \theta_l(\eta, \rho) \quad (15)$$

库仑函数的导数可以由惠特克函数的导数²⁴得到。

$$\frac{\partial}{\partial z} [M_{a,b}(z)] = \left(\frac{1}{2} - \frac{a}{z} \right) M_{a,b}(z) + \frac{1}{x} \left(a + b + \frac{1}{2} \right) M_{a+1,b}(z) \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} [W_{a,b}(z)] = \frac{1}{2z} [(z-2a)W_{a,b}(z) - 2W_{a+1,b}(z)] \quad (17)$$

可见程序中求导数大概要比求函数值多用一倍时间（因为要求两次惠特克函数），但同时也顺便求出了函数值。如果同时需要两类库仑函数及它们的导数，只需求 H^+ 函数的导数，这就顺便求出了 H^+ ，再分别取实部虚部即可。另外只需要把 H^+ 做复共轭即可得到 H^- 。

一种验证函数值是否正确的方法是使用以下性质

$$\mathcal{W}\{G, F\} = \mathcal{W}\{H^\pm, F\} = 1 \quad (18)$$

其中 $\mathcal{W}\{f_1(x), f_2(x)\}$ 是二阶朗斯基行列式（**Wronskian determinant**）

$$\mathcal{W}\{f_1(x), f_2(x)\} = \begin{vmatrix} f_1(x) & f_2(x) \\ f'_1(x) & f'_2(x) \end{vmatrix} = f_1(x)f'_2(x) - f_2(x)f'_1(x) \quad (19)$$

由渐进形式可得径向归一化积分²⁵与球贝赛尔函数的相同

$$\int_0^\infty F_l(Z/k', k'r) F_l(Z/k, kr) dr = \int_0^\infty \sin(k'r) \sin(kr) dr = \frac{\pi}{2} \delta(k - k') \quad (20)$$

²⁴ 可以使用 Wolfram Alpha 或 Mathematica

²⁵ 积分时可忽略 \sin 中的额外相位，但我不会证。

第二章

偏微分方程和特殊函数

一种 ∇ 算符的运算方法

在用 ∇ 算符计算梯度，散度和旋度时，我们几乎可以将其看作一个矢量进行运算，唯一的区别就是我们需要明确每一项中的偏微分是对哪些变量进行的。例如

$$\nabla \cdot (U\mathbf{A}) = \frac{\partial}{\partial x}(UA_x) + \frac{\partial}{\partial y}(UA_y) + \frac{\partial}{\partial z}(UA_z) \quad (1)$$

$$(\mathbf{A} \cdot \nabla)U = A_x \frac{\partial U}{\partial x} + A_y \frac{\partial U}{\partial y} + A_z \frac{\partial U}{\partial z} \quad (2)$$

如果以上两式中把 ∇ 符号替换成一个普通的矢量，两式将没有任何区别。可见 ∇ 符号包含了另一层信息，这个信息通过 ∇ 所在的位置来体现，但我们希望能定义一种新的符号 $[\dots]_{\dots}$ ，把偏导算符的作用对象在方括号的角标中声明，而在方括号内的 ∇ 可以像普通矢量一样进行运算，例如

$$[\nabla \cdot (U\mathbf{A})]_{A\partial U} \equiv [\mathbf{A} \cdot \nabla U]_{A\partial U} \equiv [U\nabla \cdot \mathbf{A}]_{A\partial U} \equiv \mathbf{A} \cdot \nabla U \quad (3)$$

又如，利用矢量公式 $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ ，有

$$[\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B})]_{\partial(AB)} = [\mathbf{A}(\nabla \cdot \mathbf{B}) + \mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{A})]_{\partial(AB)} \quad (4)$$

另外，由乘法的求导法则，有

$$[\dots]_{\partial(AB)} = [\dots]_{B\partial A} + [\dots]_{A\partial B} \quad (5)$$

使用这个新符号，我们可以化简许多常用的矢量公式。

例 1

证明 $\nabla \times (U\mathbf{A}) = (\nabla U) \times \mathbf{A} + U\nabla \times \mathbf{A}$.

$$\begin{aligned} [\nabla \times (U\mathbf{A})]_{\partial(UA)} &= [\nabla \times (U\mathbf{A})]_{A\partial U} + [\nabla \times (U\mathbf{A})]_{U\partial A} \\ &= [(\nabla U) \times \mathbf{A}]_{A\partial U} + [U\nabla \times \mathbf{A}]_{U\partial A} \\ &= (\nabla U) \times \mathbf{A} + U\nabla \times \mathbf{A} \end{aligned} \quad (6)$$

证毕。

例 2

化简 $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E})$.

$$[\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E})]_{\partial^2 E} = [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}]_{\partial^2 E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} \quad (7)$$

例 3

证明 $\nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}) = \mathbf{F} \times (\nabla \times \mathbf{G}) + \mathbf{G} \times (\nabla \times \mathbf{F}) + (\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G} + (\mathbf{G} \cdot \nabla) \mathbf{F}$.
从右向左证明, 上式等于

$$\begin{aligned} & [\mathbf{F} \times (\nabla \times \mathbf{G})]_{F \partial G} + [\mathbf{G} \times (\nabla \times \mathbf{F})]_{G \partial F} + [(\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G}]_{F \partial G} + [(\mathbf{G} \cdot \nabla) \mathbf{F}]_{G \partial F} \\ &= [\nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}) - (\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G}]_{F \partial G} + [\nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}) - (\mathbf{G} \cdot \nabla) \mathbf{F}]_{G \partial F} \\ &\quad + [(\mathbf{F} \cdot \nabla) \mathbf{G}]_{F \partial G} + [(\mathbf{G} \cdot \nabla) \mathbf{F}]_{G \partial F} \\ &= [\nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G})]_{F \partial G} + [\nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G})]_{F \partial G} \\ &= [\nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G})]_{\partial(FG)} = \nabla(\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}) \end{aligned} \quad (8)$$

证毕.

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, 所以它们分别为常数. 令

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = l^2 \quad (4)$$

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 $C_1 e^{lz} + C_2 e^{-lz}$, $\Phi(\theta)$ 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 $(d^2 \Phi / d\theta^2) / \Phi = -m^2$ 的参数, 而不是径向方程的参数 l . 参数 l 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

$$\nabla^2 u = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} \right) \quad (4)$$

球坐标系中的拉普拉斯方程

预备知识 球坐标系中的拉普拉斯算符^[372]

球坐标的拉普拉斯方程为

$$\nabla^2 u = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} \right) = 0 \quad (1)$$

使用分离变量法解方程, 令 $u(r, \theta, \phi) = f(r)g(\theta)h(\phi)$, 代入原方程并除以 u 得

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) / f + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial g}{\partial \theta} \right) / g + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial \phi^2} \right) / h = 0 \quad (2)$$

其中第一项只含有 r , 第二项只含有 θ , 第三项却含有 θ 和 ϕ . 我们可以先分离关于 r 的常微分方程, 称为径向方程, 以及关于 θ 和 ϕ 的方程, 称为角向方程. 令第一项为常数 $l(l+1)$, 则后两项之和为 $-l(l+1)$ (原因见下文), 角向方程为

$$l(l+1) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial g}{\partial \theta} \right) / g + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial \phi^2} \right) / h = 0 \quad (3)$$

两边同时乘以 $\sin^2 \theta$, 得到前二项只含 θ , 第三项只含 ϕ . 一般令前两项之和为常数 m^2 , 则第三项为 $-m^2$. 这样我们就成功分离出了三个常微分方程, 下面分别介绍.

径向方程是欧拉型方程

$$r^2 \frac{d^2 f}{dr^2} + 2r \frac{df}{dr} - l(l+1)f = 0 \quad (4)$$

使用变量代换 $t = \ln r$ 解得

$$f(r) = C_1 r^l + \frac{C_2}{r^{l+1}} \quad (5)$$

关于 θ 的方程是

$$\sin^2 \theta \frac{d^2 g}{d\theta^2} + \sin \theta \cos \theta \frac{dg}{d\theta} + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2]g = 0 \quad (6)$$

使用变量代换 $x = \cos \theta$ 得

$$(1-x^2) \frac{d^2 g}{dx^2} - 2x \frac{dg}{dx} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] g = 0 \quad (7)$$

或

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dg}{dx} \right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] g = 0 \quad (8)$$

该式被称为连带勒让德方程. 当 $m = 0$ 时, 方程简化为勒让德方程. 由 m 的定义可以看出 $m = 0$ 时拉普拉斯方程的解与方向角 ϕ 无关.

$$(1-x^2) \frac{d^2 g}{dx^2} - 2x \frac{dg}{dx} + l(l+1)g = 0 \quad (9)$$

连带勒让德方程的通解是连带勒让德函数 $P_l^m(x)$ 由于 $x = \cos \theta$, 定义域取 $x \in [-1, 1]$. 可以证明我们只需要取 $P_l^m(x)$ 中的 l, m 为整数, 且 $l \geq 0, -l \leq m \leq l$ 就可以获得一组完备的正交归一基底.

关于 ϕ 的方程是

$$\frac{d^2 h}{d\phi^2} = -m^2 h \quad (10)$$

该方程的解为 $e^{im\phi}$. 原则上 m 可以取任意实数, 但由于球坐标中的循环边界条件要求 $h(\phi + 2\pi) = h(\phi)$, m 只能取任意整数.

综上, 球坐标中拉普拉斯方程的通解为

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(C_{l,m} r^l + \frac{C'_{l,m}}{r^{l+1}} \right) P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (11)$$

我们一般把在单位球面上归一化的 $g(\theta)h(\phi)$ 称为球谐函数^[379], 记为 $Y_l^m(\theta, \phi)$ (满足角向方程式 3), 则通解也可记为¹

$$u(r, \theta, \phi) = \sum_{l,m} \left(A_{l,m} r^l + \frac{B_{l,m}}{r^{l+1}} \right) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (12)$$

球坐标系中的亥姆霍兹方程

预备知识 球坐标系中的拉普拉斯方程^[373]

亥姆霍兹方程为²

$$\nabla^2 f + k^2 f = 0 \quad (1)$$

球坐标系中, 可以将拉普拉斯算子分解为径向和角向两部分

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \nabla_a^2 \quad (2)$$

其中 ∇_r^2 是关于 r 的二阶偏微分算符, $r^2 \nabla_a^2$ 是关于 θ, ϕ 的二阶偏微分算符.

与拉普拉斯方程^[373] 中的过程类似, 用分离变量法, 令 $f(\mathbf{r}) = R(r)Y(\hat{\mathbf{r}})$, 则分离后的径向方程和角向方程分别

$$r^2 \nabla_r^2 R(r) + [k^2 r^2 - l(l+1)] R(r) = 0 \quad (3)$$

$$r^2 \nabla_a^2 Y(\hat{\mathbf{r}}) = -l(l+1) Y(\hat{\mathbf{r}}) \quad (4)$$

我们已知角向的解为球谐函数 $Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$. 而径向方程比普拉斯方程中的多出了含 k 的项, 使用变量代换 $\rho = kr$ 得

$$\rho^2 \frac{d^2 R}{d\rho^2} + [\rho^2 - l(l+1)] R = 0 \quad (5)$$

该方程被称为球贝赛尔方程, 两个线性无关解分别是第一和第二类球贝赛尔函数^[378] $j_l(\rho)$ 和 $y_l(\rho)$.

综上, 方程的通解为

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} [A_l j_l(kr) + B_l y_l(kr)] Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (6)$$

¹以后为了方便, 我们常在求和符号中省略 l, m 的范围.

²一般地, k 可以是复数, 所以 k^2 也可以是负实数.

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

$$\frac{1}{\sqrt{1+r^2-2rx}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)r^l \quad (1)$$

其中 $1/\sqrt{1+r^2-2rx}$ 叫做勒让德多项式的生成函数或母函数

贝赛尔函数

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 $Y_\alpha(x)$. 这里只讨论 $x > 0$ 且 α 为整数或半整数的情况.

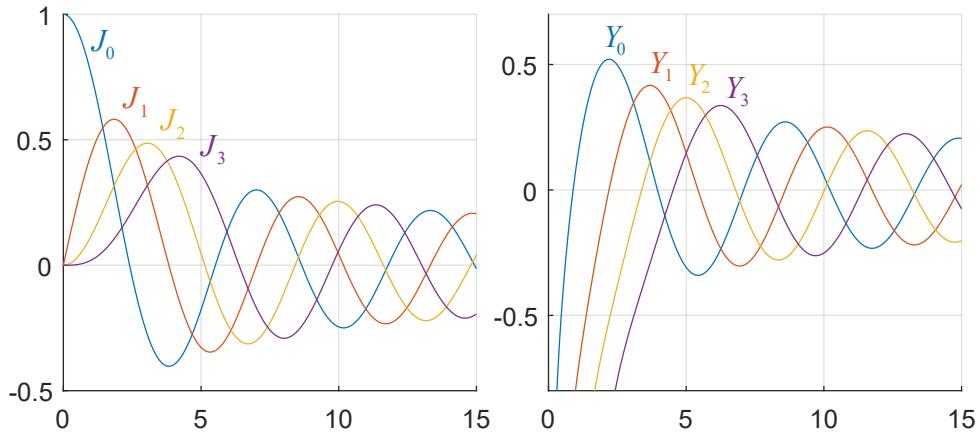


图 1: 第一类和第二类贝赛尔函数

$J_\alpha(x)$ 的级数形式为

$$J_\alpha(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+\alpha+1)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\alpha} \quad (2)$$

其中使用了 Γ 函数^[335]. $Y_\alpha(x)$ 可以通过 $J_\alpha(x)$ 来定义

$$Y_\alpha(x) = \frac{J_\alpha(x) \cos \alpha\pi - J_{-\alpha}(x)}{\sin \alpha\pi} \quad (3)$$

汉克尔函数

贝赛尔方程的两个线性无关解也可以用第一类和第二类汉克尔函数来表示³

$$H_{\alpha}^{(1)}(x) = J_{\alpha}(x) + iY_{\alpha}(x) \quad H_{\alpha}^{(2)}(x) = J_{\alpha}(x) - iY_{\alpha}(x) \quad (4)$$

常用性质

令 Z 为 $J, Y, H^{(1)}, H^{(2)}$ 的任意一种，则

$$Z_{-\alpha}(x) = (-1)^{\alpha} Z_{\alpha}(x) \quad (5)$$

递推关系

$$\frac{2\alpha}{x} Z_{\alpha}(x) = Z_{\alpha-1}(x) + Z_{\alpha+1}(x) \quad (6)$$

一阶导数

$$\frac{dZ_{\alpha}}{dx} = \frac{1}{2}[Z_{\alpha-1}(x) - Z_{\alpha+1}(x)] \quad (7)$$

正交关系

$$\int_0^1 x J_{\alpha}(u_{\alpha,m}x) J_{\alpha}(u_{\alpha,n}x) dx = \frac{\delta_{m,n}}{2} [J_{\alpha+1}(u_{\alpha,m})]^2 \quad (8)$$

其中 $u_{\alpha,m}$ 是 $J_{\alpha}(x)$ 的第 m 个根.

修正贝赛尔函数

修正贝赛尔方程为

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} - (x^2 + \alpha^2)y = 0 \quad (9)$$

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

$$I_{\alpha}(x) = i^{-\alpha} J_{\alpha}(ix) \quad K_{\alpha}(x) = \frac{\pi}{2} i^{\alpha+1} H_{\alpha}^{(1)}(ix) \quad (10)$$

³可类比欧拉公式 $\exp(\pm ix) = \cos x \pm i \sin x$ (式 3^[27]).

球贝塞尔函数

预备知识 贝赛尔函数^[376]

球贝塞尔方程为

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} + [x^2 - n(n+1)]y = 0 \quad (1)$$

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

$$j_l(x) \rightarrow \sin(x - l\pi/2)/x \quad y_l(x) \rightarrow -\cos(x - l\pi/2)/x \quad (6)$$

$$h_l^{(1)}(x) \rightarrow (-i)^{l+1} e^{ix}/x \quad h_l^{(2)}(x) \rightarrow i^{l+1} e^{-ix}/x \quad (7)$$

由渐进形式可得径向归一化积分为 (以 j_l 为例)

$$\int_0^\infty j_l(k'r) j_l(kr) r^2 dr = \int_0^\infty \sin(k'r - l\pi/2) \sin(kr - l\pi/2) dr = \frac{\pi}{2} \quad (8)$$

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

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + 2x \frac{dy}{dx} - [x^2 + n(n+1)]y = 0 \quad (9)$$

$$i_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} I_{n+1/2}(x) = i^{-n} j_n(ix) \quad (10)$$

$$k_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} K_{n+1/2}(x) = \frac{\pi}{2} i^{n+2} h_n^{(1)}(ix) \quad (11)$$

分别为第一类和第二类. 漐进形式为

$$i_n(x) \rightarrow \frac{e^x}{2x} \quad k_n(x) \rightarrow \frac{\pi}{2} \frac{e^{-x}}{x} \quad (12)$$

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⁴

$$Y_l^m = A \cdot P_l^m(\cos \theta) e^{im\theta} \quad (1)$$

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.

球谐函数满足

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2)$$

中括号中的算符是球坐标系拉普拉斯算子 ∇^2 中的角向部分 (记为 ∇_θ^2) 乘以 r^2 .

由归一化条件确定归一化系数 A , 得到⁵

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\theta} \quad (3)$$

⁴有时也将球谐函数记为 Y_{lm}

⁵这是 Mathematica 中的定义, 也有一种定义在前面加 $(-1)^m$.

在球坐标中，半径为 R 的球的面元为 $R \mathrm{d}\theta R \sin \theta \mathrm{d}\phi = R^2 \sin \theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\phi$ ，积分为

$$1 = A^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi P_l^m(\cos \theta)^2 e^{im\theta} e^{-im\theta} \sin \theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\phi \quad (4)$$

两个指数项相乘为 1，且对 θ 进行换元 $u = \cos \theta$ ，得

$$1 = A^2 \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 P_l^m(x)^2 \mathrm{d}x \mathrm{d}\phi = 2\pi A^2 \int_{-1}^1 P_l^m(x)^2 \mathrm{d}x \quad (5)$$

由连带勒让德方程的归一化系数，

正交归一条件

$$\int Y_{l'}^{m'} Y_l^m \mathrm{d}\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (6)$$

其他性质

$$Y_l^{m*} = (-1)^m Y_l^{-m} \quad (7)$$

旋转变换

$$Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}') = \sum_{m'=-l}^l D_{m,m'}^{(l)}(\mathcal{R})^* Y_{l,m}'(\hat{\mathbf{r}}) \quad (8)$$

其中 D 是 Wigner-D 矩阵。从量子力学的角度来说，总角动量是与方向无关的，只有角动量分量有关。

特殊地

$$Y_{l,m}(-\hat{\mathbf{r}}) = (-1)^l Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (9)$$

球面波的归一化

预备知识 平面波的归一化

令一组 scaled 径向函数基底为 $u_{l,m}(k, r) = r R_{l,m}(k, r)$ ，若满足

$$\int_0^\infty u_{l,m}^*(k', r) u_{l,m}(k, r) \mathrm{d}r = \delta(k - k') \quad (1)$$

则一组完备正交归一的球面波基底为

$$s_{l,m}(k, \mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_{l,m}(k, r) Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2)$$

正交归一条件为

$$\begin{aligned} & \langle s_{l,m}(k, \mathbf{r}) | s_{l',m'}(k', \mathbf{r}) \rangle \\ &= \int_0^\infty \frac{1}{r} u_{l,m}^*(k, r) \frac{1}{r} u_{l',m'}(k', r) r^2 dr \int Y_{l,m}^*(\hat{\mathbf{r}}) Y_{l',m'}(\hat{\mathbf{r}}) d\Omega \\ &= \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \delta(k - k') \end{aligned} \quad (3)$$

函数的球面波展开

空间中任意复函数可以用球面波展开为

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) &= \sum_{l,m} \int_0^\infty c_{l,m}(k) |s_{l,m}(k, \mathbf{r})\rangle dk \\ &= \frac{1}{r} \sum_{l,m} \left(\int_0^\infty c_{l,m}(k) u_{l,m}(k, r) dk \right) Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (4)$$

函数在任意基底上的投影为

$$\begin{aligned} \langle s_{l,m}(k, \mathbf{r}) | f(\mathbf{r}) \rangle &= \sum_{l',m'} \int_0^\infty dk' c_{l',m'}(k') \langle s_{l,m}(k, \mathbf{r}) | s_{l',m'}(k', \mathbf{r}) \rangle \\ &= \sum_{l',m'} \int_0^\infty dk' c_{l',m'}(k') \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \delta(k - k') \\ &= c_{l,m}(k) \end{aligned} \quad (5)$$

令 $|f\rangle$ 的分波展开形式为

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sum_{l,m} g_{l,m}(r) Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (6)$$

则 $g_{l,m}(r)$ 和 $c_{l,m}(k)$ 有类似傅里叶变换的关系

$$g_{l,m}(r) = \int_0^\infty c_{l,m}(k) u_{l,m}(k, r) dk \quad (7)$$

$$c_{l,m}(k) = \int_0^\infty u_{l,m}^*(k, r) g_{l,m}(r) dr \quad (8)$$

归一化的球贝赛尔函数

由于 e^{ikx} 从负无穷到正无穷的归一化积分为 $2\pi\delta(k - k')$, 易得 $\sin(kx)$ 的积分为 $\pi\delta(k - k')$ (先表示成指数形式), 从 0 到正无穷的积分为 $\pi\delta(k - k')/2$.

注意归一化只需要渐进表达式即可 (因为局部的不同相对于无穷积分来说可以忽略). 球贝赛尔函数的渐进形式为 $j_l(kr) \rightarrow \sin(kr - l\pi/2)/(kr)$, 所以 $krj_l(kr)$ 从 0 到正无穷的归一化积分同样是 $\pi\delta(k - k')/2$. 所以归一化的球贝赛尔函数为

$$u_{l,m}(k, r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} kr j_l(kr) \quad (9)$$

平面波的球谐展开

预备知识 球谐函数^[379]

复数形式的平面波可以展开为⁶⁷

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (1)$$

其中正交归一的球面波为

$$|s_{l,m}(k)\rangle = s_{l,m}(k, \mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2}{\pi}} kr j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2)$$

且平面波式 1 可以表示为相同能量球面波的线性组合⁸

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_{l,m} \frac{i^l}{k} Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) |s_{l,m}(k)\rangle \quad (3)$$

顺带一提, 三维空间的单位算符是

$$\int_0^\infty dk \sum_{l,m} |s_{l,m}(k)\rangle \langle s_{l,m}(k)| \quad (4)$$

⁶由 $Y_{l,m}^* = (-1)^m Y_{l,-m}$ 易证这里的复共轭可以加在任意一个球谐函数上.

⁷由 $Y_{l,m}(-\hat{\mathbf{k}}) = (-1)^l Y_{l,m}(\hat{\mathbf{k}})$ 易得 $\langle \mathbf{k}|$.

⁸这里不作证明

就像一维傅里叶变换可以表示为

$$|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk |k\rangle \langle k|f\rangle \quad (5)$$

其中 $|k\rangle = \exp(i k x) / \sqrt{2\pi}$.

球谐展开函数的傅里叶变换

若三维函数具有球谐展开的形式

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sum_{l,m} u_{lm}(r) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (6)$$

要做傅里叶变换

$$g(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k}|f\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3r \quad (7)$$

将式 3 代入上式得

$$g(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} \sum_{l,m} g_{l,m}(k) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) \quad (8)$$

其中

$$g_{l,m}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^{-l} \int_0^{+\infty} u_{lm}(r) kr j_l(kr) dr \quad (9)$$

氢原子基态的动量谱

氢原子基态的波函数（原子单位）为

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad (10)$$

显然只有 $l = 0, m = 0$ 球谐项。而 $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$, 所以径向波函数为

$$R_{00}(r) = 2e^{-r} \quad (11)$$

所以傅里叶变换为（注意 $j_0(x) = \sin x/x$ ）

$$g(\mathbf{k}) = \frac{\sqrt{2}}{k\pi} \int_0^{\infty} e^{-r} \sin(kr) r dr = \frac{2\sqrt{2}}{\pi(k^2 + 1)^2} \quad (12)$$

我们也可以将沿 z 轴正方向的三维平面波用球坐标表示（不使用球谐函数），再在球坐标中与波函数积分，结果相同。

第三章

理论力学

拉格朗日方程

预备知识 牛顿第二定律^[177], 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.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2 \dots) \quad (1)$$

其中 L 是系统的拉格朗日量 (**lagrangian**), 等于系统动能减势能 (我们先假设势能不是 q_i 的函数)

$$L(q_1, q_2 \dots, \dot{q}_1, \dot{q}_2 \dots, t) = T(q_1, q_2 \dots, \dot{q}_1, \dot{q}_2 \dots, t) - V(q_1, q_2 \dots, t) \quad (2)$$

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, 把它们看做时间的函数 $x(t), y(t), z(t)$, 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

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\ddot{x} \quad (4)$$

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^[218]，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） $\partial L/\partial\dot{\theta}$ ，原因是 θ 对应的拉格朗日方程右边为零

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = \frac{\partial L}{\partial \theta} = 0 \quad (12)$$

即拉格朗日量与 θ 无关（或者表述成“不含 θ ”）。

一般地，若拉格朗日量与某个广义坐标 q_i 无关，则该坐标对应的广义动量 p_i 是一个守恒量，我们把这样的坐标叫做循环坐标。广义动量（也叫共轭动量）被定义为

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (13)$$

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

$$x_1 = X - x/2 \quad x_2 = X + x/2 \quad (14)$$

动能为

$$T = \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_2^2 = m\left(\dot{X}^2 + \frac{1}{4}\dot{x}^2\right) \quad (15)$$

势能为

$$V = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 = k\left(X^2 + \frac{3}{4}x^2\right) \quad (16)$$

可求得拉格朗日方程组为

$$m\ddot{x} = -3kx \quad m\ddot{X} = -kX \quad (17)$$

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^[187]”中的结论可得 $x(t)$ 和 $X(t)$ 的通解为

$$x(t) = x_0 \cos\left(\sqrt{\frac{3k}{m}}t + \phi_x\right) \quad X(t) = X_0 \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \phi_X\right) \quad (18)$$

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 $(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 = L^2$ 这时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函数 $L(t)$ 。这里我们只讨论完整约束，即可以表示成以下形式

$$f_i(q_1, q_2, \dots, q_N, t) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, M) \quad (19)$$

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 不含时约束

两个质量为 m 的质点分别被限制在 x 轴和 y 轴上移动，且他们之间由长度为 l 的轻杆相连。 x 轴的质点另与一平行于 x 轴的弹簧相连，平衡位置为 x_0 ，恢复系数为 k ，求该系统的运动方程。

该系统只有一个自由度，我们可以把 x 轴质点的 x 坐标作为广义坐标，则由约束方程 $x^2 + y^2 = l^2$ 可得 y 轴质点的速度为

$$\dot{y} = -\frac{x\dot{x}}{\sqrt{l^2 - x^2}} \quad (20)$$

所以系统的拉格朗日量为

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \left(1 + \frac{x^2}{l^2 - x^2}\right) + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 \quad (21)$$

代入拉格朗日方程即可。

例 5 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

$$L = T - V = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + x^2\omega^2) \quad (22)$$

代入拉格朗日方程，得到运动方程

$$\ddot{x} = \omega^2 x \quad (23)$$

该函数的通解为

$$x(t) = C_1 e^{\omega t} + C_2 e^{-\omega t} \quad (24)$$

非保守力的拉格朗日方程

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

$$T = \frac{1}{2} \sum_j m_j \mathbf{v}_j^2 = \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \dot{\mathbf{r}}_j \quad (25)$$

由矢量点乘的求导法则

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial \dot{q}_i} \quad (26)$$

其中质点 j 的速度可以用全导数^[129] 公式

$$\dot{\mathbf{r}}_j = \sum_k \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} \quad (27)$$

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。

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (28)$$

代入式 26 并对时间求导得到拉格朗日方程的左边（我们暂时只讨论 $\partial V / \partial \dot{q}_i = 0$ 的情况）

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_j \ddot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} + \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (29)$$

拉格朗日方程的右边为

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{\partial T}{\partial q_i} - \frac{\partial V}{\partial q_i} \quad (30)$$

其中第一项为

$$\frac{\partial T}{\partial q_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial q_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \cdot \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} \quad (31)$$

第二项被定义为广义力

$$Q_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i} = \sum_j \left(-\frac{\partial V}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} - \frac{\partial V}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial q_i} - \frac{\partial V}{\partial z_j} \frac{\partial z_j}{\partial q_i} \right) = \sum_j \mathbf{F}_j^{(a)} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (32)$$

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 29 等于式 31 加式 32, 首先需要证明

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} \quad (33)$$

也就是证明全导数和偏导数运算可对易. 使用全导数^[129]的定义, 以及混合偏导^[122]的性质, 有

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_i} \dot{q}_k + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{d\mathbf{r}_j}{dt} \quad (34)$$

然后我们需要证明

$$\sum_j \left(\mathbf{F}_j^{(a)} - m\ddot{\mathbf{r}}_j \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1 \dots N) \quad (35)$$

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

$$\sum_j \left(\mathbf{F}_j^{(a)} + \mathbf{F}_j^{(c)} - m\ddot{\mathbf{r}}_j \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1 \dots N) \quad (36)$$

现在我们只需证明

$$\sum_j \mathbf{F}_j^{(c)} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} = 0 \quad (i = 1 \dots N) \quad (37)$$

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^[385]

若系统某时刻由 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 之间系统的作用量（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。

$$\frac{dS}{d\alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial}{\partial \alpha} L[\{q_i(t, \alpha)\}, \{\dot{q}_i(t, \alpha)\}, t] dt \quad (2)$$

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

$$\frac{dS}{d\alpha} = \sum_i \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial^2 q_i}{\partial \alpha \partial t} \right] dt \quad (3)$$

² “最小”只是习惯的叫法，极值可以是极小值，极大值或鞍点。

对第二项使用分部积分^[60] 得

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial^2 q_i}{\partial \alpha \partial t} dt = \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} \right|_{t=t_1}^{t=t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} dt \quad (4)$$

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

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (i = 1 \dots N) \quad (6)$$

哈密顿正则方程

预备知识 拉格朗日方程^[385]

哈密顿量

我们定义一个系统的哈密顿量为

$$H = \sum_i \dot{q}_i p_i - L \quad (1)$$

其中 L 为拉格朗日量, p_i 为广义坐标 q_i 的共轭动量 (见式 13^[385]).

当 L 等于系统动能减势能时, 哈密顿量等于系统能量. 证明如下: 将系统看做质点系, 由于 $L = T - V$ 且 V 与 \dot{q} 无关, 有

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \sum_j \frac{1}{2} m_j \dot{\mathbf{r}}_j^2 = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_j}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \quad (2)$$

其中最后一步利用了式 28^[385]. 所以式 1 中的求和项为

$$\sum_i \dot{q}_i p_i = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j \sum_i \frac{\partial \mathbf{r}_j}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} = \sum_j m_j \dot{\mathbf{r}}_j^2 = 2T \quad (3)$$

其中第二步用到了 $r(q_1(t), q_2(t) \dots)$ 的全微分^[126], 注意该函数不能显含 t . 上式代回式 1, 可证明 $H = T + V$ 等于系统总能量. 证毕.

从拉格朗日函数 L 变为哈密顿量 H 的这种变换, 叫做拉格朗日变换.

哈密顿正则方程

哈密顿正则方程是一组以 N 个广义坐标 q_i 和 N 个共轭动量（式 13^[385]）作为因变量的方程组，共有 $2N$ 条方程。与拉格朗日方程相比，虽然方程的个数增多了，但是方程却由二阶变为了一阶。

如果把系统的哈密顿量写成广义坐标和广义动量的函数

$$H(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \quad (4)$$

（注意函数中不能出现 \dot{q}_i ）则哈密顿正则方程为

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad (i = 1 \dots N) \quad (5)$$

可见在方程中， q_i 和 p_i 是对称的，具有同样的地位。

例 1 直角坐标系中的质点运动

直角坐标系中一个质点的拉格朗日量为 $L = m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)/2 - V$ ，共轭动量就是通常定义的动量（用 x_1, x_2, x_3 表示 x, y, z ）

$$p_{x_i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i \quad (6)$$

哈密顿量等于总能量（注意要写成 x_i 和 p_{x_i} 的函数，不能含有 \dot{x}_i ）为

$$H = \sum_i \frac{p_{x_i}^2}{2m} + V \quad (7)$$

代入哈密顿方程得

$$\begin{cases} \dot{x}_i = \frac{p_{x_i}}{m} \\ \dot{p}_{x_i} = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \end{cases} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (8)$$

显然上式的第一条是（普通）动量与速度的关系，第二条则是牛顿第二定律。

推导

对式 1 全微分，有

$$dH = \sum_i \dot{q}_i dp_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i - dL \quad (9)$$

对拉格朗日量全微分，有

$$dL = \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (10)$$

将拉格朗日方程式 1^[385] 的右边和广义动量的定义式 13^[385] 代入上式，得

$$dL = \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (11)$$

代入式 9，得

$$dH = - \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (12)$$

由于 H 是 p_i, q_i, t 的函数，其全微分为

$$dH = \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (13)$$

最后，对比以上两式可得哈密顿正则方程，以及

$$\frac{\partial H}{\partial t} = - \frac{\partial L}{\partial t} \quad (14)$$

闭合轨道的条件

预备知识 比耐公式^[257]

比耐公式可记为

$$\frac{d^2 u}{d\theta^2} + u = -\frac{m}{l^2 u^2} f\left(\frac{1}{u}\right) \quad (1)$$

其中 $u = 1/r$ ，有心力 f 向外为正， l 为轨道角动量。首先易得圆形轨道满足

$$l = -mr^3 f \quad (2)$$

任何 $f < 0$ 的力场都支持圆形轨道，然而根据等效一维势能， $V' = V + l^2/(2mr^2)$ 必须在最低点的二阶导数大于零轨道才能稳定。在稳定情况下，令半径为 r_0 ，如果给天体一个微扰， r 会呈周期性波动，我们不妨假设这个波动很小，使

$$f(r) = f(r_0) + f'(r_0)(r - r_0) \quad (3)$$

则可以证明式 1 的解为

$$u = u_0 + a \cos \beta \theta \quad (4)$$

其中

$$\beta^2 = 3 + \frac{r}{f} \frac{df}{dr} \Big|_{r=r_0} \quad (5)$$

这里 β 的意义是天体每转过一周关于 r_0 振动的次数，对于平方反比力的椭圆轨道，显然有 $\beta = 1$. 所以，当 β 为有理数（即 $\beta = n_1/n_2$ ）时，轨道是闭合的.

为了要求在任意距离的半径上轨道都闭合， β 必须不能随 r 变化，所以可以把式 5 看成 $f(r)$ 的微分方程，通解为

$$f(r) = -\frac{k}{r^{3-\beta^2}} \quad (6)$$

Bertrand 定理

我们以上只考虑了一阶微扰的情况，如果轨道与圆形轨道偏离较大，如何找到闭合条件呢？我们可以将 f 由上面的微分近似变为高阶泰勒展开，再来寻找比耐公式的解. J. Bertrand 在 1873 年证明，只有当 $\beta^2 = 1$ 或 $\beta^2 = 4$ 的时候才能满足所有可能的轨道都闭合，而这两种情况分别对应平方反比力，以及胡克定律. 这个定理被称为 **Bertrand 定理**.

经典力学笔记

拉格朗日方程为

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad L(q, \dot{q}, t) = T - V \quad (1)$$

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 $q'(q)$

$$\dot{q}'_i = \sum_j \frac{\partial q'_i}{\partial q_j} \dot{q}_j \quad \dot{q}_i = \sum_j \frac{\partial q_i}{\partial q'_j} \dot{q}'_j \quad (5)$$

拉格朗日量是系统状态量, 所以 $L(q', \dot{q}', t) = L[q(q'), \dot{q}(q', \dot{q}'), t]$, 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

$$\begin{aligned} \{a, b\}_{q,p} &= \sum_{jk} \frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_k} \sum_i \left(\frac{\partial q'_j}{\partial q_i} \frac{\partial p'_k}{\partial p_i} - \frac{\partial p'_k}{\partial q_i} \frac{\partial q'_j}{\partial p_i} \right) \\ &\quad - \sum_{jk} \frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \sum_i \left(\frac{\partial q'_k}{\partial q_i} \frac{\partial p'_j}{\partial p_i} - \frac{\partial p'_j}{\partial q_i} \frac{\partial q'_k}{\partial p_i} \right) \\ &= \sum_{jk} \frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_k} \{q'_j, p'_k\}_{q,p} - \sum_{jk} \frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \{q'_k, p'_j\}_{q,p} \end{aligned} \quad (16)$$

代入正则坐标条件，得

$$\begin{aligned}\{a, b\}_{q,p} &= \sum_{jk} \frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_k} \delta_{jk} - \sum_{jk} \frac{\partial b}{\partial q'_k} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \delta_{jk} = \sum_j \left(\frac{\partial a}{\partial q'_j} \frac{\partial b}{\partial p'_j} - \frac{\partial b}{\partial q'_j} \frac{\partial a}{\partial p'_j} \right) \\ &= \{a, b\}_{q',p'}\end{aligned}\quad (17)$$

第四章

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

$$I = \frac{dq}{dt} \quad (1)$$

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 $v dt$ ，通过的电荷为 $\lambda v dt$ ，所以电流为

$$I = \lambda v \quad (2)$$

电荷守恒 电流连续性方程

预备知识 散度定理^[154]

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

$$\frac{d}{dt} \oint \rho dV = \oint \frac{d\rho}{dt} dV \quad (2)$$

且由散度定理^[154]，上式可写为

$$\int \nabla \cdot \mathbf{j} dV + \int \frac{d\rho}{dt} dV = 0 \quad (3)$$

由于该体积分对任何闭合曲面都成立，所以

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (4)$$

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.

电势 电势能

$$\Delta V = - \int \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{l} \quad (1)$$

连续电荷分布产生的电势

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (2)$$

例 1 均匀带电球

令球的半径为 R , 电荷密度为 ρ , 令无穷远处为零势点, 求均匀带电球内外的电势分布.

电势能

若要将点电荷 q 从电场中从点 1 移动到点 2, 外力需要克服电场力对电荷做功

$$W = - \int_1^2 \mathbf{F} \cdot d\mathbf{l} = - \int_1^2 \mathbf{E}q \cdot d\mathbf{l} = qV_2 - qV_1 \quad (3)$$

也就是说, 外力将电荷从电场中的一点移到另一点需要做的功等于末势能减初势能再乘以电荷量. 所以, 我们可以将点电荷的电势能定义为电荷量乘以电势, 这样, 外力做功就等于电势能的增加.

现在来考虑多个点电荷间的电势能 (假设不存在额外的电场). 我们定义将这些点电荷各自从无穷远处移动到指定位置所需要能量等于它们的电势能. 若只有两个电荷 q_1, q_2 相距 r_{12} , 把 q_1 从无穷远移动到指定位置都不需要能量, 因为没有额外的电场. 然而移动 q_2 时, 要考虑 q_1 的电场, 由式 3 可知需要的能量为 $W = q_1q_2/(4\pi\epsilon_0 r_{12})$. 以此类推, 当有 n 个点电荷 q_1, \dots, q_n , 位矢分别为 \mathbf{r}_i 时, 总电势能为

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \quad (4)$$

在求和前面加 $1/2$ 是因为对于每两个点电荷 q_m, q_n ($m \neq n$), 它们之间的电势能 $W_{mn} = q_m q_n / (4\pi\epsilon_0 r_{mn})$ 被计算了两次, 一次是 $i = m, j = n$, 另一次是 $i = n, j = m$.

我们试图将式4化成含有电势的形式

$$W = \frac{1}{2} \sum_i q_i \sum_{j \neq i} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} = \frac{1}{2} \sum_i q_i V_i \quad (5)$$

其中我们定义 V_i 为 q_i 之外所有点电荷产在 \mathbf{r}_i 处产生的电势。现在，我们可以写出连续电荷分布的电势能为

$$W = \frac{1}{2} \int V(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d^3r \quad (6)$$

注意这里的 $V(\mathbf{r})$ 由式2定义²。

导体

预备知识 电场的高斯定理^[421]

导体的电荷分布

带净电荷的导体有一个显著的性质就是净电荷只分布于其表面，且表面的电荷分布使得导体内部电场强度为零。我们可以用高斯定理来证明这个性质。假设导体达到了静电平衡，则其内部的电荷分布稳定且没有任何（宏观上的）的电流。如果导体内部存在任何净电荷，在净电荷周围做一个高斯面，则高斯面上必然会有电场，进而产生电流，这就违背了静电平衡的假设。

由于内部电场强度为零，导体在静电平衡时处处电势相等，是一个等势体。

blablabla...

例1 匀强电场中的球形导体

匀强电场 \mathbf{E}_0 中有一个半径为 R 的导体球处于静电平衡，求导体球表面的电荷分布。

我们取电场的方向为球坐标的极轴，由问题的对称性，电荷分布关于极轴对称，所以电荷面密度可以表示为 $\sigma(\theta)$ 。我们现在需要寻找一个 $\sigma(\theta)$ 使得表面电荷在导体球内部可以产生与外电场 \mathbf{E}_0 等大反向的匀强电场。

²这里的 $V(\mathbf{r})$ 为什么不排除 \mathbf{r} 所在的一小块电荷产生的电势能呢？粗略地说，因为当体积元 d^3r 为无穷小时，其中的电荷存不存在对 $V(\mathbf{r})$ 的改变也是无穷小的。

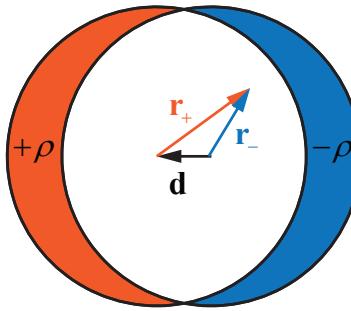


图 1: 两个重叠的均匀带电导体球

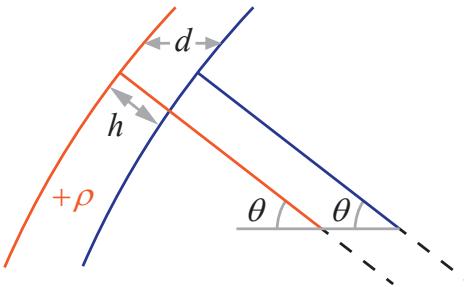
这里介绍一种巧妙的办法，我们先来看以下一个模型。先假设不存在外电场，令两个电荷密度分别为 $\pm \rho$ 的均匀带电球在极轴方向错开距离 d ($d < R$) 两球重合的部分正负电荷叠加，净电荷为零。令 $\pm \rho$ 的球心指向空间中某点的矢量分别为 \mathbf{r}_\pm ，根据例 3^[42] 中的结论，我们知道两球产生的电场分别为

$$\mathbf{E}_\pm = \frac{\rho}{3\epsilon_0} \mathbf{r}_\pm \quad (1)$$

令 $-\rho$ 的球心指向 $+\rho$ 球心的矢量为 \mathbf{d} ，有 $\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_- = -\mathbf{d}$ ，所以两球重合区域中任意一点的总电场为

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_+ + \mathbf{E}_- = \frac{\rho}{3\epsilon_0} (\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) = -\frac{\rho}{3\epsilon_0} \mathbf{d} \quad (2)$$

这是一个匀强电场，恰好符合我们的要求。现在就可以令 $\mathbf{d} \rightarrow 0$ ，然后计算电荷面密度，面密度与厚度 h 成正比。由图 2 可得 $h = d \cos \theta$.

图 2: 两个重叠的均匀带电导体球 θ

所以面密度就是 $\sigma(\theta) = \rho h = \rho d \cos \theta = 3\epsilon_0 E \cos \theta$. 若 \mathbf{E} 要与外电场 \mathbf{E}_0 抵消，令 $E = E_0$ 可得

$$\sigma(\theta) = 3\epsilon_0 E_0 \cos \theta \quad (3)$$

电容

预备知识 电势电势能^[401]

单个导体的电容量

一个导体的电容等于电荷量除以电势

例 1 导体球的电容

若规定无穷远处为零势点，由高斯定理，半径为 R ，带电为 Q 的导体球的电势为 $V = Q/(4\pi\epsilon_0 R)$ ，所以其电容为

$$C = \frac{Q}{V} = 4\pi\epsilon_0 R \quad (1)$$

两导体之间的电容量

若两导体带等量异种电荷³ $\pm Q$ ，电势差为 V ，则两导体间的电容量同样被定义为

$$C = \frac{Q}{V} \quad (2)$$

现在来证明两导体间的电容只与他们的形状，相对位置以及空间中的电介质分布有关，而与电荷量无关。这就要求证明电势差始终与电荷 Q 成正比，如果我们假设置导体表面的电荷面密度 σ 始终与 Q 成正比（证明见，那么由库仑定律可知空间中任意一点的场强也与 Q 成正比。而电势差

$$V = \int_{+}^{-} \mathbf{E}(r) \cdot d\mathbf{l} \quad (3)$$

（式中的“ \pm ”分别代表带电荷量为 $\pm Q$ 的导体表面上的一点，积分路径任意选取）和场强成正比也就是和 Q 成正比。证毕。

例 2 平行板电容器

电容器中最常见也是最基本的模型就是平行板电容器，我们假设空间中存

³这里的 Q 不一定要求大于零， \pm 号只是一个用于区分两个导体的记号而已，不代表电荷的正负。

在均匀的电介质，介电常数为 ϵ 空间中两块面积为 S 的方形导体板相距为 d 平行放置，带电量分别是 $\pm Q$ ，如果忽略边缘效应（即假设只有两板之间的长方体空间中存在匀强电场），由高斯定理，两板之间的电场为 $E = \sigma/\epsilon = Q/(S\epsilon)$ ，电势差为 $V = Ed = Qd/(S\epsilon)$ ，所以电容等于

$$C = \frac{Q}{V} = \epsilon \frac{S}{d} \quad (4)$$

可见在相同介质中，平行板电容器的电容量与板的面积成正比，与距离成反比，比例系数为 ϵ 。这就是为什么 ϵ 也被称为电容率。当不存在电介质时， $\epsilon = \epsilon_0$ ，所以 ϵ_0 被称为真空中的电容率。

例 3 同心球壳电容器

若有两个半径分别为 r 和 R 的同心球壳导体 ($r < R$)，电荷量分别为 $+Q$ 和 $-Q$ ，求两球壳间的电容量。

由高斯定理两球壳间的电场只与小球壳的电荷量有关，所以两球壳的电势差为

$$V = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) \quad (5)$$

所以电容量为

$$C = \frac{Q}{V} = \frac{4\pi\epsilon_0 r R}{R - r} \quad (6)$$

当 $r \rightarrow R$ 时，球壳的面积为 $S = 4\pi R^2$ ，两板间距为 $d = R - r$ ，则上式的电容趋于平行板电容器的电容。

对比式 6 和式 1 可以发现两个足够近的导体获得的电容量要比单个导体大得多，这也是为什么电路中的电容都有两个极。

电压与电流的关系

若电容器两端的电压随时间变化为 $V(t)$ ，那么如何计算流过电容器的电流⁴呢？如果我们定义从 $+Q$ 极流入从 $-Q$ 极流出的电流方向为正方向，那么 $I = dQ/dt$ ，对 $Q = CV$ 两边求时间导数得

$$I = C \frac{dV}{dt} \quad (7)$$

⁴我们在讨论电路的时候习惯性地说电流“流过电容器”，而事实上并没有电荷在电容器内部从一极移动到另一极。

习题 1

试证明在交流电路中，流经电容的电流的相位比电压的相位提前 $\pi/2$.

电容器的能量

为了改变电容器的电荷量 Q ，我们需要将电荷从一个导体移动到另一个导体，为了不影响电荷及电场的分布，从 $Q = 0$ 开始，我们每次只从 $-Q$ 移动极少量的电荷 ΔQ 到 $+Q$ ，移动的过程中外力需要克服电场力做功 $V\Delta Q$ ，而 V 又是 Q 的函数，第 i 次移动前，电荷量为 $\pm Q_i$ ，由定积分^[67]的思想

$$W = \int V(Q) dQ = \int \frac{Q}{C} dQ = \frac{1}{2} \frac{Q^2}{C} = \frac{1}{2} CV^2 \quad (8)$$

可见电容器的能量与电荷量或电势的平方成正比。注意电容器的能量本质上是导体表面上连续电荷分布的电势能，所以另一种计算上式的方法就是直接使用式 6^[401] 得

$$W = \frac{1}{2}[QV_+ + (-Q)V_-] = \frac{1}{2}QV = \frac{1}{2} \frac{Q^2}{C} = \frac{1}{2} CV^2 \quad (9)$$

电场的能量

首先我们来回顾一下平行板电容器（例 2）的能量

$$W = \frac{1}{2} CV^2 = \frac{1}{2} \epsilon \frac{S}{d} (Ed)^2 = \frac{1}{2} \epsilon \tau E^2 \quad (1)$$

其中 $\tau = Sd$ 为平行板间长方体的体积。这条公式容易让我们联想到电势能储存在电场之中。在电动力学中，这种理解是正确的，我们不妨把电场含有的能量称为电场能。通过上式，我们假设空间中任意一点的电场能密度为 $\epsilon E^2/2$ ，则总电场能等于

$$W = \frac{1}{2} \epsilon \int \mathbf{E}(\mathbf{r})^2 d^3r \quad (2)$$

可以证明该式定义的电场能与式 6^[401] 定义的电势能是完全等效的。

证明

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^[75]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 (库仑定律) 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^[99]). 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 $I d\mathbf{l}$ 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 $I dl_i$, 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

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_i \frac{I dl_i \times \mathbf{R}_i}{R_i^2} \quad (3)$$

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, $dl_i = \mathbf{r}'_{i+1} - \mathbf{r}'_i = d\mathbf{r}'$, 矢量积分写为

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I d\mathbf{r}' \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \quad (4)$$

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

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I \, d\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (5)$$

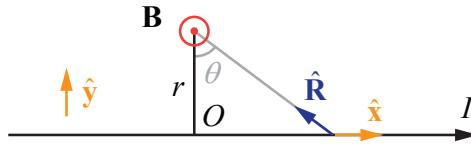


图 1: 无限长直导线的电场

例 1 无限长直导线的电场

如图 1, 令导线与 x 轴重合, 并使原点到场点的距离最近, 有 $x = r \tan \theta$, 微分得 $|d\mathbf{r}'| = dx = r \sec^2 \theta \, d\theta$, 另有 $\hat{x} \times \hat{\mathbf{R}} = \hat{z} \sin(\theta + \pi/2) = \hat{z} \cos \theta$, $R = r / \cos \theta$. 代入式 4 得

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \hat{z} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{(r \sec^2 \theta \, d\theta) \cos \theta}{r^2 / \cos \theta^2} = \frac{\mu_0 I}{4\pi r} \hat{z} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \theta \, d\theta = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} \hat{z} \quad (6)$$

可见磁场大小与距离 r 成反比, 总是垂直于导线, 且方向符合右手定则.

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

$$\begin{aligned} d\mathbf{r}' \times \mathbf{R} &= \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ dx' & dy' & dz' \\ x - x' & y - y' & z - z' \end{vmatrix} \\ &= \hat{x}[(z - z') \, dy' - (y - y') \, dz'] + \hat{y}[...] + \hat{z}[...] \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}) &= \frac{\mu_0}{4\pi} \oint \frac{I \, d\mathbf{r}' \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint \frac{d\mathbf{r}' \times \mathbf{R}}{R^3} \\ &= \hat{x} \frac{\mu_0 I}{4\pi} \left[\oint \frac{1}{R^3} (z - z') \, dy' - \oint \frac{1}{R^3} (y - y') \, dz' \right] + \hat{y}[...] + \hat{z}[...] \end{aligned} \quad (8)$$

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

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times \hat{\mathbf{R}}}{R^2} \, dV' \quad (9)$$

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

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \, dV' \quad (10)$$

积分时 \mathbf{r} 视为常数。

安培环路定理

在空间中选取一环路（称为安培环路）并定义一个正方向，那么磁感应强度在该环路上的线积分等于穿过环路的总电流（电流的正方向由右手定则^[98]判断）乘以真空中的磁导率。

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{l} = \mu_0 I \quad (1)$$

例 1 无限长直导线的磁场

若导线的电流为 I ，在其周围作一个半径为 r 的安培环路，由对称性，环路上任意一点的磁感应强度大小相同且沿正方向。所以式 1 等于

$$2\pi r B = \mu_0 I \quad (2)$$

所以磁感应强度大小的分布为

$$B(r) = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} \quad (3)$$

这与使用比奥萨伐尔定律（例 1^[407]）得出的结论一致。

洛伦兹力

预备知识 矢量的叉乘^[99]

磁场 \mathbf{B} 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^[99] 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^[32]

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）

$$\varepsilon = -\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{s} = -\frac{d}{dt} \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{s} = -\frac{d}{dt} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad (2)$$

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

$$I \frac{d\mathbf{B}}{dt} = \mathbf{b}I \frac{dI}{dt} = \frac{\mathbf{b}}{2} \frac{dI^2}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} I^2 \mathbf{B} \right) \quad (4)$$

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

$$\boldsymbol{\mu} = Ia\hat{\boldsymbol{\omega}} = \int \frac{dQ}{2\pi/\omega} \pi r^2 \hat{\boldsymbol{\omega}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} \int r^2 \rho_e dV \quad (2)$$

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⁵，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⁶，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， $I = \lambda v$ ，相反时有 $L\mathbf{v} = -v\mathbf{L}$ ，定义电流为负， $I = -\lambda v$ 。所以

$$q\mathbf{v} = \lambda L\mathbf{v} = \pm \lambda v \mathbf{L} = I\mathbf{L} \quad (5)$$

代入式 4 得

$$\mathbf{F} = I\mathbf{L} \times \mathbf{B} \quad (6)$$

⁵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。

⁶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。

磁场中闭合电流的合力

预备知识 安培力^[414], 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

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \oint_L I d\mathbf{l} \times \mathbf{B} = \hat{\mathbf{x}} I \oint_L d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} I \oint_L d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}} I \oint_L d\mathbf{l} \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{z}} \\ &= \hat{\mathbf{x}} I \oint_L (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) \cdot d\mathbf{l} + \hat{\mathbf{y}} I \oint_L (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{y}}) \cdot d\mathbf{l} + \hat{\mathbf{z}} I \oint_L (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot d\mathbf{l} \\ &= \hat{\mathbf{x}} I \int_{\Sigma} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{y}} I \int_{\Sigma} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{y}}) \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{z}} I \int_{\Sigma} \nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot d\mathbf{s}\end{aligned}\quad (1)$$

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

$$\nabla \times (\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{B}(\nabla \cdot \hat{\mathbf{x}}) + (\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{B} - \hat{\mathbf{x}}(\nabla \cdot \mathbf{B}) - (\mathbf{B} \cdot \nabla)\hat{\mathbf{x}} = (\hat{\mathbf{x}} \cdot \nabla)\mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x} \quad (2)$$

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

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{x}} I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x} \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{y}} I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial y} \cdot d\mathbf{s} + \hat{\mathbf{z}} I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial z} \cdot d\mathbf{s} \quad (3)$$

写成分量的形式, 就是

$$F_x = I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x} \cdot d\mathbf{s} \quad F_y = I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial y} \cdot d\mathbf{s} \quad F_z = I \int_{\Sigma} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial z} \cdot d\mathbf{s} \quad (4)$$

磁场中闭合电流的力矩

预备知识 安培力^[414], 力矩^[215]

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

$$d\mathbf{M} = \mathbf{r} \times d\mathbf{F} = \mathbf{r} \times (I d\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \quad (1)$$

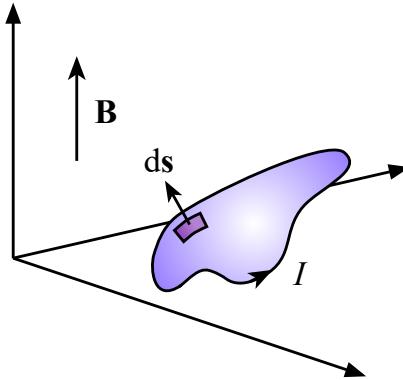


图 1: 闭合电流在磁场中所受的力矩

对连续叉乘进行化简^[103] 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

$$\oint \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} = \oint r \hat{\mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r} = \oint r d\mathbf{r} = \frac{r^2}{2} \Big|_{r_0}^{r_0} = 0 \quad (4)$$

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

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_j = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} T_{ji} \quad (2)$$

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

$$\mathbf{f} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} = \mathbf{0} \quad (3)$$

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.

$$\rho = \epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} \quad \left(\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \right) \quad (5)$$

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}) \quad (6)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \times \mathbf{B} &= \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) - \mathbf{E} \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) - (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E} \quad \left(\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

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 $(\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E} = (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{E} - \nabla(\mathbf{E}^2)/2$ 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

$$\begin{aligned}\mathbf{f} = & \epsilon_0 [(\nabla \times \mathbf{E})\mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{E}^2)] \\ & + \frac{1}{\mu_0} [(\nabla \cdot \mathbf{B})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{B} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{B}^2)] - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t}\end{aligned}\quad (15)$$

与式 3 对比, 可以看出动量流密度张量的散度为

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{T} = & -\epsilon_0 [(\nabla \cdot \mathbf{E})\mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{E}^2)] \\ & - \frac{1}{\mu_0} [(\nabla \cdot \mathbf{B})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{B} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{B}^2)]\end{aligned}\quad (16)$$

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好张量分析). 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

$$\mathbf{A}_j = \begin{cases} A_x & (j=1) \\ A_y & (j=2) \\ A_z & (j=3) \end{cases} \quad x_j = \begin{cases} x & (j=1) \\ y & (j=2) \\ z & (j=3) \end{cases} \quad (17)$$

$(\nabla \cdot \mathbf{E})\mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{E}^2)$ 是一个矢量, 它的第 j 个分量为

$$\begin{aligned}& [(\nabla \cdot \mathbf{E})\mathbf{E} + (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{E}^2)]_j \\ &= \sum_i \frac{\partial E_i}{\partial x_i} E_j + \sum_i E_i \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial x_i} \delta_{ij} \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial E_i}{\partial x_i} E_j + E_i \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} (E_i E_j) - \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{E}^2}{\partial x_i} \delta_{ij} \right) \\ &= \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(E_i E_j - \frac{1}{2} \mathbf{E}^2 \delta_{ij} \right)\end{aligned}\quad (18)$$

同理

$$\left[(\nabla \cdot \mathbf{B})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{B} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{B}^2) \right]_j = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(B_i B_j - \frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \delta_{ij} \right) \quad (19)$$

所以

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_j = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\epsilon_0 \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^2 \delta_{ij} - E_i E_j \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(\frac{1}{2} \mathbf{B}^2 \delta_{ij} - B_i B_j \right) \right] \quad (20)$$

而由张量散度的定义

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_j = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} T_{ij} \quad (21)$$

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 $\nabla \cdot \mathbf{T}' = \mathbf{0}$ 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

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。

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho dV \quad (1)$$

微分形式

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。

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2)$$

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

$$\frac{dV}{dt} = \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{s} \quad (3)$$

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 $1/\epsilon_0$ 。从数学上来讲，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。

例 1 点电荷和球壳的电场

令点电荷的电荷量为 Q ，以点电荷为圆心选取半径为 r 的球形高斯面。由系统的对称性可知，高斯面上的电场大小必处处相等。所以高斯面的电场通量（式 5 左边）等于

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = E \cdot 4\pi r^2 \quad (6)$$

式 5 的右边等于 Q/ϵ_0 ，无需积分。两边除以 $4\pi r^2$ 得高斯面上电场的大小为

$$E = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (7)$$

与库仑定律的结论一致.

再来看均匀带电球壳产生的电场，若在其外部作球形的高斯面，得到的结论与点电荷一致，但若在球内部作球形高斯面，由于高斯面内没有电荷，根据对称性可知球壳内部电场为零.

例 2 带电平面和平行板电容器的电场

空间中有一块无限大的厚度不计的均匀带电平面，面电荷密度为 σ ，求空间中的电场.

如图，我们令平面位于取一个柱形的高斯面，上下底面离平面的距离都为 z . (未完成)

例 3 均匀带电球的电场

令球的半径为 R ，电荷密度为 ρ ，令无穷远处为零势点，求均匀带电球内外的电场分布.

带点球的总电荷量为 $Q = 4\pi R^3 \rho / 3$ ，用与例 1 类似的方法可知球外电场与点电荷的电场相同. 再来看球内的电场，以半径为 r ($r < R$) 作高斯面，高斯面内的电荷为 $q = 4\pi r^3 \rho / 3$ ，高斯面上的电场为

$$\mathbf{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{\mathbf{r}} = \frac{\rho}{3\epsilon_0} \mathbf{r} \quad (8)$$

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

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0 \quad (9)$$

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

$$d\Phi = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = \frac{kQ}{r^2} d\mathbf{s} \cdot \cos \theta \quad (10)$$

下面证明保持以 $d\mathbf{s}$ 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 $d\mathbf{s}$ 和 $d\mathbf{s}'$ 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 $d\mathbf{s}$ 垂直于 \mathbf{r} . 它们的电通量分别为

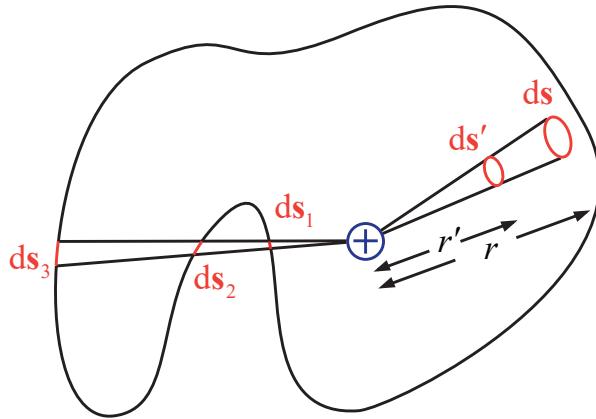


图 1: 图 1



图 2: 图 2

$$d\Phi_a = E \cdot d\mathbf{s}_a \cdot \cos \theta \quad (11)$$

$$d\Phi_b = E \cdot d\mathbf{s}_b \quad (12)$$

然而显然有 $d\mathbf{s}_b = d\mathbf{s}_a \cdot \cos \theta$ (注意圆锥非常细长的时候, 母线近似都平行), 所以有

$$d\Phi_a = d\Phi_b \quad (13)$$

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 $d\mathbf{s}_1$ 与 $d\mathbf{s}_2$) 它们的电通量分别为

$$d\Phi_1 = \frac{kQ}{r_1^2} d\mathbf{s}_1 \quad (14)$$

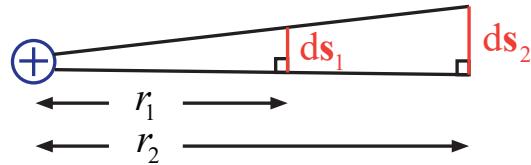


图 3: 图 3

$$d\Phi_2 = \frac{kQ}{r_2^2} ds_2 \quad (15)$$

然而根据几何关系，有

$$\frac{ds_1}{r_1^2} = \frac{ds_2}{r_2^2} \quad (16)$$

所以仍然有.

$$d\Phi_1 = d\Phi_2 \quad (17)$$

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

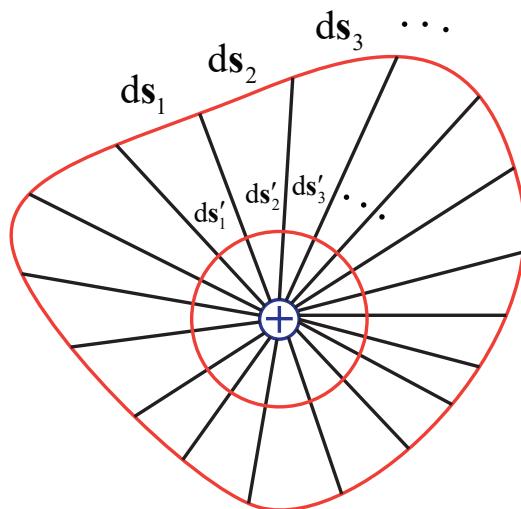


图 4: 图 4

$$\Phi = \frac{kQ}{R^2} \cdot 4\pi R^2 = 4\pi kQ \quad (18)$$

令真空中的介电常数 $\epsilon_0 = 1/(4\pi k)$, 就得到高斯定理

$$\Phi = Q/\epsilon_0 = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho dV \quad (19)$$

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 ds_1 , ds_2 , ds_3), 高斯定理仍然成立. 这是因为 ds_1 和 ds_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 ds_3 才对总电通量有贡献, 这和不重叠的情况一样.

最后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

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} &= \left(\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) \cdot \mathbf{E} \\ &= \frac{1}{\mu_0} (\nabla \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{E} - \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \mathbf{E} \end{aligned} \quad (8)$$

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 $\nabla \cdot \mathbf{s}$.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{s} &= -\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial \rho_E}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \mathbf{B})\mathbf{E} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{B}^2}{\mu_0} \right) \\ &= -\frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \mathbf{B})\mathbf{E} - \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \mathbf{B}\end{aligned}\quad (10)$$

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

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{s} &= -\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\partial \rho_E}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \mathbf{B})\mathbf{E} + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{B}^2}{\mu_0} \right) \\ &= -\frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{B} - \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \mathbf{B} + \frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})\end{aligned}\quad (11)$$

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.

麦克斯韦方程组（介质）

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_f \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} &= J_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\end{aligned}\tag{1}$$

其中电位移矢量 $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$, 磁场强度 $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}$.

在各向同性线性介质中, 有 $\mathbf{P} = \chi_E \epsilon_0 \mathbf{E}$, $\mathbf{M} = \chi_B \mathbf{H}$. 代入上式得 $\mathbf{D} = (1 + \chi_E) \epsilon_0 \mathbf{E}$ 和 $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{(1 + \chi_B) \mu_0}$.

定义相对介电常数为 $\epsilon_r = 1 + \chi_E$, 相对磁导率为 $\mu_r = 1 + \chi_B$, 则 $\mathbf{D} = \epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E}$, $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_r \mu_0}$,

非齐次亥姆霍兹方程 推迟势

波动方程为

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = f(\mathbf{r}, t)\tag{1}$$

用格林函数法求解, 令格林函数满足

$$\nabla^2 G - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 G}{\partial t^2} = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')\tag{2}$$

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.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \iint f(\mathbf{r}', t') G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') dV' dt'\tag{3}$$

下文用傅里叶变换法解式 2 解出格林函数为

$$G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \frac{1}{4\pi} \frac{\delta[(t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) - t']}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\tag{4}$$

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: $\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{dG}{dr}) = \frac{1}{r} \frac{d^2(rG)}{dr^2}$)

$$\frac{1}{R} [C_1(\omega) e^{i\omega R/c} + C_2(\omega) e^{-i\omega R/c}] e^{i\omega t} \quad (8)$$

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 δ 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 $\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} (R^2 \frac{dA}{dR}) = \frac{1}{R} \frac{d^2}{dR^2} d(RA)$)

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， $R \rightarrow 0$ ， $A \rightarrow (C_1 + C_2)/R$ 。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 $\omega^2 A(R, \omega)/c^2 \sim 1/R$ 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

$$\begin{aligned}
 G(R, t, t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} A(R, \omega) e^{-i\omega t} d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{4\pi R} e^{i\omega t'} e^{i\omega R/c} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i\omega t} d\omega \\
 &= \frac{1}{4\pi R} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(t'+R/c-t)} d\omega = \frac{1}{4\pi R} \delta(t - R/c - t') \\
 &= \frac{1}{4\pi} \frac{\delta[(t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) - t']}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}
 \end{aligned} \tag{17}$$

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）^[430]

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

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{H}) = -\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} \tag{1}$$

把电位移矢量的定义 $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ 代入上式, 化简为

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}) = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{H}) = -\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{D} \tag{2}$$

真空中的平面电磁波

结论

电场与磁感应强度的关系为

$$B_0 = E_0/c \tag{1}$$

平均能流密度（光强）为

$$I = \frac{1}{2} c \epsilon_0 E_0^2 \tag{2}$$

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 $\tilde{k} = k + \kappa$

$$E_x(z, t) = \tilde{E}_{0x} e^{i(\tilde{k}z - \omega t)} = \tilde{E}_{0x} e^{-\kappa z} e^{i(kz - \omega t)} \quad (6)$$

$$\tilde{k} = \omega \sqrt{\mu_0 \tilde{\epsilon}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 + \chi^{(1)}} \quad (7)$$

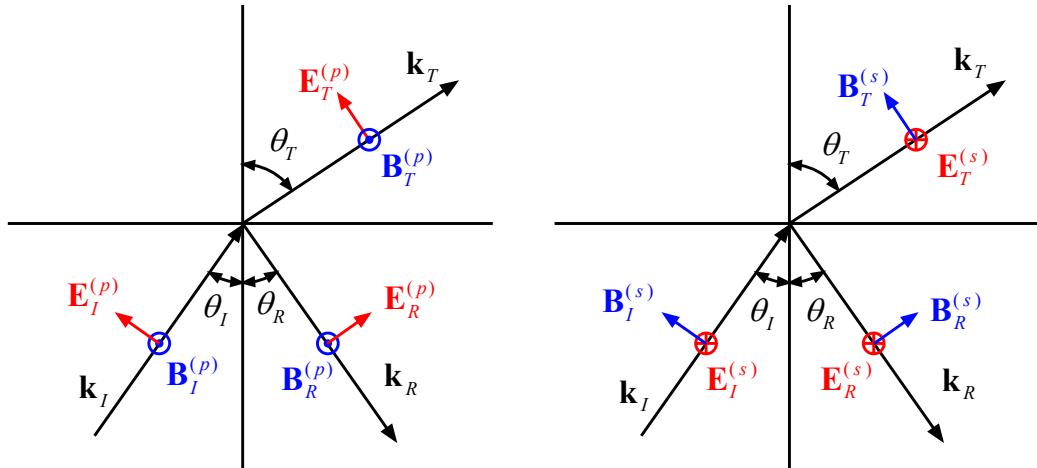
通解仍然为所有可能的单频单向波的线性组合。实折射率和吸收系数定义为

$$n = \frac{ck}{\omega} = \operatorname{Re} \left[\sqrt{1 + \chi^{(1)}} \right] \approx 1 + \frac{1}{2} \operatorname{Re} [\chi^{(1)}] \quad (8)$$

$$\alpha = 2\kappa = \frac{2\omega}{c} \operatorname{Im} \left[\sqrt{1 + \chi^{(1)}} \right] \approx \frac{\omega}{c} \operatorname{Im} [\chi^{(1)}] \quad (9)$$

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_0 (n + i\alpha c / 2\omega)^2 \quad (10)$$

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。



$$\frac{E_R^{(p)}}{E_I^{(p)}} = \frac{B_R^{(p)}}{B_I^{(p)}} = \frac{m_2 \cos \theta_i - m_1 \cos \theta_T}{m_2 \cos \theta_i + m_1 \cos \theta_T}$$

$$\frac{E_T^{(p)}}{E_I^{(p)}} = \frac{B_T^{(p)}}{B_I^{(p)}} = \frac{2m_1 \cos \theta_I}{m_2 \cos \theta_i + m_1 \cos \theta_T}$$

$$\frac{E_R^{(s)}}{E_I^{(s)}} = \frac{B_R^{(s)}}{B_I^{(s)}} = \frac{m_1 \cos \theta_i - m_2 \cos \theta_T}{m_1 \cos \theta_i + m_2 \cos \theta_T}$$

$$\frac{E_T^{(s)}}{E_I^{(s)}} = \frac{B_T^{(s)}}{B_I^{(s)}} = \frac{2m_1 \cos \theta_I}{m_1 \cos \theta_i + m_2 \cos \theta_T}$$

图 1: 菲涅尔公式

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 $\epsilon \mathbf{E}_\perp = \epsilon' \mathbf{E}'_\perp$ 和 $\epsilon \mathbf{B}_\perp = \epsilon' \mathbf{B}'_\perp$.
- $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ 和 $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ 分别对应 $\mathbf{E}_{//} = \mathbf{E}'_{//}$ 和 $\mathbf{B}_{//}/\mu = \mathbf{B}'_{//}/\mu'$.

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 ($0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b, 0 \leq z \leq c$), 电场的波动方程为

$$\nabla^2 \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (1)$$

矢量相等的充要条件是三个分量分别相等

$$\nabla^2 E_x = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} \quad \nabla^2 E_y = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} \quad \nabla^2 E_z = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_z}{\partial t^2} \quad (2)$$

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

$$\frac{d^2 X}{dx^2} \Big/ X + \frac{d^2 Y}{dy^2} \Big/ Y + \frac{d^2 Z}{dz^2} \Big/ Z = \frac{1}{c^2} \frac{d^2 T}{dt^2} \Big/ T \quad (3)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X}{dx^2} \Big/ X &= -k_x^2 & \frac{d^2 Y}{dy^2} \Big/ Y &= -k_y^2 \\ \frac{d^2 Z}{dz^2} \Big/ Z &= -k_z^2 & \frac{1}{c^2} \frac{d^2 T}{dt^2} \Big/ T &= -\omega^2 \end{aligned} \quad (4)$$

(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

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \omega^2 \quad (5)$$

上面三式的通解是

$$\begin{cases} X = C_1 \cos(k_x x) + C_2 \sin(k_x x) \\ Y = C_3 \cos(k_y y) + C_4 \sin(k_y y) \\ Z = C_5 \cos(k_z z) + C_6 \sin(k_z z) \end{cases} \quad (6)$$

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

$$E_{//} = 0 \quad \frac{\partial E_{\perp}}{\partial n} = 0 \quad (7)$$

$\partial E_x / \partial x = 0$ ($x \rightarrow a$ 时); $E_x = 0$ ($y \rightarrow b$ 或 $z \rightarrow c$ 时). 把上面的通解带入条件, 得

$$X = C_1 \cos\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \quad Y = C_4 \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \quad Z = C_6 \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \quad (8)$$

三个变量相乘, 令 $C_1 C_4 C_6 = E_{x0}$, 得

$$E_x = E_{x0} \cos\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \quad (9)$$

同理对 E_y , E_z 分析, 得到电场的三个分量在盒内的分布

$$\begin{cases} E_x = E_{x0} \cos\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \\ E_y = E_{y0} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \cos\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \\ E_z = E_{z0} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{b} y\right) \cos\left(\frac{n_z \pi}{c} z\right) \end{cases} \quad (10)$$

$$T = C \cos(\omega t) \quad (11)$$

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

$$U = q(\Phi - \mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) \quad (4)$$

其中 Φ 和 \mathbf{A} 分别为点电荷所在位置的电磁标势和矢势, \mathbf{v} 为点电荷的速度.

直角坐标中的证明

以下用直角坐标证明 (令 $x_1, x_2, x_3 = x, y, z$)

$$F_i = Q_i = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial U}{\partial x_i} \quad (5)$$

以 x 分量为例

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}} = -q \frac{d}{dt} A_x = -q \left[(\nabla A_x) \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial A_x}{\partial t} \right] \quad (6)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = q \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \cdot \mathbf{v} \right) \quad (7)$$

代入式 5 右边得

$$q \left[-\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + v_y \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - v_z \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right] \quad (8)$$

根据广义洛伦兹力及电磁势的定义

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad \mathbf{E} = -\nabla \Phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} F_x &= q(E_x + v_y B_z - v_z B_y) \\ &= q \left[-\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + v_y \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - v_z \left(\frac{\partial A_z}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial z} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

对比可得式 5 在 x 方向成立, y, z 分量的证明类似. 另外容易证明多个点电荷组成的系统的非常规势等于每个点电荷的非常规势之和.

广义坐标的证明

下面来证明对于任意广义坐标 $\{q_i\}$, 式 4 都满足式 2. 首先令变换关系为

$$x_i = x_i(q_1, q_2, \dots, t) \quad (11)$$

其中 x_i 包括每个质点的 x, y, z 坐标, 则

$$\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_j} \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \quad (12)$$

注意第二步用到了式 28^[385]. 对时间求全导数得

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} + \sum_j \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_j} \frac{d}{dt} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \quad (13)$$

另外有

$$\frac{\partial U}{\partial q_i} = \sum_j \frac{\partial U}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} + \sum_j \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_j} \frac{\partial \dot{x}_j}{\partial q_i} \quad (14)$$

易证式 13 和式 14 的右边第二项相等. 将以上两式代入式 2 右边得 (第二步利用了式 5)

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial U}{\partial x_i} = \sum_j \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} - \sum_j \frac{\partial U}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial q_i} = \sum_j F_j \frac{\partial x_j}{\partial q_i} \quad (15)$$

而这恰好是 Q_i 的定义. 证毕.

哈密顿量

首先求广义动量

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A} \quad (16)$$

则哈密顿量为

$$H = \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - L = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\Phi \quad (17)$$

第五章

量子力学

原子单位

预备知识 无量纲的物理公式^[244], 玻尔原子模型^[446]

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. 事实上所谓的原子单位并不是一套量纲, 而是将量子力学公式变为无量纲公式过程中定义的一系列 β 常数.

有时候为了强调我们使用原子单位, 我们会在数值后面加上“a.u.”, “a.u.” 可等效为数值 1, 就像弧度单位“Rad”一样¹.

无量纲的薛定谔方程

国际单位下的一维含时薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (1)$$

与“无量纲的物理公式^[244]”中的方法类似, 我们需要给公式中出现的每个量纲定义一个常数, 分别记为 β_x , β_m , β_t , β_E , β_Ψ , 且令 $x = x_a \beta_x$, $m = m_a \beta_m$, $t = t_a \beta_t$, $V = V_a \beta_E$, $\Psi = \Psi_a \beta_\Psi$. 代入式 1, 各项同除 $\beta_E \beta_\Psi$, 得²

$$-\left(\frac{\hbar^2}{\beta_m \beta_x^2 \beta_E}\right)\frac{1}{2m_a}\frac{\partial^2\Psi_a}{\partial x_a^2}+V_a\Psi_a=\mathrm{i}\left(\frac{\hbar}{\beta_E \beta_t}\right)\frac{\partial\Psi_a}{\partial t_a} \quad (2)$$

为了让公式尽可能简洁, 我们令两个括号都为 1, 得

$$\beta_E = \frac{\hbar^2}{\beta_m \beta_x^2} \quad \beta_t = \frac{\beta_m \beta_x^2}{\hbar} \quad (3)$$

于是无量纲的薛定谔方程为

$$-\frac{1}{2m_a}\frac{\partial^2\Psi_a}{\partial x_a^2}+V_a\Psi_a=\mathrm{i}\frac{\partial\Psi_a}{\partial t_a} \quad (4)$$

我们再看波函数的归一化公式

$$1 = \int |\Psi|^2 dx = \beta_\Psi^2 \beta_x \int |\Psi_a|^2 dx_a \quad (5)$$

¹例如在圆的面积公式中, $S = \pi R^2$, 其中 π 可以看作具有量纲“Rad”, 但面积的量纲却只是“ m^2 ”而无需记为“Rad $\times \text{m}^2$ ”.

²根据偏微分的定义, 常数可以移到偏微分算符外, 如 $\partial^2/\partial(\beta_x x_a)^2 = (1/\beta_x^2) \partial^2/\partial x_a^2$

为了使归一化公式的形式不变，必须令

$$\beta_{\Psi} = \beta_x^{-1/2} \quad (6)$$

同理，对 N 维波函数有 $\beta_{\Psi} = \beta_x^{-N/2}$. 由式 6 和式 3 可知我们只剩下两个自由度，也就是说只要确定 β_x 和 β_m ，剩下的 β 也就确定了.

由 β_E 和 β_t 的关系可得原子单位下光子能量等于角频率

$$E_a = \omega_a \quad (7)$$

原子单位

事实上，原子单位也不同的定义，但都能得到式 4 形式的薛定谔方程. 最常见的情况是定义 β_m 等于电子的质量， β_x 等于玻尔半径，再由式 3 和式 6 确定 $\beta_E, \beta_t, \beta_{\Psi}$ ，如表 1 所示³. 注意许多常数都与氢原子的玻尔模型^[446]（原子核不动）的基态（表中简称基态）有关.

表中还定义了一些其他的物理量的转换常数，它们的定义可以使以下无量纲公式成立（以后我们在不至于混淆的情况下省略无量纲物理量的角标 a ）

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \quad (8)$$

$$x = vt \quad (9)$$

$$\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (\text{角动量}) \quad (10)$$

$$\mathcal{E} = \frac{q}{r^2} \quad (\text{点电荷电场}) \quad (11)$$

$$U = \frac{q}{r} = \mathcal{E}x \quad (\text{点电荷电势}) \quad (12)$$

$$V = qU = q\mathcal{E}x \quad (\text{匀强电场电势能}) \quad (13)$$

薛定谔方程为

$$-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (14)$$

注意当考察对象为电子时，式中 $m = 1$ ，可省略.

例 1 匀强电场中电子的薛定谔方程

令式 14 中 $m = 1$, $q = 1$, 再将式 13 代入，得

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \mathcal{E}x\Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (15)$$

³为了区别能量与电场，以下用 E 表示能量，用 \mathcal{E} 表示电场.

表 1: 原子单位转换常数表

物理量	β	描述	数值 (国际单位)
质量 m	m_e	电子质量	$9.10938215 \times 10^{-31}$
长度 x	$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$	玻尔半径	$5.2917721067 \times 10^{-11}$
时间 t	$m_e a_0^2 / \hbar$	长度除以速度	$2.418884326 \times 10^{-17}$
角频率 ω	$\frac{\hbar}{m_e a_0^2}$	基态运动频率	$6.579683921 \times 10^{15}$
能量 E	$\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$	基态电子势能大小	$4.3597446499 \times 10^{-18}$
速度 v	$\frac{\hbar}{m_e a_0}$	基态电子速度	$4.3597446499 \times 10^{-18}$
角动量 L	$m_e v_0 a_0 = \hbar$	长度乘以动量	$1.054571800 \times 10^{-34}$
电荷 q	e 或 q_e	电子电荷	$1.6021766208 \times 10^{-19}$
电场强度 \mathcal{E}	$\frac{e}{(4\pi\epsilon_0) a_0^2}$	基态轨道电场强度	$5.1422067070 \times 10^{11}$
电势 V	$\frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0}$	基态轨道电势	27.211386019

习题 1 氢原子的基态能量

计算玻尔模型中氢原子基态的能量 (答案: $-1/2$).

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. 同样令 β_m 等于电子质量, β_q 等于元电荷, 由式 3 得

$$\beta_x = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega}} \quad \beta_t = \frac{1}{\omega} \quad (16)$$

为了使式 13 成立, 得

$$\beta_{\mathcal{E}} = \frac{\hbar\omega}{e\beta_x} \quad (17)$$

一种常见的情况是平面波电场用国际单位表示为 $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t)$, 而原子单位下该式为

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos t \quad (18)$$

注意右边不含 ω , 形式更简洁.

另一个常见的例子是简谐振子^[466], 在原子单位下, 其薛定谔方程为

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} x^2 \Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (19)$$

能级为

$$E_n = \frac{1}{2} + n \quad (n = 0, 1, 2 \dots) \quad (20)$$

归一化的基态波函数为

$$\psi_0(x) = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2} \quad (21)$$

例 2 转换为含量纲的公式

现在我们按照“无量纲的物理公式^[244]”中介绍的方法将式 19 转换为含量纲的公式. 即先把所有无量纲的物理量替换成有量纲的物理量除以对应的 β 常数, 得 (两边已同乘 β_Ψ)

$$-\beta_x^2 \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{\beta_x^2} \frac{1}{2} x^2 \Psi = \beta_t i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (22)$$

将式 16 代入, 两边乘以 $\omega \hbar$ 得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (23)$$

类似地, 也可以将式 20 变为

$$E = \left(\frac{1}{2} + n \right) \beta_E = \left(\frac{1}{2} + n \right) \omega \hbar \quad (n = 0, 1, 2 \dots) \quad (24)$$

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.

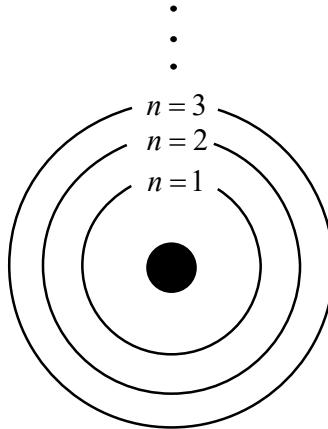


图 1: 电子轨道

	$l = 0$	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

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 $(2l + 1) \times 2$ 。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 $(2l + 1) \times 2$ 。

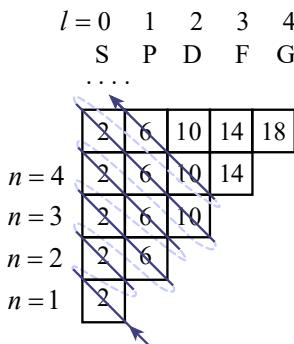


图 3: 轨道的填充顺序

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。

玻尔原子模型

预备知识 圆周运动，向心力

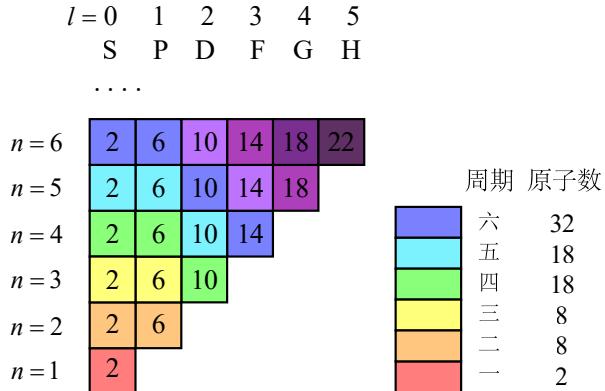


图 4: 划分周期

结论

能级公式

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2} \quad (1)$$

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. 库仑定律与牛顿定律（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

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2} \quad (13)$$

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约为 -13.6 eV . 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

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -13.6 \text{ eV} \frac{Z^2}{n^2} \quad (1)$$

当考虑原子核运动的时候 (但仍然忽略万有引力), 上式变为

$$E_n = -\frac{\mu Z^2e^4}{8\epsilon_0^2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (2)$$

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!)

$$m_1 v_1 r_1 + m_2 v_2 r_2 = n\hbar \quad (4)$$

3. 质心系条件

$$m_1 r_1 = m_2 r_2 \quad m_1 v_1 = m_2 v_2 \quad (5)$$

要求的能量为

$$E_n = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_1 + r_2} \quad (6)$$

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 $m_1 r_1 / m_2$ 和 $m_1 v_1 / m_2$ 。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

$$\frac{d}{dt} P_{ab}(t) = J(a, t) - J(b, t) \quad (2)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{k'}^*(x)\psi_k(x) dx = \delta(k - k') \quad (2)$$

满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x)\psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} c(k')\psi_{k'}(x) dk' \right) dx = c(k) \quad (3)$$

另外注意 $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, $E' = \hbar^2 / (2mk'^2)$.

$$\delta \left[\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k'^2) \right] \quad (4)$$

根据 δ 函数的性质, 若 x_0 是 $f(x)$ 的一个零点

$$\delta[f(x)] = \frac{1}{f'(x)} \delta(x - x_0) \quad (5)$$

所以

$$\begin{aligned} \delta(E - E') &= \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k'^2) \right] = \frac{m}{\hbar^2 k} \delta(k - k') \\ &= \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x)\psi_k(x) dx \end{aligned} \quad (6)$$

可得

$$\psi_E(x) = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} \psi_k(x) \quad (7)$$

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

$$\psi(\mathbf{r}) = A e^{-r/a} \quad (1)$$

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

$$1 = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \int_0^{+\infty} (A^2 e^{-2r/a})(4\pi r^2 dr) = A^2 \pi a^3 \quad (2)$$

所以 $A = 1/\sqrt{\pi a^3}$ ，

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (3)$$

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

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \mathbf{0} \quad (4)$$

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.

$$\langle r \rangle = \int r |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \int r (A^2 e^{-2r/a}) (4\pi r^2 dr) = \frac{3}{8} a^4 A = \frac{3}{2} a \quad (5)$$

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 $\mathbf{r} = \mathbf{0}$.

电子与原子核最有可能的距离

若定义径向概率密度为

$$f(r) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{\int_r^{\Delta r} |\psi(\mathbf{r})|^2 (4\pi r^2 dr)}{\Delta r} = 4\pi r^2 |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (6)$$

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有可能的距离.

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 → 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 → 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.

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.

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 $|\phi\rangle = (x_1, x_2, \dots, x_{n_i})^T$. 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

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{Q}\psi = \hat{Q}(c_1\psi_1 + \dots + c_n\psi_n) \\ \quad = c_1\hat{Q}\psi_1 + \dots + c_n\hat{Q}\psi_n \\ \quad = \lambda_1 c_1\psi_1 + \dots + \lambda_n c_n\psi_n \end{array} \right. \quad (2)$$

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 $(\lambda_1 c_1, \dots, \lambda_n c_n)^T$. 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

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 c_1 \\ \vdots \\ \lambda_n c_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

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 ， $|f\rangle_\psi = (c_1 \dots c_n)^T$ ， $|f\rangle_\phi = (d_1 \dots d_n)^T$ 。虽然它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。下面讨论它们之间的变换关系。

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 $(d_1 \dots d_n)^T = \mathbf{P}(c_1 \dots c_n)^T$ ，即 $|f\rangle_\phi = P|f\rangle_\psi$.

其中 P 矩阵的矩阵元 $P_{ij} = \int \phi_i^* \psi_j dx$. \mathbf{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 $Q = \text{diag}(\lambda_1 \dots \lambda_n)$.

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 \mathbf{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 \mathbf{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， $\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^{-1}$

证明：要证明 $\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^{-1}$ ，只需证明 $\mathbf{P}^*\mathbf{P}$ 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 $\mathbf{P}^*\mathbf{P}$ 是 n 阶的单位矩阵. 证毕.

在上文中， \mathbf{Q} 是所谓的实数元的对角矩阵，所以 $\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q}$

另外容易证明， $(\mathbf{AB})^* = \mathbf{B}^*\mathbf{A}^*$. 所以

$$\mathbf{Q}_1^* = (\mathbf{PQP}^{-1})^* = (\mathbf{P}^{-1})^*(\mathbf{PQ})^* = \mathbf{P}(\mathbf{Q}^*\mathbf{P}^*) = \mathbf{PQP}^{-1} = \mathbf{Q}_1 \quad (13)$$

所以 \mathbf{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

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a) \\ +\infty & (x < 0 \text{ 或 } x > a) \end{cases} \quad (1)$$

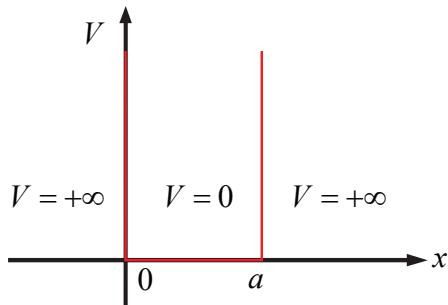


图 1: 无限深势阱

求解定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (5)$$

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（ h 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 $\hat{a}_\pm |\psi_n\rangle = A_n |\psi_{n\pm 1}\rangle$, 其中 $|\psi_n\rangle$ 和 $|\psi_{n\pm 1}\rangle$ 都是归一化的本征态, 那么由归一化条件要求

$$\langle \psi_n | \hat{a}_\pm^\dagger \hat{a}_\pm | \psi_n \rangle = |A_n|^2 \langle \psi_{n\pm 1} | \psi_{n\pm 1} \rangle = |A_n|^2 \quad (2)$$

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

$$a_\pm = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x \mp ip) \quad a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1} \quad a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (1)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega\hbar \quad \hat{n} = a_+ a_- \quad H = \omega\hbar\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \quad (2)$$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\beta^{1/2}} e^{-(x/\beta)^2/2} \quad \beta = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (3)$$

推导

在经典的简谐振子模型中, 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

$$H = \frac{p^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2] \quad (5)$$

定态薛定谔方程（能量的本征方程）为

$$H\psi = E\psi \quad (6)$$

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 H 的升降算符，它们分别可以把本征值升降 $\omega\hbar$ （证明见下文）

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x \mp ip) \quad \Delta E = \omega\hbar \quad (7)$$

根据升降算符的结论，对任意一个 H 的本征函数 ψ_n ，有

$$H(a_{\pm}\psi_n) = (E_n \pm \hbar\omega)(a_{\pm}\psi_n) \quad (8)$$

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 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 $a_-\psi_0 = 0$ 即

$$(m\omega x + ip)\psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{d}{dx}\psi_0 = -\frac{m\omega x}{\hbar}\psi_0 \quad (9)$$

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 $\psi_{n+1} = a_+\psi_n/\sqrt{n+1}$, $\psi_{n-1} = a_-\psi_n/\sqrt{n}$

$$\begin{aligned} A^2 &= \int (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n) dx = \int (a_+^*a_+\psi_n)^*(\psi_n) dx \\ &= \int (a_-a_+\psi_n)^*(\psi_n) dx \end{aligned} \quad (11)$$

而 $a_-a_+\psi_n = H\psi_n/(\omega\hbar) + \psi_n/2 = (n+1)\psi_n$. 所以

$$A^2 = (n+1) \int \psi_n^*\psi_n dx = n+1 \quad A = \sqrt{n+1} \quad (12)$$

所以 $\psi_{n+1} = a_+\psi_n/\sqrt{n+1}$

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）

$$\psi_n = \frac{a_+}{\sqrt{n!}} \psi_0 \quad (13)$$

升降算符的证明

根据升降算符的定义，要证明 a_{\pm} 是升降算符只需证明对易关系

$$[H, a_{\pm}] = \pm \omega \hbar a_{\pm} \quad (14)$$

根据升降算符定义

$$[H, a_{\pm}] = \frac{1}{2m\sqrt{2m\hbar\omega}} [(m\omega x)^2 + p^2, m\omega x \mp ip] \quad (15)$$

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

$$[x^2, x] = [p^2, p] = 0 \quad (17)$$

将两式代入后，只剩下两个交叉项

$$[H, a_{\pm}] = \frac{\omega}{2\sqrt{2m\hbar\omega}} (\mp i[x^2, p] + [p^2, x]) \quad (18)$$

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

$$[x^2, p] = x[x, p] + [x, p]x = 2i\hbar x \quad (20)$$

$$[p^2, x] = -p[x, p] - [x, p]p = -2i\hbar p \quad (21)$$

代入得

$$[H, a_{\pm}] = \frac{\pm \omega \hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (x \mp ip) = \pm \omega \hbar a_{\pm} \quad (22)$$

证毕。

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 $a_\pm = (m\omega x \mp ip)/\sqrt{2m\omega\hbar}$, 有

$$\begin{aligned} a_- a_+ &= \frac{1}{2m\omega\hbar}(m^2\omega^2x^2 + p^2 - im\omega[x, p]) \\ &= \frac{1}{\omega\hbar}\left[\frac{1}{2m}(m^2\omega^2x^2 + p^2) + \frac{\omega\hbar}{2}\right] \\ &= \frac{1}{\omega\hbar}H + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} |a_+\psi_n|^2 &= \langle a_+\psi_n|a_+\psi_n\rangle = \langle \psi_n|a_-a_+\psi_n\rangle = \left\langle \psi_n \left| \left(\frac{1}{\omega\hbar}H + \frac{1}{2} \right) \psi_n \right. \right\rangle \\ &= \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} = n + 1 \end{aligned} \quad (2)$$

所以有 $a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$ (同理 $a_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$).

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

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad u \equiv \alpha x \quad (3)$$

$H_n(u)$ 叫做 Hermite 多项式

$$H_n(u) \equiv (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} (e^{-u^2}) \quad (4)$$

前 6 阶 Hermite 多项式分别为

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 1 & H_3(u) &= 8u^3 - 12u \\ H_1(u) &= 2u & H_4(u) &= 16u^4 - 48u^2 + 12 \\ H_2(u) &= 4u^2 - 2 & H_5(u) &= 32u^5 - 160u^3 + 120u \end{aligned} \quad (5)$$

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）

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-u^2/2} & \psi_2(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2u^2 - 1) e^{-u^2/2} \\ \psi_1(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{2} u e^{-u^2/2} & \psi_3(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} u (2u^2 - 3) e^{-u^2/2} \end{aligned} \quad (6)$$

推导

薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (7)$$

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_p 为动量的标准差, 满足不确定原理

$$\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2} \quad (3)$$

含时波函数为

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma_x^2}}} \exp \left[\frac{-(x - p_0 t/m)^2}{(2\sigma_x)^2 \left(1 + \frac{i\hbar t}{2m\sigma_x^2}\right)} \right] \exp \left[\frac{ip_0}{\hbar} \left(x - \frac{p_0 t}{2m} \right) \right] \quad (4)$$

推导

如果我们想要一维波函数的概率分布为高斯分布^[336], 即

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \quad (5)$$

先假设波函数为实数, 有

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{x}{2\sigma_x}\right)^2} \quad (6)$$

变换到动量表象, 得⁵

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{p}{2\sigma_p}\right)^2} \quad (7)$$

其中 $\sigma_p = \hbar/(2\sigma_x)$, 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. 为了让波函数有一个动量 p_0 , 而维持 $|\psi(x)|^2$ 和 $|\psi(p)|^2$ 的形状不变, 我们可以直接将动量表象中的波函数平移 p_0 , 得

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{p-p_0}{2\sigma_p}\right)^2} \quad (8)$$

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 .

⁵可以用 Wolfram Alpha 或 Mathematica 计算积分.

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

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{x}{2\sigma_x}\right)^2} e^{ip_0x/\hbar} \quad (9)$$

类似地，也可以将 $\psi(x)$ 平移 x_0

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{x-x_0}{2\sigma_x}\right)^2} e^{ip_0(x-x_0)/\hbar} \quad (10)$$

而 $\psi(p)$ 则需要乘以因子 $\exp(-ix_0p/\hbar)$

$$\psi(p) = \frac{1}{(2\pi\sigma_p^2)^{1/4}} e^{-\left(\frac{p-p_0}{2\sigma_p}\right)^2} e^{-ix_0p/\hbar} \quad (11)$$

将以上两式同乘一个常数 $e^{ip_0x_0/\hbar}$ 就得到式 1 和式 2.

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）

$$L_x = yp_z - zp_y \quad L_y = zp_x - xp_z \quad L_z = xp_y - yp_x \quad (2)$$

现在我们用式 2 定义三个方向的角动量算符，此时 x, y, z, p_x, p_y, p_z 也应理解为算符. 同样地，若用 $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}}$ 表示位置矢量算符，用 $\mathbf{p} = p_x\hat{\mathbf{x}} + p_y\hat{\mathbf{y}} + p_z\hat{\mathbf{z}}$ 表示动量矢量算符，那角动量矢量算符可以用式 1 定义. 我们还可以定义角动量平方（标量）算符（注意 L^2 算符是一个整体，不是两个算符相乘）

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (3)$$

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

$$\mathbf{L}\psi = \mathbf{l}\psi \quad (4)$$

我们就能得到矢量本征值 \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 ψ ，使三个分量同时有解

$$L_x\psi = l_x\psi \quad L_y\psi = l_y\psi \quad L_z\psi = l_z\psi \quad (5)$$

不幸的是， L_x, L_y, 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 L_z 的本征方程 $L_z\psi = l_z\psi$ 。

比较幸运的是， L^2 和 L_x, L_y, L_z 都对易，所以必然存在一套本征函数，同时是 L_x, L_y, L_z 其中一个和 L^2 的本征函数。我们习惯上约定计算 L^2 和 L_z 的共同本征矢。

升降算符和本征值

如果要解 L^2 和 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 L_z 的升降算符分别为

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (6)$$

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 $[L_z, L_{\pm}] \propto L_{\pm}$ 即可。结论是（证明见常见算符对易表）

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm} \quad (7)$$

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

$$\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle \quad (8)$$

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

$$L_+ L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y] = L^2 - L_z^2 + \hbar L_z \quad (1)$$

所以

$$\begin{aligned} L_+ L_- \psi_{l,m} &= \hbar^2 l(l+1) \psi_{l,m} - \hbar^2 m^2 \psi_{l,m} + m \hbar^2 \psi_{l,m} \\ &= \hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)] \psi_{l,m} \end{aligned} \quad (2)$$

所以

$$\langle L_- \psi_{l,m} | L_+ \psi_{l,m} \rangle = \langle \psi_{l,m} | L_+ L_- \psi_{l,m} \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m(m-1)] \quad (3)$$

所以

$$L_- \psi_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \psi_{l,m-1} \quad (4)$$

同理可证

$$L_+ \psi_{l,m} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \psi_{l,m+1} \quad (5)$$

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 S_x, S_y, S_z 的互相对易关系以及自旋模长平方算符 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

$$S^2 |s, m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s, m\rangle \quad \text{和} \quad S_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle \quad (1)$$

3. 存在升降算符 $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$, 且 (根号项是归一化系数)

$$S_{\pm} |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle \quad (2)$$

4. 对于 $s = 1/2$ 的粒子, 一共有 2 个本征态, 分别是 $|1/2, 1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle$. 它们的角动量模长平方都是 $3\hbar^2/4$, 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 $\chi_+ = (1, 0)^T$, 第二个为 $\chi_- = (0, 1)^T$. 可以得出角动量平方算符的矩阵为

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

根据 $S_+ \chi_- = \hbar \chi_+$ 和 $S_- \chi_+ = \hbar \chi_-$, 得到

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

然后, 定义泡力矩阵.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

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 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n c_{ij} |u_i\rangle |v_j\rangle$, 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 $|u_i v_i\rangle$ 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 $(\hat{A} \otimes \hat{B})$.

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

$$(\langle u_{i'} | \otimes \langle v_{j'} |)(|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle) = \langle u_{i'} | u_i \rangle \langle v_{j'} | v_i \rangle = \delta_{i,i'} \delta_{j,j'} \quad (5)$$

这就等效于要求 $\{|u_i\rangle\}$ 和 $\{|v_i\rangle\}$ 分别都是正交归一基底.

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

$$\langle u_{i'} v_{j'} | (\hat{A} \otimes \hat{B}) | u_i v_j \rangle = \langle u_{i'} v_{j'} | (\hat{A} |u_i\rangle \otimes \hat{B} |v_j\rangle) = \langle u_{i'} | \hat{A} |u_i\rangle \langle v_{j'} | \hat{B} |v_j\rangle \quad (6)$$

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 \mathbf{A} 的每个矩阵元 A_{mn} 拓展成矩阵分块 $A_{mn}\mathbf{B}$. 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 \mathbf{B} 的每个矩阵元 B_{mn} 拓展成矩阵分块 $B_{mn}\mathbf{A}$.

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 $L_1^2, L_{1x}, L_{1y}, L_{1z}, L_2^2, L_{2x}, L_{2y}, L_{2z}$.

现在定义总角动量算符

$$J^2 = (L_1 + L_2)^2 = (L_{1x} + L_{2x})^2 + (L_{1y} + L_{2y})^2 + (L_{1z} + L_{2z})^2 \quad (1)$$

$$J_z = L_{1z} + L_{2z} \quad (2)$$

令量子数分别为 J 和 M . 所有新增的对易关系为

$$[J^2, J_z] = [J^2, L_1^2] = [J^2, L_2^2] = [J_z, L_{1z}] = [J_z, L_{2z}] = 0 \quad (3)$$

若限制 l_1 和 l_2 为常数, 原来和现在的 Complete Set of Commutable Operators (CSCO) 是

$$\{L_{1z}, L_{2z}\} \quad \{J^2, J_z\} \quad (4)$$

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 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)

$$N = \begin{cases} l_1 + l_2 + 1 - |M| & (|M| > |l_1 - l_2|) \\ \min\{l_1, l_2\} & (\text{其他}) \end{cases} \quad (5)$$

我们只需要在每个子空间 M 中把 J^2 对角化即可.

$$J^2 = L_1^2 + L_2^2 + 2(L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y} + L_{1z}L_{2z}) \quad (6)$$

其中只有 $L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y}$ 不是对角矩阵. 利用升降算符表示

$$2(L_{1x}L_{2x} + L_{1y}L_{2y}) = L_{1+}L_{2-} + L_{1-}L_{2+} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \langle l_2, m'_2 | \langle l_1, m'_1 | J^2 | l_1, m_1 \rangle | l_2, m_2 \rangle \\ &= \hbar^2 \left[\begin{array}{l} \delta_{m'_1, m_1} \delta_{m'_2, m_2} [l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1) + 2m_1 m_2] \\ + \delta_{m'_1, m_1 + 1} \delta_{m'_2, m_2 - 1} \sqrt{l_1(l_1 + 1) - m_1(m_1 + 1)} \sqrt{l_2(l_2 + 1) - m_2(m_2 - 1)} \\ + \delta_{m'_1, m_1 - 1} \delta_{m'_2, m_2 + 1} \sqrt{l_1(l_1 + 1) - m_1(m_1 - 1)} \sqrt{l_2(l_2 + 1) - m_2(m_2 + 1)} \end{array} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

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

$$\max \{m_1\} = \begin{cases} l_1 & (M \geq l_1 - l_2) \\ l_2 + M & (\text{其他}) \end{cases} \quad (9)$$

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 $|l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$ 表象的幺正变换矩阵 \mathbf{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 \mathbf{U}_M 矩阵的形式给出 (如 Griffiths). 可以证明, \mathbf{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 \mathbf{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

$$H = K_r + \frac{L^2}{2mr^2} + V \quad (2)$$

其中径向动能为

$$K_r R = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2 u}{dr^2} \quad (3)$$

把 $L^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi$ 代入薛定谔方程，角向动能变为离心势能项

$$K_{\theta,\phi}\psi = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \psi \quad (4)$$

所以径向方程为（注意只有有心力才能分离变量）

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = ER \quad (5)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu \quad (6)$$

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

$$u(r) = \sqrt{r}\psi(r) \quad (10)$$

$$H = K_r + \frac{L_z^2}{2mr^2} \quad (11)$$

$$K_r R = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dR}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{r}} \left(\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{u}{4r^2} \right) \quad (12)$$

$$\frac{L_z^2}{2mr^2} \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{m^2}{r^2} \psi \quad (13)$$

所以径向方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m^2}{r^2} - \frac{1}{4r^2} \right) \right] u = Eu \quad (14)$$

量子力学中的变分法

当平均能量是波函数的鞍点时，波函数就是能量的本征态。对一维单粒子

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (1)$$

但注意这里的波函数必须已经归一化。由于变分法需要假设任意的增量函数 $\delta\psi$ ，我们只好用一个不要求归一化的能量平均值公式

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle \quad (2)$$

现在假设波函数增加 $\delta\psi$

$$E \langle \delta\psi | \psi \rangle + E \langle \psi | \delta\psi \rangle = \langle \delta\psi | H | \psi \rangle + \langle \psi | H | \delta\psi \rangle \quad (3)$$

由于 $\delta\psi$ 是任意的，我们也可以使用 $i\delta\psi$

$$-E \langle \delta\psi | \psi \rangle + E \langle \psi | \delta\psi \rangle = -\langle \delta\psi | H | \psi \rangle + \langle \psi | H | \delta\psi \rangle \quad (4)$$

以上两式等效，两式相减，得（相当于 ψ^* 与 ψ 是两个独立的变量函数）

$$E \langle \delta\psi | \psi \rangle = \langle \delta\psi | H | \psi \rangle \quad (5)$$

该式对任意微小函数增量 $\delta\psi$ 都要求成立。现在如果令 $\delta\psi = \delta(x)$, 我们得到薛定谔方程

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (6)$$

归一化条件下的变分法也可以由拉格朗日乘数法完成, 令

$$L = \langle\psi|H|\psi\rangle - \lambda[\langle\psi|\psi\rangle - 1] \quad (7)$$

类似以上过程, 同样有

$$\langle\delta\psi|H|\psi\rangle - \lambda\langle\delta\psi|\psi\rangle = 0 \quad (8)$$

即

$$H|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (9)$$

显然, 乘数 λ 就是本征态能量.

数值解一维薛定谔方程（试射法）

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. 若要求更精确的本征值, 可选取一个更小的区间, 再次画图.

⁶如果 x_{max} 足够大, 只需满足这一条件即可自动满足 $\psi'(x_{max}) \approx 0$

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。

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。

径向波函数 $R_{nl}(r)$

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na}\right) \quad (2)$$

$$n = 1 \quad R_{10} = 2a^{-3/2} \exp(-r/a) \quad (3)$$

$$n = 2 \quad \begin{cases} R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \\ R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \end{cases} \quad (4)$$

$$n = 3 \quad \begin{cases} R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\frac{r^2}{a^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\ R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right) \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \\ R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2} \frac{r^2}{a^2} \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \end{cases} \quad (5)$$

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

$$H |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

我们把哈密顿算符分为含时部分和不含时部分

$$H = H_U + H'(t) \quad (2)$$

我们已经知道 $H'(t) = 0$ 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

$$|\psi_U(t)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle e^{-iE_nt/\hbar} \quad (3)$$

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

$$\begin{aligned} & \sum_n c_n(t) H_0 |\phi_n(t)\rangle + \sum_n c_n(t) H'(t) |\phi_n(t)\rangle \\ &= i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |\phi_n(t)\rangle + i\hbar \sum_n c_n(t) \frac{d}{dt} |\phi_n(t)\rangle \end{aligned} \quad (6)$$

考虑到上式左边的 $H_0 |\phi_n(t)\rangle = E_n |\phi_n(t)\rangle$ 和右边的 $i\hbar d|\phi_n(t)\rangle/dt = E_n |\phi_n(t)\rangle$ 相等，可化简为

$$\sum_n c_n(t) H'(t) |\phi_n(t)\rangle = i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n(t) |\phi_n(t)\rangle \quad (7)$$

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

$$H'_{mn} = \langle \phi_m(t) | H'(t) | \phi_n(t) \rangle = \langle \psi_m | H'(t) | \psi_n \rangle e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \quad (9)$$

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^[130]）

$$\mathbf{H}' \mathbf{c} = i\hbar \frac{d}{dt} \mathbf{c} \quad (10)$$

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

⁷这样做的物理意义是要求每个基底上的分量相等

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

$$H = H_0 + \lambda H'(t) \quad (11)$$

$$\mathbf{c}(t) = \mathbf{c}^{(0)}(t) + \lambda \mathbf{c}^{(1)}(t) + \lambda^2 \mathbf{c}^{(2)}(t) \dots \quad (12)$$

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

$$\mathbf{c}^{(1)}(t) - \mathbf{c}^{(1)}(0) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \mathbf{H}'(t) \mathbf{c}^{(0)}(t) dt \quad (16)$$

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）

$$H'_{mn} = \langle \psi_m | H'(t) | \psi_n \rangle \quad (19)$$

为了明确起见，式 18 的分量表达式为

$$c_j^{(n)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \sum_i \langle \psi_j | H'(t) | \psi_i \rangle e^{i(E_j - E_i)t/\hbar} c_i^{(n-1)}(t) dt \quad (20)$$

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 $\omega_{ji} = (E_j - E_i)/\hbar$ 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 $\langle f | H'(t) | i \rangle = W_{fi}g(t)$ 时

$$P_{fi} = |S|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 \quad (2)$$

瞬时脉冲 $g(t) = \delta(t - t_0)$

$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 = \left| \int_{t_0-\epsilon}^{t_0+\epsilon} \delta(t - t_0) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 = 1 \quad (3)$$

代入得

$$P_{fi} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \quad (4)$$

方形脉冲 $g(t)$ （从 $t = t_1$ 到 $t = t_2$ ）

$$\begin{aligned} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} g(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 &= \left| \int_{t_1}^{t_2} e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 = \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t_2} - e^{i\omega_{fi}t_1}}{i\omega_{fi}} \right|^2 \\ &= \frac{\sin^2[\omega_{fi}(t_2 - t_1)/2]}{[\omega_{fi}(t_2 - t_1)/2]^2} (t_2 - t_1)^2 \\ &= \Delta t^2 \operatorname{sinc}^2[\omega_{fi}\Delta t/2] \end{aligned} \quad (5)$$

概率为

$$P_{fi} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \Delta t^2 \operatorname{sinc}^2[\omega_{fi} \Delta t / 2] \quad (6)$$

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。

简谐振动 $g(t) = e^{i\omega t}$

与上面的推导类似，结果为

$$P_{fi} = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} \Delta t^2 \operatorname{sinc}^2[(\omega_{fi} + \omega) \Delta t / 2] \quad (7)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{sinc}^2(x) dx = \pi \quad (8)$$

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

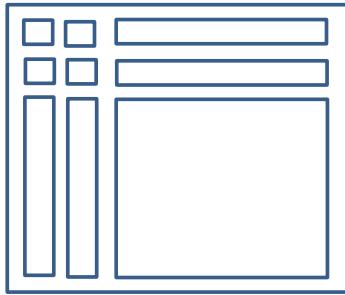
$$|\psi\rangle = C_1 |1\rangle + C_2 |2\rangle + \int \phi(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle d^3k \quad (1)$$

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

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}

图 1: \mathbf{H}' 矩阵的结构

的积分消去. 微扰递推公式为

$$C_i^{(n+1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int dt' \left(\sum_{j \neq i} H'_{ij} C_j^{(n)} + \int H_{ik'} \phi^{(n)}(\mathbf{k}') d^3 k' \right) \quad (2)$$

$$\phi^{(n+1)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{i\hbar} \int dt' \left(\sum_j H'_{kj} C_j^{(n)} + \int H_{kk'} \phi^{(n)}(\mathbf{k}') d^3 k' \right) \quad (3)$$

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 $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{ik_xx} e^{ik_yy} e^{ik_zz}$ 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

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (1)$$

$$\sigma = \lim_{r \rightarrow \infty} \int \frac{(\mathbf{j}_{sc} \cdot \hat{\mathbf{r}})}{|\mathbf{j}_{inc}|} r^2 d\Omega \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{(\mathbf{j}_{sc} \cdot \hat{\mathbf{r}}) r^2}{|\mathbf{j}_{inc}|} \quad (2)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}(rR_{k,l}) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right](rR_{k,l}) = E(rR_{k,l}) \quad (4)$$

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 $\mathbf{k}_f = k\hat{\mathbf{r}}$ 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

$$\psi^{(1)}(\mathbf{r}) = A e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - A \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3r' \quad (9)$$

根据定义，散射幅为

$$f(k, \hat{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3r' \quad (10)$$

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

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) = & \psi_0(\mathbf{r}) + \int d^3r' G(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') \\ & + \int d^3r' G(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \int d^3r'' G(k, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \psi_0(\mathbf{r}'') \\ & + \int d^3r' G(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \times \\ & \int d^3r'' G(k, \mathbf{r}', \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \int d^3r''' G(k, \mathbf{r}'', \mathbf{r}''') U(\mathbf{r}''') \psi_0(\mathbf{r}''') \dots\end{aligned}\quad (11)$$

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。

质心系中的多粒子问题

以一维的 H_2^+ 为例，原子核质量为 M ，电子质量为 m ，哈密顿量为

$$H = T_{N1} + T_{N2} + T_e + V(X_1, X_2, x) \quad (1)$$

若势能函数只与位置有关，那么一般我们会把方程化为质心系方程。令总波函数为

$$\Psi(X_1, X_2, x) = \psi_{cm}(X_{cm}) \psi(X_1, X_2, x) \quad (2)$$

构建不同坐标的哈密顿量。第一可以直接用数学的偏微分变量替换，第二可以通过经典力学的哈密顿量来计算。

用两个质量不同的粒子为例会不会更好一点，rigid rotator！或者氢原子！先解释一下约化质量是怎么来的！为什么玻尔模型用约化质量会有那么高的精度，对应的量子力学原理就在这里！

三维简谐振子（球坐标）

预备知识 球坐标和柱坐标中的径向方程^[476]

势能为 $V(r) = m\omega^2 r^2/2$, 总波函数和能级为

$$\psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\Omega) \quad E_{n,l} = \left(2n + l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad (1)$$

由于角动量量子数 l 只决定离心势能 $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$ 的大小, 所以 l 可以取任意非负整数. 径向波函数为. 令 $x = r/\beta$

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{2^{n+l+2} n!}{(2n+2l+1)!!}} x^l L_n^{l+1/2}(x^2) e^{-x^2/2} \quad (2)$$

其中 $L_n^{l+1/2}$ 是 Generalized Laguerre Polynomials, 氢原子中的拉盖尔函数是 $L_n(x) = L_n^0(x)$.

递推关系

$$L_{n+1}^\alpha(x) = [(2n+1+\alpha-x)L_n^\alpha(x) - (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(x)]/(n+1) \quad (3)$$

$$L_0^\alpha(x) = 1 \quad L_1^\alpha(x) = 1 + \alpha - x \quad (4)$$

罗德里格斯公式

$$L_n^\alpha(x) = \frac{x^{-\alpha} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha}) \quad (5)$$

前几个束缚态为 (简并 $\deg = \sum(2l+1)$)

$$E = 3\hbar\omega/2 \quad (\deg = 1)$$

$$R_{0,0}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} 2e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (6)$$

$$E = 5\hbar\omega/2 \quad (\deg = 3)$$

$$R_{0,1}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} \frac{2\sqrt{6}}{3} x e^{-\frac{1}{2}x^2} \quad (7)$$

$$E = 7\hbar\omega/2 \quad (\deg = 6)$$

$$R_{0,2}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} \frac{4}{\sqrt{15}} x^2 e^{-x^2/2} \quad (8)$$

$$R_{1,0}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} \frac{2\sqrt{6}}{3} \left(\frac{3}{2} - x^2 \right) e^{-x^2/2} \quad (9)$$

$$E = 9\hbar\omega/2 \quad (\text{deg} = 8)$$

$$R_{0,3}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} 4\sqrt{\frac{2}{105}} x^3 e^{-x^2/2} \quad (10)$$

$$R_{1,1}(r) = \frac{1}{\beta^{3/2}\pi^{1/4}} \frac{4}{\sqrt{15}} \left(\frac{5}{2} - x^2 \right) x e^{-x^2/2} \quad (11)$$

库仑波函数

预备知识 薛定谔径向方程^[476]

本词条使用原子单位。参考资料一个是 Wikipedia，另一个是“F Morales et al 2016 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 49 245001”的附录。据说 Merzbacher 的量子力学也有。

库仑波函数常用的边界条件有两种，分别对应以 \mathbf{k} 平面波入射和出射的散射态，记为 $\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ 和 $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$ 。两种边界条件分别为

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} \rightarrow \mp\infty) \quad (1)$$

两种波函数为

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1 \pm i\eta) e^{-\pi\eta/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} {}_1F_1(\mp i\eta; 1; \pm ik r - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \quad (2)$$

其中 $\rho = kr$, $\eta = Z/k$. 上式满足

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi_{-\mathbf{k}}^{(-)}(r)^* \quad (3)$$

$$\langle \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} | \psi_{\mathbf{k}'}^{(\pm)} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (4)$$

球坐标

库仑势的薛定谔径向方程为

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{Z}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] u = \frac{k^2}{2} u \quad (5)$$

其中 $u(r)$ 是 Scaled 波函数, k 是能量为 $E = k^2/2$ 的平面波的波矢, Z 是原子核和电子的电荷之积, l 是角量子数.

令 $\rho = kr$, $\eta = Z/k$, 则上式变为

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[1 - \frac{2\eta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = 0 \quad (6)$$

两个线性无关解为第一类库仑函数 $F_l(\eta, \rho)$ 和第二类库仑函数 $G_l(\eta, \rho)$ ^[366].

所以完备正交归一的库仑球面波为

$$|C_{l,m}(k)\rangle = \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2}{\pi}} F_l(\eta, kr) Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (7)$$

满足

$$\langle C_{l',m'}(k') | C_{l,m}(k) \rangle = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \delta(k - k') \quad (8)$$

现在可以将库仑波函数展开为

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} a_{l,m}^{(\pm)}(k) |C_{l,m}(k)\rangle \quad (9)$$

其中

$$a_{l,m}^{(\pm)}(k) = \frac{i^l}{k} \exp[\pm i\sigma_l(Z/k)] Y_{l,m}^*(\hat{\mathbf{k}}) \quad (10)$$

注意 $a_{l,m}$ 并不是 $\langle C_{l,m}(k) | \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \rangle$, 后者模长为无穷大, 也可记为 $a_{l,m}\delta(0)$.

与平面波的情况 (傅里叶变换) 类似, 要将一个球谐展开的波函数 $|f\rangle$ 投影到库仑波函数上, 就先投影到库仑球面波上, 然后进行么正变换

$$\langle \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} | f \rangle = \sum_{l,m} a_{l,m}^{(\pm)}(k)^* \langle C_{l,m}(k) | f \rangle \quad (11)$$

若 $|f\rangle$ 的 scaled 径向波函数为 $u_{l,m}(r)$, 则

$$\langle \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} | f \rangle = \frac{1}{k} \sum_{l,m} g_{l,m}(k) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) \quad (12)$$

其中

$$g_{l,m}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^{-l} e^{\mp i \sigma_l} \int_0^\infty F_l(\eta, kr) u_{l,m}(r) dr \quad (13)$$

将波函数做傅里叶变换和投影到库仑波函数有什么区别呢？例如做氢原子电离的 TDSE，若想求 $t = +\infty$ 时的动量分布，理论上只要在 t 足够大时做傅里叶变换即可，但如果 t 不够大（电场已消失），电离波包所受的库仑力还不可忽略，那么虽然得到了瞬时的动量分布，但却与 $t = +\infty$ 的不同。这时因为动量算符与哈密顿算符不对易，动量不守恒。但若在电场消失的时候，投影到 $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ 上，由于它是哈密顿的本征函数，投影的模方（概率）不会随时间改变。

最后的问题就是，当 $t = +\infty$ 时，投影到平面波和库仑波是否相同呢？要验证这一点，只需验证

$$\langle \psi_{\mathbf{k}}^{(-)} | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (14)$$

我们还是用球谐展开来验证

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} | \mathbf{k}' \rangle &= \sum_{l,m} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} | C_{l,m}(k) \rangle | C_{l,m}(k) \rangle \sum_{l',m'} \langle s_{l',m'}(k') | \langle s_{l',m'}(k') | \mathbf{k}' \rangle \\ &= \sum_{l,m} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} | C_{l,m}(k) \rangle \langle C_{l,m}(k) | s_{l,m}(k') \rangle \langle s_{l,m}(k') | \mathbf{k}' \rangle \end{aligned} \quad (15)$$

但是径向积分貌似不会做……就当是对的吧。

量子力学的基本假设

预备知识 哈密顿正则方程^[392]

一维的情况

- 粒子的状态由 Hilbert 空间中的波函数 $|\psi(t)\rangle$ 表示。
- 要得到一个物理量 $\omega(x, p)$ 对应的算符，就把 x 和 p 换成对应的算符 \hat{x} 和 \hat{p} 。这两个算符的定义为

$$\langle x | \hat{x} | x' \rangle = x \delta(x - x') \quad (1)$$

$$\langle x | \hat{p} | x' \rangle = -i\hbar \delta'(x - x') \quad (2)$$

- 找到哈密顿量对应的哈密顿算符，波函数的演化由薛定谔方程决定

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (3)$$

- 如果要测量一个物理量 $\hat{\Omega}(x, p)$ ，那么先求出所有的归一化本征函数 $|\omega_i\rangle$ 和对应的本征值 ω_i ，测量到 ω_i 的概率为 $|\langle \omega | \psi \rangle|^2$. 测量完之后波函数由 $|\psi\rangle$ 变为 $|\omega_i\rangle$.

注意这里的 x 和 p 分别是哈密顿方程中的广义坐标和广义动量，而不必是位置和动量.

希尔伯特空间既包括可以正常归一化的波函数，也包括能用狄拉克 δ 函数归一化的波函数.

如果经典哈密顿量中出现了 xp 项，那么算符要写成 $(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})/2$ 以保证物理量的算符是 Hermitian 矩阵. 如果出现了 x 和 p 的更高次项，就只能靠直觉和实验了.

带电粒子的薛定谔方程

预备知识 点电荷的拉格朗日和哈密顿量[\[437\]](#)

经典点电荷在电磁场中的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi \quad (1)$$

其中 \mathbf{A} 和 ϕ 都是位置和时间的函数. 注意这里的 \mathbf{p} 是广义动量

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A} \quad (2)$$

算符仍然是 $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$. 只有 $\mathbf{A} = 0$ 时才有 $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$.

所以哈密顿算符是

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2 + q\phi \quad (3)$$

这个方程在以下度规变换下形式不变

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' + \nabla\chi \quad (4)$$

$$\phi = \phi' - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad (5)$$

$$\Psi = \Psi' \exp(iq\chi/\hbar) \quad (6)$$

其中 $\chi(\mathbf{r}, t)$ 是一个任意可导函数。将以上三式代入薛定谔方程，只需要把不带撇的变量替换为带撇的变量。

长度度规

速度度规

第六章

量子力学与量子场论

本章导航

本章选自 laserdog 编写的量子力学的讲义，并由小时进行了重新排版和一些格式调整。以下是讲义的前言。

前言

量子力学的教材，整体结构利用了矩阵力学的形式，主要目的为弥补国内教材和量子力学课的匮乏。

原稿由英文写成，但是在制作讲义的时候放弃了英文：我写的讲义肯定不如 Sakurai 的大作，或者其他类似的书的。既然这样的话，为什么要放弃我本就不多的目的——方便中国的读者们阅读呢？

因此，本讲义为中文的，当然如果有时间的话我会把我的英文原稿也弄出来，不过意义并不很大。

本讲义主要参考文献为 [1]，也适当的参考了我自己学习量子力学的时候各个老师写的讲义。

基本概念

描述一个态

我们用如下记号： $|\alpha\rangle$ 来描述一个态，这种描述也称为“右矢”。从某种程度上，它可以理解为我们线性代数里面学过的列矢量：

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad (1)$$

当然，这么写出来的话，肯定要指明我们实在怎样的一组坐标下面来进行这个描述的。一旦清楚的说明坐标了之后，这个态的意义也就明确了起来。在量子力学的课程中，一个很容易造成困扰的概念就是“叠加态”。请大家一定

记住，叠加态并不是什么奇怪的事情。比如，你在三维直角坐标系中，有一个点 $(1, 1, 1)/\sqrt{3}$ ，你会觉得“不可思议！竟然可以同时处于 x 轴、 y 轴、 z 轴的混合态”吗？不会吧。所以，在量子力学里面，你也不必对此大惊小怪——大家其实是同样的数学结构。

有右矢自然就有左矢。代数的讲，一个右矢对应的左矢是它的 Hermitian 共轭¹，通常会用 $h.c$ 来表示（Hermitian Conjugation）。共轭大家肯定知道，就是复数里面把幅角取反即可了，但是如果在此基础上再做一个转置的话，就构成了 Hermitian 共轭，形成了左矢，也就是一个行向量。

$$\langle \alpha | = (x_1^* \ x_2^* \ \cdots \ x_n^*) \quad (2)$$

举一个简单的例子，

例 1

如果规定

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

那么

$$\langle \alpha | = \frac{1}{\sqrt{2}} (-i, 1) \quad (4)$$

左矢和右矢之间可以做内积，就像一个行矢量和列矢量做内积（乘法）一样，得到一个数 $\langle \alpha | \beta \rangle = x \in \mathbb{C}$ 。还是刚才那个例子，

例 2

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \quad (5)$$

这样一组对应的左矢和右矢内积得 1 的称为单位向量，也叫归一的向量，归一的态，等等很多叫法。如果一个态没有归一，对它进行归一化的过程为

$$|\beta\rangle \rightarrow \frac{|\beta\rangle}{\sqrt{\langle \beta | \beta \rangle}} \quad (6)$$

这里面其实用到了内积的一个小性质： $\langle \alpha | \beta \rangle = (\langle \beta | \alpha \rangle)^*$ 。读者可以验证一下。

¹其实这有约定俗成的翻译：厄米；然而，这个翻译实在是不能达意，我并不打算使用它。

我们说了这么久的态，但是我们知道在波动力学里面，我们描述一个态是利用它的波函数，一般是坐标的函数 $\psi(x)$. 这个和我们的态有什么关系呢？

其实很有关系的. 我先不着急透露，我们先想想内积的几何意义. $\langle \alpha | \beta \rangle$ 是不是相当于求出 $|\beta\rangle$ 是有多少成分在 $|\alpha\rangle$ 上么？也就是说，

$$|\beta\rangle = \langle \alpha | \beta \rangle |\alpha\rangle + \text{与} |\alpha\rangle \text{垂直的成分} \quad (7)$$

那我们考虑这么一组态², $|x\rangle$, 它们代表一个态被完全的限制在了 x 处无法移动. 那么，一个归一的态 $|\psi\rangle$ 如果能写成坐标空间的波函数形式的话，其最有可能的样子就是

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle \quad (8)$$

由于无论是波函数还是态矢量（右矢），差一个复数相位都是不会有区别的，所以我们的粒子在 $x \rightarrow x' + \Delta x'$ 找到的概率，就像一般的量子力学问题里面说的那样，是

$$\int_{x'}^{x'+\Delta x'} |\psi(x)|^2 dx = \int_{x'}^{x'+\Delta x'} \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle \quad (9)$$

如果对全空间积分，这个概率是 1，也就是说

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle = 1 \quad (10)$$

这是一个平凡的结论，但是实际上这很有一点深意的，本章中间的部分可以看到。

捎带说一句，像 $\langle x | \alpha \rangle$ 这样，可以叫 $|\alpha\rangle$ 的 x 表象. 类似的还有动量表象等. 不同表象之间的变换等问题随后会讲.

算符

首先介绍一个很重要的算符：单位算符. 别急，这个是很无聊，但是却有很重要的作用. 而且，我们介绍的并不是那么无聊的形式.

考虑一组完备正交归一的态 $|\lambda_i\rangle$. 单位算符 I 就可以写成

$$I = \sum_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| \quad (11)$$

这就被称为 **resolution of identity**. 为了便于理解，我们来举一个例子.

²实际上有不可数无穷个态，而且归一的办法和我们之前说的不完全一样，但是这里就先不管数学上这样会不会带来问题了

例 3

三维空间一个矢量

$$\mathbf{v} = v_x \mathbf{i} + v_y \mathbf{j} + v_z \mathbf{k} \quad (12)$$

其中, v_x, v_y, v_z 可以通过 $\langle i \text{ (or } j, k) | v \rangle$ 得到.

也就是说,

$$\begin{aligned} |v\rangle &= v_x|i\rangle + v_y|j\rangle + v_z|k\rangle = |i\rangle\langle i|v\rangle + |j\rangle\langle j|v\rangle + |k\rangle\langle k|v\rangle \\ &= (|i\rangle\langle i| + |j\rangle\langle j| + |k\rangle\langle k|)|v\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

正如式 11, 我们有

$$|\alpha\rangle = \sum_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|\alpha\rangle \quad (14)$$

还有很多一般的关于算符的理论. 相信通过前面的理解, 我们知道算符在某一组特定的正交完备归一基 $|\lambda_i\rangle$ 下可以表示为矩阵, 而矩阵元

$$A_{ij} = \langle\lambda_i|A|\lambda_j\rangle \quad (15)$$

一个物理量显然是一个实数, 这实际上要求了它对应的算符是 Hermitian 算符, 即

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger, \quad i.e., \quad A_{ij} = A_{ji}^* \quad (16)$$

(实际上, 在满足 \mathcal{PT} 对称性下这两件事情并不完全一致, 不是 Hermitian 算符也可以得到全部实数的本征值, 在本书中不考虑这种事情) 而不是物理量的算符并不非要是 Hermitian 的, 如

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \& \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

介绍几个重要的二维 Hermitian:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (18)$$

上面四个矩阵被称为 **Pauli 矩阵**, 有的时候也会写成四维 (矩阵) 矢量的形式, $\boldsymbol{\sigma}$.

这四个矩阵十分重要, 尤其是在研究自旋 $1/2$ 体系的时候. 这部分内容在后面讲角动量的时候你会时常见到.

关于算符还有很多内容, 考虑到这是一个启发性的讲义, 这里就不赘述了. 我们可以从 Exercise 里面逐步学习:

习题 1

定义

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (19)$$

求出下面算符的本征态和对应的本征值：

$$\hat{H} = \hat{A}^\dagger \hat{A} + \frac{1}{2} \quad (20)$$

接下来我们看一下算符的对易关系，其实与其相关的矩阵的对易关系想必你们都学过：

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &\stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \\ \{\hat{A}, \hat{B}\} &\stackrel{\text{def}}{=} \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \end{aligned} \quad (21)$$

这里不仅介绍了对易，也介绍了反对易。这两者同样常见，不同的是，前者经常出现于玻色体系，而后者经常出现于费米体系。

习题 2

在习题 1 中，我们定义了算符 \hat{A} 。那么，请计算

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = ? \quad (22)$$

习题 3

试证明，对于 $\forall \hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (23)$$

接下来简要介绍一下算符的完备性，证明暂时略去。可以证明的是，存在逆的 Hermitian 算符，即存在 $\hat{B}\hat{A} = I$ 的时候，如果这个 Hermitian 算符的本征态维数有限，那么这个本征态是完备的。如果无限维，这件事情不一定成立。至于有人问为什么无限维会带来 bug 呢？举个简单的例子证明无限维的时候好多概念都用不了。

例 4

定义³一个无限维的完备正交归一解为 $|i\rangle, i = 0, 1, \dots, \infty$, 那么考虑算符

$$A = \sum_{i=0}^{\infty} |i\rangle\langle i+1|, \quad B = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i-1| \quad (24)$$

那么, 显然有

$$AB = I, \quad BA = I - |0\rangle\langle 0| \quad (25)$$

也就是说, 逆矩阵这件事情实际上在无限维的时候定义有一定困难.

以上就是关于算符的一些一般性质.

特殊的算符

我们知道, 大多数情况下, 一个粒子的哈密顿量都会包含动能部分, 而动能的表示又是依靠动量的. 很常见的, 我们就会考虑动量算符 \hat{p} . 这个算符的本征态和对应的本征值为

$$\hat{p}|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle \quad (26)$$

而由于是连续的谱, 归一化条件将是利用 delta 函数的

$$\langle p_1|p_2\rangle = \delta(p_1 - p_2) \quad (27)$$

这种连续的谱也会发生在坐标算符 \hat{x} 上. 类似的有

$$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle \quad (28)$$

$$\langle x_1|x_2\rangle = \delta(x_1 - x_2) \quad (29)$$

我们前面介绍过的 resolution of identity, 这里的形式也需要改变:

$$\int dp |p\rangle\langle p| = I \quad (30)$$

$$\int dx |x\rangle\langle x| = I \quad (31)$$

不过这些都是小变化, 仔细想想的话, 其实很容易理解.

³从这里开始, 后面很可能有的时候算符不写它的那个“帽子”了.

我们接下来要考虑的实际上是一个非常奇怪的问题： $\langle p|x\rangle = ?$. 答案很简单，形式为

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \quad (32)$$

但是具体怎么做的呢？我们先看一个貌似与这个问题并不是很相关的问题：平移问题.

让我们考虑沿着 x 方向的平移算符 $\hat{\mathcal{J}}$:

$$\hat{\mathcal{J}}(dx')|x'\rangle = |x' + dx'\rangle \quad (33)$$

有了这组性质之后我们实际上可以得到任何态 $|\alpha\rangle$ 是如何在这样一个平移下变换的，因为我们可以把它展开成坐标本征态的线性组合

$$\hat{\mathcal{J}}(dx')|\alpha\rangle = \int \hat{\mathcal{J}}(dx')|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle dx' = \int |x' + dx'\rangle \langle x'|\alpha\rangle dx' \quad (34)$$

有几点值得注意：这个算符满足很多性质，比如它是 Unitary 的，再比如说它是非常常见的可以线性组合的

$$\begin{cases} \hat{\mathcal{J}}(dx')\hat{\mathcal{J}}^\dagger(dx') = 1 \\ \hat{\mathcal{J}}(dx')\hat{\mathcal{J}}(dx'') = \hat{\mathcal{J}}(dx' + dx'') \\ \hat{\mathcal{J}}(-dx') = \hat{\mathcal{J}}^{-1}(dx') \\ \hat{\mathcal{J}}(0) = I \end{cases} \quad (35)$$

考虑到量子力学的基本假设⁴， $[x, p] = i\hbar$ ，我们注意到

$$\hat{x}\hat{\mathcal{J}}(dx')|x'\rangle = (x' + dx')|x' + dx'\rangle \quad (36)$$

$$\hat{\mathcal{J}}(dx')\hat{x}|x'\rangle = x'|x' + dx'\rangle \quad (37)$$

也就是说

$$[\hat{x}, \hat{\mathcal{J}}(dx')] \sim dx' \quad (38)$$

这里面的约等于号是考虑到 $|x' + dx'\rangle \sim |x'\rangle$. 利用在 $dx' \rightarrow 0$ 的时候 $\hat{\mathcal{J}}(dx') \rightarrow 1$ ，我们得到

$$\hat{\mathcal{J}}(dx') \sim 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p} dx' \quad (39)$$

⁴我后面可能会总结一下基本假设，但也可能不总结了 orz

例 5

可以证明 \hat{P} 是 Hermitian 的。一般这种问题的做法是看矩阵元，比如我有一套本征态 $|i\rangle$ ，定义 $P_{ij} \equiv \langle i|P|j\rangle$ 。如果他是 Hermitian 的，那么 $P_{ij} = P_{ji}^*$ 。但是这里的话，我们没有办法选取离散的本征态，不过即使只是连续本征态，也是可以的。最直觉的做法就是选取坐标本征态，我们规定 $P(x, x') = \langle x|P|x'\rangle$ 。我们只需要证明 $P(x, x') = P(x', x)^*$ 。这里简要地给出一个“令人信服”但不那么严格的说法。

我们有一个最方便的办法来计算，就是利用 dx' 很小的时候的 $\hat{\mathcal{J}}(dx')$ 。

$$\langle x|\hat{\mathcal{J}}(a)|x'\rangle \sim \langle x|x'\rangle - \frac{i}{\hbar}a\langle x|P|x'\rangle \quad (40)$$

也就是说

$$P(x, x') \sim i\frac{\hbar}{a}[\langle x|\hat{\mathcal{J}}(a)|x'\rangle - \langle x|x'\rangle] = i\frac{\hbar}{a}[\langle x|x' + a\rangle - \langle x|x'\rangle] \quad (41)$$

而很类似的

$$P(x', x) \sim i\frac{\hbar}{a}[\langle x'|x + a\rangle - \langle x'|x\rangle] \quad (42)$$

$$P(x, x')^* \sim -i\frac{\hbar}{a}[\langle x' + a|x\rangle - \langle x'|x\rangle] = i\frac{\hbar}{a}[\langle x'|x\rangle - \langle x' + a|x\rangle] \quad (43)$$

取 $a \rightarrow 0$ ，上面的式子严格等于，而且两者的关系更一目了然。

投影算符

这是一个概念，看起来并不是很有趣，但是我们在后面学习微扰理论的时候会发现它很重要。

它一般指这样一个算符：我们现在有一组正交完备归一的基 $\{|\alpha_i\rangle\}$ 。我们很关心一个初始在 $|\alpha_j\rangle$ 的基的行为，并且可以预料到，在其刚刚开始演化的时候，其大部分成分都还这个态上。这就有点像你把一根直线转了一个小角度，它沿原来方向的分量还是很大，如图 1。

很显然的，这个投影算符就可以用 $|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|$ 来表示。我们还是利用我们之前介绍过的一个例子来说明。

例 6

三维空间一个矢量

$$\mathbf{v} = v_x \mathbf{i} + v_y \mathbf{j} + v_z \mathbf{k} \quad (44)$$

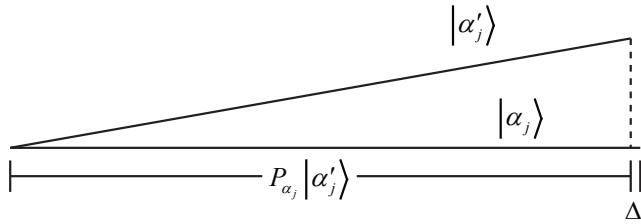


图 1: 偏移一点的矢量与投影

如果我要获得它的 x 方向的投影, 我首先要保证它在 x 方向上, 其次要保证它的大小. 于是, 最后得到

$$\mathbf{v}_x = v_x \mathbf{i} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{i}) \mathbf{i} = \langle i | v \rangle | i \rangle = | i \rangle \langle i | \mathbf{v} \quad (45)$$

投影算符不仅指投影到一个方向的, 还指投影到一个平面上的投影算符, 或者投影到 Hilbert 空间上更“高维度”的空间.

这个投影算符虽然现在看起来没有什么用, 但是后面你会看到它的作用的. 几个有趣的性质读者可以作为练习

习题 4

请读者证明: 如果 \hat{P} 是投影算符, 则

- (1) $\hat{P}\hat{P} = \hat{P}$
- (2) $1 - \hat{P}$ 也是投影算符.

算符的函数

我们很多时候可以写一些算符的函数来简化算符. 大部分时候这种函数都是一目了然的, 比如 $\hat{A}^2 = \hat{A} \cdot \hat{A}$, 但有的时候也存在一些很微妙的东西. 值得注意的是, 无论什么时候, 都要记得算符不一定是可对易的.

一个简单的函数, $f(\hat{A}) = \hat{A}^2$ 就容易造成初学者的失误. 比如

$$f(\hat{A} + \hat{B}) = \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 \quad (46)$$

稍微复杂点的函数, 比如

$$\exp(\hat{A}) = I + \hat{A} + \frac{1}{2!} \hat{A}^2 + \dots \quad (47)$$

也是非常常见的一种算符函数.

习题 5

考虑一个体系，它的 Hilbert 空间是二维的，并且计 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$. 现在有一个算符

$$\hat{U} = \exp(i\alpha(t)\sigma_x) \quad (48)$$

其中， σ_x 是式 18 定义的 Pauli 矩阵，那么求

$$\hat{U} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = ? \quad (49)$$

显然，我们有

$$\hat{U} = I_{2 \times 2} + \alpha(t)\sigma_x + \frac{1}{2!}(\alpha(t)\sigma_x)^2 + \dots \quad (50)$$

由于 Pauli 矩阵有很好的性质：

$$\sigma_x^2 = I_{2 \times 2} \quad (51)$$

我们有

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \left(1 - \frac{1}{2!}\alpha(t)^2 + \frac{1}{4!}\alpha(t)^4 \dots\right) I_{2 \times 2} + \left(\alpha(t) + \frac{1}{3!}\alpha(t)^3 + \dots\right) i\sigma_x \\ &= \cos \alpha(t) I_{2 \times 2} + \sin \alpha(t) i\sigma_x \end{aligned} \quad (52)$$

从而，我们有

$$\hat{U} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha(t) \\ i \sin \alpha(t) \end{pmatrix} \quad (53)$$

这个例子实际上在我们后面看到动力学分析中是一个很常见的“量子演化问题”的基本处理。以后我们会再次看到这个问题的。

以上是一个带答案的练习，现在我们出一个证明性的练习。

习题 6

求证：

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (54)$$

这个等式叫做 Baker-Hausdorff formula，我们可能会经常地遇到这个式子。

* 密度矩阵, 与量子信息基本概念

量子信息可以说是只要具备完善的量子力学知识就能够入门, 但是入的好不好得看初等数学功力的一个方向.

量子信息里面一个重要的概念就是密度矩阵. 对于纯态 (**Pure State**), 即一个可以被用态矢量描述的态, 归一态矢量为 $|\psi\rangle$, 其密度矩阵可以用

$$\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (55)$$

来描述. 这样的描述可以略去态矢量的相位, 是自由度更小的更“好”的描述.

纯态密度矩阵有很多性质, 比如

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1, \text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1 \quad (56)$$

这是由于

$$\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho \quad (57)$$

一个算符在这个态下的平均值

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}) \quad (58)$$

与纯态相对的是混态 (**Mixed State**). 我们来想这么一个问题: 纯态就是一个态, 按照统计的观点, 它的熵就是 $\ln 1 = 0$. 而如果我们这个体系描述的东西内部很复杂, 各个态之间自发的跳动, 我们不能简单的用一个态来描述, 怎么办呢? 我们仍然能用密度矩阵来描述. 一个最基本的要求就是这个密度矩阵的性质得和纯态一致, 即

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad (59)$$

一个算符在这个态下的平均值

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}) \quad (60)$$

我们再来看看密度矩阵的一些行为. 由于它是 Hermitian, 我们通过某种对角化, 显然可以把密度矩阵写成

$$\rho = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|, \quad \sum_i \lambda_i = 1, \quad \forall i \lambda_i > 0 \quad (61)$$

这部分有点数学, 而且有的时候并不有趣, 我们来看一个练习.

习题 7

假设存在一系列的密度矩阵 ρ_j , 和一些复数 $c_j, \sum c_j = 1 \& \forall j, c_j > 0$. 证明:

$$\sum_j c_j \rho_j \quad (62)$$

也是一个密度矩阵.

一个系统处于某个态的时候可以求它的熵, 其中, 目前广泛接受并应用的熵是 von Neumann 熵, 其定义为

$$S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i \quad (63)$$

当然, 对于纯态, $S = 0$, 但是对于混态则不然. 会想热力学, 我们知道熵有一个很有趣的结论, 我们这里留作练习.

习题 8

von Neumann 熵满足两个系统的混杂会增大熵, 数学上讲也就是

$$S[\lambda \hat{\rho}_1 + (1 - \lambda) \hat{\rho}_2] \geq \lambda S[\hat{\rho}_1] + (1 - \lambda) S[\hat{\rho}_2], \quad \forall \hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2, \quad 0 < \lambda < 1 \quad (64)$$

试证明这点 (答案: [2], section 11.3.5).

有的时候, 我们要考虑多粒子的问题. 当然真正的量子多粒子问题我们在“全同粒子的统计^[512]”中再仔细考虑, 我们这里先看一些简单的情况, 比如定域的 (从而就不需要考虑全同性了). 有两个粒子 a, b , 其各自 Hilbert 空间为 $\mathcal{H}_a, \mathcal{H}_b$. 那么, 整体 Hilbert 空间, 代数的讲, 就变成了两个粒子各自 Hilbert 空间的直积⁵: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$. 这时候我们定义约化密度矩阵”(reduced density matrix), 来得到单粒子的信息. 比如, 我们如果想了解 a 粒子, 那么就可以写它的对 a 的约化密度矩阵 $\hat{\rho}_a = \text{Tr}_b(\hat{\rho})$, 其是通过对 \mathcal{H}_b 做部分取迹做到的. 技术上讲, 这是通过用一组完备的基 $|\phi_i\rangle \in \mathcal{H}_b$ 来做到的:

$$\langle \psi_1 \hat{\rho}_a | \psi_2 \rangle = \sum_i \langle \psi_1 \otimes \phi_i | \hat{\rho} | \psi_2 \otimes \phi_i \rangle \quad (65)$$

我们用一个练习来结束这一部分.

⁵直积的矩阵表达: $A \otimes B$ 就是把 A 中的每个元素 A_{ij} 变成一个矩阵 $A_{ij} \cdot B$.

习题 9

求 trace 自然会发生很多事情，一个显然的事情就是两体关联的失去：

$$\begin{aligned} S_{a \otimes b}[\hat{\rho}] &= \text{Tr}_{a \otimes b}(-\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \leq S_a[\hat{\rho}_a] + S_b[\hat{\rho}_b] \\ &= \text{Tr}_a(-\hat{\rho}_a \ln \hat{\rho}_a) + \text{Tr}_b(-\hat{\rho}_b \ln \hat{\rho}_b) = S_{a \otimes b}[\hat{\rho}_a \otimes \hat{\rho}_b] \end{aligned} \quad (66)$$

试证明这一点（答案：[3]），并验证对于 Bell 基，比如

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle) \quad (67)$$

这个不等式是成立的。

这是量子信息论的一个经常需要考虑的事情，很多量子信息相关的书，比如 XiaoGang Wen 的书 [4] 都介绍了这点，在此不再赘述。

我们这里再讲有关密度矩阵的一个知识：在有限温度的时候，密度矩阵如何表示（一般我们处理的时候都是处理零温问题，不考虑统计分布）。其实很简单：

$$\rho = \exp(-\hat{H}/k_B T)/Z \quad (68)$$

其中， $Z = \text{Tr} \exp(-\hat{H}/k_B T)$. 更多的关于密度矩阵，量子信息的内容就不再赘述了。

测量，不确定性原理

测量发生于一个 Hermitian 算符 \hat{A} 在纯态或者混态 $\hat{\rho}$ 上。最终得到的结果是算符 \hat{A} 的本征值 λ ，而测量得到这个本征值 λ 的概率是 $P_\lambda = \text{Tr}(\hat{P}_\lambda \hat{\rho})$ ，而这里 $\hat{P}_\lambda = \sum |\hat{A} = \lambda\rangle \langle \hat{A} = \lambda|$ 是投影算符。可以想象，统计上来说，平均的测量值是 \hat{A} 在态 $\hat{\rho}$ 上的期待值，也就是 $\text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}) = \sum_\lambda \lambda P_\lambda$. 其中，对于纯态，就是简单的 $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$.

量子力学有几个假设，其中比较有名的（你们或许在此前就听说过）就是“塌缩”假设：如果测量的结果是 λ ，那么这个量子态就会塌缩到 $\hat{P}_\lambda \hat{\rho} \hat{P}_\lambda / \text{Tr}(\hat{P}_\lambda \hat{\rho})$. 特例就是当本征值为 λ 的态只有一个的话，系统就会塌缩到 $|\hat{A} = \lambda\rangle$ 上。下面一个练习是对这一点的直接应用。

习题 10

考虑一个系统，它的态可以用角动量 l 、角动量 z 分量 m 的共同本征态展

开为

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} |l=1, m=1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |l=1, m=0\rangle + \frac{1}{2} |l=1, m=-1\rangle \right) \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} |l=0, m=0\rangle \end{aligned} \quad (69)$$

现在测它的角动量 z 分量，测到 $m=0$. 求测量完的体系处于什么态（用密度矩阵和态矢分别写出）.

量子信息学的一个很重要的（也看起来很平庸的）结论是：通过测量，我们得到了信息. 而得到了信息也就是说，熵见笑了. 这换成数学语言就是说

$$S[\hat{\rho}] \geq \sum_{\lambda} P_{\lambda} S[\hat{\rho}_{\lambda}] \quad (70)$$

其中， $\hat{\rho}_{\lambda}$ 表示测量到塌缩到的 λ 态. 我们看一个例子.

习题 11

考虑一个密度矩阵

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} [\mathbb{I} - \sigma_1 \otimes \sigma_2] \quad (71)$$

1. 求验算：它是否是一个纯态？
2. 定义算符 $\hat{A} = \sigma_1 \otimes \sigma_0$ ，求它的本征值，并定义投影到这些本征值的投影算符，计算进行该算符的测量后得到各个本征值的概率，并验证我们之前对于测量得到信息的结论.

接下来，也就是本章的最后，我们来看不确定性原理.

对于 Hermitian 算符 $\hat{A} \& \hat{B}$ ，不确定原理告诉我们

$$(\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2)(\langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2) \geq \frac{1}{4} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle |^2 \quad (72)$$

其中， $\langle \cdot \rangle$ 是其在某个量子态 $\hat{\rho}$ 下的期待值.

证明如下：首先，定义所谓两个算符（不一定是 Hermitian）的内积：

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \hat{B} \rangle = \text{Tr}(\hat{A}^\dagger \hat{B} \hat{\rho}) \quad (73)$$

不难看出，它是满足内积的性质的（线性、共轭）. 现在考虑两个新的算符

$\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \hat{B}' = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$, 此时

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 &= \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}', \hat{B}'] \rangle|^2 \\
 &= \frac{1}{2} (\hat{A}', \hat{B}') (\hat{B}', \hat{A}') - \frac{1}{4} (\hat{A}', \hat{B}')^2 - \frac{1}{4} (\hat{B}', \hat{A}')^2 \\
 &= [\text{Im}(\hat{A}', \hat{B}')]^2 \\
 &\leq |(\hat{A}', \hat{B}')|^2 \leq (\hat{A}', \hat{A}') (\hat{B}', \hat{B}') \\
 &= (\langle \hat{A}^2 \rangle - |\langle \hat{A} \rangle|^2) (\langle \hat{B}^2 \rangle - |\langle \hat{B} \rangle|^2)
 \end{aligned} \tag{74}$$

补充几个练习题

习题 12

如果 $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{B}^2$, 用 \hat{B} 表示 $e^{\hat{A}} \hat{B} e^{\hat{A}}$.

习题 13

矢量 \mathbf{A}, \mathbf{B} 为三维矢量, 而 $\boldsymbol{\sigma}$ 则是 Pauli 矩阵的矢量, 计算 $[\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}]$

习题 14

矢量 \mathbf{n} 为三维实数矢量, 而 $\boldsymbol{\sigma}$ 则是 Pauli 矩阵的矢量, 计算 $\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, 并计算 $\exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \exp(-i\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$

全同粒子的统计

为什么要讲全同粒子呢? 因为, 我们的世界有两种粒子, 玻色子和费米子, 他们的性质截然不同, 但又都很重要. 上一章讲了基本的数学结构, 这一章就是对这两种粒子建立这种数学结构. 要注意, 只有玻色子和费米子这两种粒子在低维的时候很可能被打破, 形成一种“任意子 (anyon)”, 甚为可怕, 其在量子信息中也有很重要的作用, 是处理非 Abelian 交换的, 可做逻辑门. 更多信息可以参考 [5].

Fock 空间

一个简单的说法, Fock 空间就是不同粒子数的态所在的空间. 例如, 一个玻色体系, 有两个能级, 那么第一个能级 n 个粒子, 第二个能级 m 个粒子的态, 我们并不关心其具体的波函数形式 $\psi(x)$ 这样的, 而是抽象的写成 $|n, m\rangle$.

当然，这里我们还没有明确的定义玻色和费米体系都是什么样子，这个只是简单的给一个大致想法。接下来，我们仔细的构建这套理论。

有关排列群

首先，我们看一些有关于排列群的知识。这部分不是必要的，对于理解某些特殊的问题时有奇效⁶。

全同粒子的传统处理方法

如果我有 n 个粒子，由于是全同的，我说这 n 个粒子在 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_n$ 这 n 个位置组成的无序数组的情况可以用类似我们 single particle 的办法描述，也就是使用波函数

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_n) \quad (1)$$

然而这个波函数的 n 个位置参数显然是有序的。我们可以断言，在这 n 个坐标进行重新排列之后，波函数应该不变——或者至少说，密度矩阵不变，波函数有相位差别。

在波函数的形式仅仅是一个函数——并不是什么旋量啊之类的奇怪的东西，而仅仅是一个复数的时候（这也被叫做排列群的一维表示），粒子自然而然地被分为了两类：波色子和费米子。

我们取一个排列算符 $\sigma \in S_n$ ，并将这个算符作用在波函数的参数上，得到的应该是一个对应的一维表示 $R(\sigma)$ 作用在波函数上

$$\psi(\sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_n)) = R(\sigma)\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \dots \mathbf{x}_n) \quad (2)$$

显然满足的是 $|R(\sigma)| = 1$ 。现在考虑一对位置的交换，比如把 i 位置和 j 位置进行交换，这样的操作记为 $\sigma_{i,j}$ 。显然的有 $R(\sigma_{i,j})^2 = 1$ ，也就是说

$$R(\sigma_{i,j}) = \pm 1 \quad (3)$$

如果更具体的分析这两种群表述的区别，在量子场论里面我们能一目了然的看到这与自旋之间有着密切的关系。在后面角动量的部分和相对论性量子力学部分我们也会稍微的提及一点。不过在这里我只给出结论：得到 +1 结

⁶但是大多数时候这是用来装逼的，不想看的话跳过就可以了

果的是玻色子 (Boson)，两个粒子交换波函数不变；得到 -1 结果的是费米子 (Fermion)，两个粒子交换波函数变成原来的负数。

然而，如果波函数不是一个数的话，这有可能就是一个排列群的二维或者更复杂的表示了，我们在此不赘述。

多体 Hilbert 空间的数学结构

波函数所在的 Hilbert 空间，在这套框架下是没有确定粒子数的空间，也就是说最终的 Hilbert 空间——Fock 空间，是各个粒子数的 Hilbert 空间的直和。

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \dots \quad (4)$$

而我们可以一目了然的说明的就是，0 粒子状态就是一种我们称为“真空”的状态，可以用 $|0\rangle$ 来指代。更准确一点地说，真空态相当于在 1 粒子波函数的 Hilbert 空间中没有粒子（波函数等于 0），而 1 粒子波函数的 Hilbert 空间就是单体波函数所在的线性空间，也是如果我们有一些简单的波动力学基础的话最熟悉的那种。

而更高粒子数的子空间 \mathcal{H}_n ，则是指通过对称化或者反对称化之后的 n 个单粒子空间的张量积的子空间， $(\mathcal{H}_1)^{\otimes n} \equiv \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \dots \otimes \mathcal{H}_1$ ，如图 1 就是一个张量积的示意。

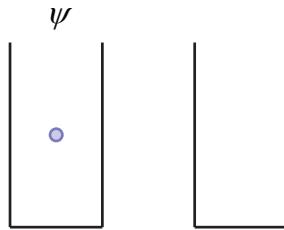


图 1：体系的波函数为 $|\psi\rangle_{\text{left}} \otimes |0\rangle_{\text{right}}$

而我们注意到， \mathcal{H}_n 仅仅是张量积的子空间，要建立完整的数学描述还需要告诉我们如何从这个张量积空间获得这个需要的子空间。也就是说，形式上的，我们需要找到这么一个线性映射：

$$\mathcal{S} : \quad (\mathcal{H}_1)^{\otimes n} \mapsto \mathcal{H}_n \quad (5)$$

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle \mapsto |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle \quad (6)$$

很显然的，我们就得到了两种情况下的这个线性映射 \mathcal{S} ：

- Boson Case

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle \mapsto \sum_{\sigma \in S_n} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \otimes |\psi_{\sigma(2)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(n)}\rangle \quad (7)$$

- Fermion Case

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle \mapsto \sum_{\sigma \in S_n} (-1)^\sigma |\psi_{\sigma(1)}\rangle \otimes |\psi_{\sigma(2)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(n)}\rangle \quad (8)$$

其中，熟悉线性代数的同学肯定会猜到，这个 $(-1)^\sigma$ 就是一个重排操作 σ 中交换的次数，或者说逆序数。

接下来我们考虑多体问题 Hilbert 空间的基。最基础的版本是我们的波函数是空间坐标的函数，当然是多个空间坐标： $\psi(x_1, \dots, x_n)$ 。但是，由于统计性质的要求，我们要求（对 Boson 取 +，Fermion 取 -）

$$\psi(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\sigma \in S_n} (\pm 1)^\sigma \langle x_1 | \psi_{\sigma(1)} \rangle \dots \langle x_n | \psi_{\sigma(n)} \rangle \quad (9)$$

习题 1 练习 (Majorana 算符)

考虑两个格点，这两个格点上有相同的费米子模式。记 $|1\rangle_{1,2} = c_{1,2}^\dagger |0\rangle$ ，

(1) 在

$$\begin{pmatrix} |0\rangle_1 |0\rangle_2 \\ |0\rangle_1 |1\rangle_2 \\ |1\rangle_1 |0\rangle_2 \\ |1\rangle_1 |1\rangle_2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

的基下，写出 $c_{1,2}, c_{1,2}^\dagger$ 的矩阵形式。此处我们定义 $|1\rangle_1 |1\rangle_2 \equiv c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle_1 |0\rangle_2$ 。

近似理论：微扰

无论在一般的量子力学框架下，还是其延伸出的各种问题，比如量子多体问题、量子统计问题、量子场论问题等等，可以精确求解的本身就是少之又少。很多时候，一些必要的近似手段才真正地发挥了大作用。

一个最成功的近似理论就是微扰理论。假如我们对某一个体系了解的很充分，那么对这个体系在小的已知扰动（比如，由杂质或者外界场影响等等）的行为可以非常好的用微扰进行处理，得到很多十分有效的结论。

不含时 Time-independent

很多微扰是不含时的微扰——比如说，我的杂质就一直扔在那里了，不管你时间怎么变化我的杂质又不会消失。这时候的微扰论实际上是比较基础的，我们不用引入很多奇葩观念就可以轻松地解决问题。在这种时候，有一个很有趣的现象我们后面会看到。

注意到，如果微扰很小的话，微扰之后本征态的能量、态都很接近微扰之前的能量，比如说， $|n^{(0)}\rangle, E_n^{(0)}$ 分别表示原来的本征态和能量，微扰之后在它附近的能量本征态为 $|n, \lambda\rangle, E_n$ ， λ 为一个描述微扰大小的参数。所以，我们的一般想法就是：假定满足如下关系：

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots | \psi_n \rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle \quad (1)$$

注意，一目了然，这并没有进行归一化。另外，很直观的，假定 $|\psi_n^{(k>0)}\rangle$ 与原本征态 $|\psi_n\rangle$ 正交。

非简并问题

为什么上来先强调非简并问题，这实际上在后面可以看出来。一个比较直观的说法是这样的：如果简并了，那么我实际上在这两个简并态之间随意组合都可以得到处于该能量的本征态，尽管其中只有一些是有一定的物理意义（也就是其他算符本征态）的。在这么多种本征态组合中，究竟哪个和微扰之后的本征态最为接近呢？这就是一个技术上的问题。并不是不能考虑，但是在这里我们先处理点最简单的问题，在后面我们再考虑简并情况。

在进一步说明问题前，我们先考虑一个更简单的情况：一个可以严格对角化的 2×2 问题。

习题 1

一个体系的非微扰 Hamiltonian 是：

$$H_0 = E_1 |e^0\rangle\langle e^0| + E_2 |g^0\rangle\langle g^0| = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

其中 $E_1 < E_2$ 。而微扰部分的 Hamiltonian 则是

$$H_1 = \lambda (|e^0\rangle\langle g^0| + |g^0\rangle\langle e^0|) \quad (3)$$

显然，这是一个实对称矩阵 (Hermitian 矩阵)，我们可以把它用一个正交矩阵 (Unitary 矩阵) 进行对角化：

$$H = H_0 + H_1 = U^\dagger \begin{pmatrix} \lambda_- & 0 \\ 0 & \lambda_+ \end{pmatrix} U \quad (4)$$

其中，我们知道

$$\lambda_\pm = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + \lambda^2} \quad (5)$$

假如这个微扰后的 Hamiltonian 的本征态是 $(a_\pm, b_\pm)^T$ ，那么我们知道

$$U \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad U \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

从而

$$U^T (\equiv U^\dagger) = \begin{pmatrix} a_- & a_+ \\ b_- & b_+ \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} a_- & b_- \\ a_+ & b_+ \end{pmatrix} \quad (7)$$

而我们知道：未归一化的本征态可以写成很好的形式，即

$$\begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_- - E_1}{\lambda} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_+ - E_2}{\lambda} \end{pmatrix} \quad (8)$$

1. 验证上式

2. 计算：如果在 $t = 0$ 的时候体系处于 $|\psi(t=0)\rangle = |g^0\rangle$ ，那么其时间演化是怎样的

(Hint and solution of 2. :)

设

$$\begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} = \frac{1}{A} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_- - E_1}{\lambda} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} = \frac{1}{B} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_+ - E_2}{\lambda} \end{pmatrix} \quad (9)$$

那么，在经过 U 变换的坐标系中 ($|g\rangle, |e\rangle$ 是完整的 Hamiltonian 的本征态)， $|\psi(t=0)\rangle = |g\rangle/A + |e\rangle/B$ ，一切都变得简单了起来。 $|\psi(t)\rangle = e^{-\lambda_- t/\hbar} |g\rangle/A +$

```
In[1]:= H = {{h1, λ}, {λ, h2}};
v = Eigenvalues[H];
λ1 = v[[1]];
λ2 = v[[2]];
A = Sqrt[1 + ((λ1 - h1) / λ)^2];
B = Sqrt[1 + ((λ2 - h1) / λ)^2];
Simplify[1/A^2 + 1/B^2]

Out[7]= 1
```

图 1: Tedious Calculation Check via Mathematica

$e^{-\lambda_+ t/\hbar} |e\rangle / B$, 其中必然有 $1/A^2 + 1/B^2 = 1$ (这个验算可能会比较繁琐, Mathematica 结果见图 1)

其 $|g^0\rangle, |e^0\rangle$ 的分量为

$$\langle g^0 | \psi(t) \rangle = e^{-\lambda_- t/\hbar} \frac{1}{A^2} + e^{-\lambda_+ t/\hbar} \frac{1}{B^2} \quad (10)$$

其中,

$$A^2 = 1 + \left(\frac{\lambda_- - E_1}{\lambda} \right)^2, \quad B^2 = 1 + \left(\frac{\lambda_+ - E_1}{\lambda} \right)^2 \quad (11)$$

其模长的为

$$\begin{aligned} |\langle g^0 | \psi(t) \rangle|^2 &= \frac{1}{A^4} + \frac{1}{B^4} + \frac{2}{A^2 B^2} \cos((\lambda_+ - \lambda_-)t/\hbar) \\ &= 1 - \frac{2}{A^2 B^2} (1 - \cos((\lambda_+ - \lambda_-)t/\hbar)) \end{aligned} \quad (12)$$

而容易知道 (via Mathematica),

$$\lambda_+ - \lambda_- = 2 \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2} \right)^2 + \lambda^2}, \quad \frac{1}{A^2 B^2} = \frac{\lambda^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4\lambda^2} \quad (13)$$

于是

$$\begin{aligned} |\langle g^0 | \psi(t) \rangle|^2 &= 1 - \frac{2\lambda^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4\lambda^2} \left(1 - \cos \left(2 \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2} \right)^2 + \lambda^2} \frac{t}{\hbar} \right) \right) \\ &= 1 - \frac{4\lambda^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4\lambda^2} \sin^2 \left(\sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2} \right)^2 + \lambda^2} \frac{t}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

)

可以做一定的物理分析：当 $E_2 \rightarrow E_1$ 的时候（亦即简并情况），我们知道任何一个 Hermitian 的微扰之后的本征态都是 $(|g^0\rangle + |e^0\rangle)/\sqrt{2}$, $(|g^0\rangle - |e^0\rangle)/\sqrt{2}$. 在那种情况下，我们的原始态在新的态上的概率是一样的，换句话说，很有可能存在某些时候，两个振幅相同的新的态的 $|g^0\rangle$ 分量相干相消——而我们计算的解析结果也确实是这样，在那个时候， \sin^2 前面的因子为 1，即确实存在某些时刻体系完全处于 $|e^0\rangle$ 上。

那么，一般的非简并问题是怎么处理的呢？首先，我们要定义一些算符。这一段可能比较枯燥，但是当你看到它的效果之后就会震惊于我们之前进行的这些步骤是多么的重要。

我们首先（重新）定义我们在“基本概念^[498]”中就见到过的投影算符；不同的是，我们要对每一个态都定义如此一个投影算符：

$$\hat{\mathcal{P}}_n = |\psi_n^0\rangle\langle\psi_n^0|, \quad \hat{\mathcal{Q}}_n = 1 - \hat{\mathcal{P}}_n \quad (15)$$

显然有

$$\hat{\mathcal{P}}_n \hat{\mathcal{Q}}_n = \hat{\mathcal{Q}}_n \hat{\mathcal{P}}_n = 0, \quad [\hat{\mathcal{P}}_n, H_0] = [\hat{\mathcal{Q}}_n, H_0] = 0 \quad (16)$$

考虑定态的薛定谔方程 $(H_0 + \lambda\hat{V})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ ，我们首先把 $|\psi_n\rangle$ 拆成与原本正交的部分和与原本重合的部分，也就是说

$$|\psi_n\rangle = \hat{\mathcal{P}}_n|\psi_n\rangle + \hat{\mathcal{Q}}_n|\psi_n\rangle \quad (17)$$

其中呢，第二项是很小的微扰项，需要去求解。我们把薛定谔方程按照此思路重新展开。先看左边，

$$\begin{aligned} \text{left} &= \hat{H}_0 \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + \lambda \hat{V} \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + \hat{H}_0 \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle + \lambda \hat{V} \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle \\ &= E_n^{(0)} \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + \lambda \hat{V} \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + \hat{H}_0 \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle + \lambda \hat{V} \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle \end{aligned} \quad (18)$$

而右边可以展开成

$$\text{right} = E_n \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + E_n \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle \quad (19)$$

这两个相等，也就是说

$$\begin{aligned} &E_n^{(0)} \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + \lambda \hat{V} \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + \hat{H}_0 \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle + \lambda \hat{V} \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle \\ &= E_n \hat{\mathcal{P}}_n |\psi_n\rangle + E_n \hat{\mathcal{Q}}_n |\psi_n\rangle \end{aligned} \quad (20)$$

从而得到

$$(E_n - \hat{H}_0)\hat{\mathcal{Q}}_n|\psi_n\rangle = (E_n^{(0)} - E_n)\hat{\mathcal{P}}_n|\psi_n\rangle + \lambda\hat{V}|\psi_n\rangle \quad (21)$$

将 $\hat{\mathcal{Q}}$ 左乘式 21，我们得到

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{Q}}(E_n - \hat{H}_0)\hat{\mathcal{Q}}_n|\psi_n\rangle &= \hat{\mathcal{Q}}(E_n^{(0)} - E_n)\hat{\mathcal{P}}_n|\psi_n\rangle + \hat{\mathcal{Q}}\lambda\hat{V}|\psi_n\rangle \\ &= 0 + \hat{\mathcal{Q}}\lambda\hat{V}|\psi_n\rangle \end{aligned} \quad (22)$$

而显然 $\hat{\mathcal{Q}} = \hat{\mathcal{Q}}\hat{\mathcal{Q}}$ ，从而得到

$$\hat{\mathcal{Q}}(E_n - \hat{H}_0)\hat{\mathcal{Q}}_n\hat{\mathcal{Q}}|\psi_n\rangle = \lambda\hat{\mathcal{Q}}\hat{V}|\psi_n\rangle \quad (23)$$

含时 Time-dependent

问题分析：原子自发辐射

我们接下来分析原子自发辐射问题来回顾我们这一章学过的东西。问题背景：我们考虑部分量子化了的原子—光相互作用，其 Hamiltonian 可以用如下方程描述（已经经过部分简化，如偶极近似，旋波近似）：

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{int}, \\ H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\hbar\omega_{eg}\sigma_z, \\ H_{int} &= \hbar \sum_{\mathbf{k}} \Omega_{\mathbf{k}} \sigma_+ a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot r} + \Omega_{\mathbf{k}}^* \sigma_- a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot r}. \end{aligned} \quad (24)$$

其中， ω_{eg} 表示从激发态 $|e\rangle$ 跃迁到基态 $|g\rangle$ 的光子的角频率， $\hbar\Omega_{\mathbf{k}} \equiv -e\langle e|\mathbf{r}|g\rangle \cdot \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}$ 总之就是一个频率量纲的东西并不重要， $a_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k}}(t) = a_{\mathbf{k},0} e^{-i\omega t}$ 。

习题 2

我们试图引入相互作用汇景，

$$H^I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H_{int} e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (25)$$

明显，会带来 nontrivial 的项的是如下两项

$$\begin{aligned} e^{i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} t} a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} t} &= a_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t} \\ e^{i\omega_{eg}\sigma_z t/2} \sigma_+ e^{i\omega_{eg}\sigma_z t/2} &= \sigma_+ e^{-i\omega_{eg} t} \end{aligned} \quad (26)$$

试推导这两个式子，并进而写出 Hamiltonian $H^I(t)$ 。

我们有

$$H^I(t) = \hbar \sum_{\mathbf{k}} [\Omega_{\mathbf{k}} \sigma_+ a_{\mathbf{k}} e^{i(\omega_{eg} - \omega_{\mathbf{k}})t} + h.c.] \quad (27)$$

角动量

角动量问题包含一般的轨道角动量，和更有趣点的自旋，两者能产生磁矩，却有着不一样的产生系数（g因子）。当然，如果不考虑磁效应的话，角动量有自己的一般理论；但是如果考虑磁效应，利用角动量来解决很多磁学问题是常见的，一种极端简化的模型就是 Ising Model 和 Heisenberg Model，会在讨论磁学问题的时候详细分析。

一般理论 General Ideas

角动量的问题其实相对来说更独立一点。它有自己的一套体系。本部分将从基本的数学结构开始建立角动量理论，其中会逐步的引入高级一点的数学描述（群描述），虽然这部分知识并不难，但是却很多时候不容易理解。

经典角动量的直观推广

很容易证明，经典的角动量 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ 对应的算符是一个很个性的算符：它在直角坐标中的三个分量都不对易，而且它们三个都是平权的。我们知道，能够同时确定的物理量必须满足：它们有共同的本征态，换句话说，它们彼此对易。因此，我们在这三个分量里面只能有一个能确定。既然平权，我们不妨取为 z 方向分量。计算仍然给出这三个方向的角动量分量算符，和总角动量的平方这个标量算符也是对易的⁷。

写出来就是

$$[\hat{L}_z, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0 \quad (1)$$

$$[\hat{L}_a, \hat{L}_b] = i\hbar\epsilon_{abc}L_c \quad (2)$$

其中，后者是个标量算符。本章在后面很可能习惯性的把 \hbar 略去，请注意。

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (3)$$

⁷这一段里的结论的验算可以参考后面的练习。

于是，如果仅在角动量框架内的话，我们可以取可以同时确定的本征态 $|l, m\rangle$ ，其中

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |\hbar^2 l, m\rangle \quad (4)$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle \quad (5)$$

其中呢， $l(l+1)$ 只是写起来比较带感而已，至此我们没给出任何更具体的关于本征值的结论。

习题 1

考虑到角动量算符的定义，

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \quad (6)$$

(1) 请验证式 1 和式 2，其中需要计算

$$[\hat{L}_a, \hat{r}_b] = ? \quad [\hat{L}_a, \hat{p}_z] = ? \quad (7)$$

(2) 计算矢量算符

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = ? \quad (8)$$

可以像前面处理一维谐振子那样处理体系，我们定义阶梯算符为

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (9)$$

这个算符有什么好处呢？我们来做一些简单的计算。一个重要的关系就是

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hat{L}_{\pm} \quad (10)$$

这个的推导很简单，可以自己完成。我们要讲的，是 $L_{\pm}|l, m\rangle$ 这个东西，它也是 L_z, \mathbf{L}^2 的本征态。前者很简单，我们只需要计算下面这个式子：

$$L_z L_{\pm} |l, m\rangle = (L_{\pm} L_z \pm L_z L_{\pm}) |l, m\rangle = (m \pm 1) L_{\pm} |l, m\rangle \quad (11)$$

由此我们可以看出，很有可能

$$L_{\pm} |l, m\rangle \stackrel{?}{=} c |l, m \pm 1\rangle \quad (12)$$

其中 c 是一个待确定的数, 可以明确的知道它和 l, m 有关. 只需要确定它是不是 \mathbf{L}^2 的本征值为 l 的本征态就行了. 我们可以去计算

$$\mathbf{L}^2 L_{\pm}|l, m\rangle \quad (13)$$

这次, 我们得先做点工作: 我们直接重新写 \mathbf{L}^2 的表达形式:

$$\mathbf{L}^2 = L_z(L_z + 1) + L_- L_+ \quad (14)$$

由式 10, 很容易证明这个写法满足

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 L_{\pm}|l, m\rangle &= L_z(L_z + 1)L_{\pm}|l, m\rangle + L_- L_+ L_{\pm}|l, m\rangle \\ &= (m \pm 1)(m + 1 \pm 1)L_{\pm}|l, m\rangle + L_- L_+ L_{\pm}|l, m\rangle \end{aligned} \quad (15)$$

验算得到

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hat{L}_z \quad (16)$$

由此, 我们分别验算 L_+, L_- . 先看 L_+

$$L_- L_+ L_+ = (L_+ L_- + 2L_z)L_+ = L_+(L_- L_+) - 2L_z L_+ \quad (17)$$

从而

$$\begin{aligned} &\mathbf{L}^2 L_+|l, m\rangle \\ &= (m + 1)(m + 2)L_+|l, m\rangle + (L_+(L_- L_+) - 2L_z L_+)|l, m\rangle \\ &= (m + 1)(m + 2)L_+|l, m\rangle + (L_+(\mathbf{L}^2 - L_z(L_z + 1)) - 2(m + 1)L_+)|l, m\rangle \\ &= [(m + 1)(m + 2) + l(l + 1) - m(m + 1) - 2(m + 1)]L_+|l, m\rangle \\ &= l(l + 1)L_+|l, m\rangle \end{aligned} \quad (18)$$

另一方面, L_- 满足

$$L_- L_+ L_- = L_-(L_- L_+ - 2L_z) = L_-(L_- L_+) - 2L_- L_z \quad (19)$$

从而

$$\begin{aligned} &\mathbf{L}^2 L_-|l, m\rangle \\ &= m(m - 1)L_-|l, m\rangle + (L_-(L_- L_+) + 2L_- L_z)|l, m\rangle \\ &= m(m - 1)L_-|l, m\rangle + (L_-(\mathbf{L}^2 - L_z(L_z + 1)) + 2mL_-)|l, m\rangle \\ &= [m(m - 1) + l(l + 1) - m(m + 1) + 2m]L_-|l, m\rangle \\ &= l(l + 1)L_-|l, m\rangle \end{aligned} \quad (20)$$

啊，总之，我们得到了我们喜欢的式子

$$L_{\pm}|l, m\rangle = c|l, m \pm 1\rangle \quad (21)$$

至于求 c 如何求，这个还是很有技巧的，我们作为练习引导大家一步步求出来。请参考[习题 2](#)，结论为

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle \quad (22)$$

接下来我们看一个实际的例子，理解一下我们干了什么。

例 1

有一个体系，哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - \hat{L}_z = \sum_{l,m} E_0 \hat{L}_- \hat{L}_+ \quad (23)$$

E_0 是常数，它的本征态显然为各个角动量态 $|l, m\rangle$ ，假设每个态的能量为 $E_{l,m}$ ，可以写成

$$\hat{H} = \sum_{l,m} E_{l,m} |l, m\rangle \langle l, m| \quad (24)$$

而通过插入 resolution of identity，哈密顿量可以写成

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{l,m} E_0 \hat{L}_- \hat{L}_+ = \sum_{l,m} E_0 \hat{L}_- \hat{L}_+ |l, m\rangle \langle l, m| \\ &= \sum_{l,m} E_0 [l(l+1) - m(m+1)] |l, m\rangle \langle l, m| \end{aligned} \quad (25)$$

从而轻易得出

$$E_{l,m} = E_0 [l(l+1) - m(m+1)] \quad (26)$$

角动量叠加原理

这一部分的内容实际上可以说是不涉及高深数学知识的角动量的最复杂的知识了。

习题 2

如何求[式 21](#) 中的系数 c ？换句话说，如何求

$$\langle l, m \pm 1 | L_{\pm} | l, m \rangle \quad (27)$$

这实际上还包含一个被称为 Condon-Shortley convention 的事情在影响这个 c . 它叫 convention 是说明它确实有一些待确定的自由度, 就是这个 c 的相位. 我们后面会看到.

注意到, 由算符的 Hermitianity,

$$\langle l, m | L_{\pm}^{\dagger} | l, m \pm 1 \rangle = \langle l, m | L_{\mp} | l, m \pm 1 \rangle = c^* \quad (28)$$

即

$$L_{\mp} |l, m \pm 1\rangle = c^* |l, m\rangle \quad (29)$$

或者说

$$L_{\mp} L_{\pm} |l, m\rangle = c^* c |l, m\rangle \quad (30)$$

这一下就简单了, 因为我们注意到, 在 \mathbf{L}^2 里面也有类似的项. 分开来看:

$$L_- L_+ = \mathbf{L}^2 - L_z(L_z + 1) \quad (31)$$

于是

$$L_+ |l, m\rangle = c |l, m+\rangle, |c|^2 = l(l+1) - m(m+1) \quad (32)$$

类似的,

$$L_+ L_- = L_- L_+ + 2L_z = \mathbf{L}^2 - L_z(L_z - 1) \quad (33)$$

于是

$$L_- |l, m\rangle = c |l, m-1\rangle, |c|^2 = l(l+1) - m(m-1) \quad (34)$$

著名的 Condon-Shortley convention 规定,

$$c = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \quad (35)$$

从而

$$L_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle \quad (36)$$

磁学问题 Magnetic Problems

这部分的问题, 一定程度上参考了 Auerbach 的书 [6].

冷原子基本知识

研究冷原子主要是两方面（其中后者更重要）：原子的内部结构，和原子原子之间的相互作用。

首先研究原子内部结构，我们可以先写出单原子的 Hamiltonian，

$$\begin{aligned}\hat{H}_{at} = & - \sum_i \left(\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2\mu_i} + V_{ei}(\mathbf{r}) \right) + \sum_{i < j} V_{ee}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \\ & + \sum_i [\alpha_f \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{L}_i + \alpha_{hf} (\mathbf{S}_i + \mathbf{L}_i) \cdot \mathbf{I}_i]\end{aligned}\quad (1)$$

如果只考虑第一项，也就是说每个电子之间是没有相互作用的，得到的是很经典的能级，我们中学就学过。第二项的作用是给了一个修正，当然一般的表达式不容易写出来，但是我们知道能量的修正可以写成如下形式

$$E = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2(n + \Delta)^2}, \quad \Delta = \Delta(n, l), \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \quad (2)$$

除此之外，第二项还能提供一个我们所知的 Hund 规则，单重态 $\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)$ 在离的很近的时候波函数是基本没有的，也就是提供了一个 repulsive 的能量；这也就是说三重态相比单重态能量更低。

第三项，正如他的名字所暗示的，包含着精细结构 (fine) 和超精细结构 (hyperfine)

原子物理里面，一个很基本的概念就是 Zeeman 效应，这是实验上观测到，并在后来基于量子理论建立了正确的描述；很通俗而且愚蠢的 Zeeman 项（系数）的解释是：相对的，原子核（带电）绕电子转圈，引发磁场，与电子的自旋相互作用。

$$E \propto -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}} = \frac{Ze^2\mu_0}{8\pi m_0^2 r^3} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}) \quad (3)$$

这一项相比与之前大概是 10^{-3} 的量级；而电子整体的角动量与核自旋的相互作用是超精细结构，相比精细结构是 10^{-3} 的量级。

物理学对原子进行分类，主要有三类（实际上有很多更精细的分化，但在冷原子范畴内我们并不关心原子形成的晶体的结构：我们希望在极低温度的情况下，原子仍然能保证不会结晶而是气态；这也是冷原子的密度极低，十分稀薄从而少体散射就适用的一个原因）：

碱金属：锂钠钾铷铯钫. $^{2S+1}L_J$ 表示的话，这些原子的基态都是 $^2S_{1/2}$, 价电子都是 ns^1 , 区别主要体现在核自旋上（不同的同位素）. $^{87}\text{Rb}, ^{23}\text{Na}$ 是最常见最爱研究的玻色气体，而 $^{40}\text{K}, ^6\text{Li}$ 则是最常见的费米气体. Fermion or Boson 主要看核自旋是整数还是半整数.

作为例子看一个问题：

$^{87}\text{Rb}, ^6\text{Li}$ 在磁场 $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ 中， Hamiltonian 可以写成

$$\hat{H} = B(\mu_B J_z + \mu_N I_z) + \alpha(\mathbf{J} \cdot \mathbf{I}) \quad (4)$$

这个的处理方法实际上和传统的 LS 耦合基本一样：引入一个新的参数 $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$, 从而保证

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{I} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^2 - \mathbf{J}^2 - \mathbf{I}^2) = \frac{1}{2}(F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)) \quad (5)$$

从而能谱就是

$$E = B(\mu_B J_z + \mu_N I_z) + \frac{\alpha}{2}(F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)) \quad (6)$$

除此之外，我们还可以看到另外的东西. 这个 Hamiltonian 不好解，但是我们可以用 $|F, m_F\rangle$ 来展开，并且把超精细结构的项作为 perturbation 来处理.

$^{87}\text{Rb} : I = \frac{3}{2}; ^6\text{Li} : I = 1; J = \frac{1}{2}$

对于 ^{87}Rb 来说，能够得到的 $F = 2, 1$. 其本征态有两系列 $F = 2$: $|2, 0\rangle, |2, \pm 1\rangle, |2, \pm 2\rangle$ $F = 1$: $|1, 0\rangle, |1, \pm 1\rangle$

但是我们知道， $|F, m_F\rangle$ 必须利用 CG 系数知道它实际上是如何被组合成的，才能用我们的 Hamiltonian 计算.

$$|2, 2\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (7)$$

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (8)$$

$$|2, 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (9)$$

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (10)$$

$$|2, -2\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (11)$$

$$|1, 1\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (12)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (13)$$

$$|1, -1\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (14)$$

这样写出来的 Hamiltonian 是一个 8×8 的矩阵，当然大部分矩阵元都是 0，但是对角项和一些部分也不是 0。利用一些技巧，我们知道只有拥有同样的 m_F 的两个态之间才有矩阵元，凭借惊人的毅力，我们把这个矩阵写出来，如图 1（本人的计算功底很差...如果算错了不要打我⁸）：

$$\begin{pmatrix} (\frac{3}{2}\mu_B + \frac{1}{2}\mu_N)B + A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_1 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(\frac{3}{2}\mu_B + \frac{1}{2}\mu_N)B + A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -(\frac{3}{2}\mu_B + \frac{1}{2}\mu_N)B + A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B & 0 & 0 & 0 & (\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B & 0 & 0 & 0 & -(\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_2 \end{pmatrix}$$

图 1：算错的矩阵

$$\begin{aligned} A_1 &\equiv \frac{3}{4}\alpha = \frac{\alpha}{2} \left(2 \times 3 - \frac{3}{2} \times \frac{5}{2} - \frac{1}{2} \times \frac{3}{2} \right) \\ A_2 &\equiv -\frac{5}{4}\alpha = \frac{\alpha}{2} \left(1 \times 2 - \frac{3}{2} \times \frac{5}{2} - \frac{1}{2} \times \frac{3}{2} \right) \end{aligned} \quad (15)$$

发现，只有在 $|2, 1\rangle, |1, 1\rangle$ 和 $|2, -1\rangle, |1, -1\rangle$ 之间存在 off-diagonal 成分。相当于我们需要对角化如下两个 2×2 矩阵：

$$\begin{pmatrix} (\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_1 & \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B & (\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_2 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$\begin{pmatrix} -(\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_1 & \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B \\ \frac{\sqrt{3}}{4}(\mu_B - \mu_N)B & -(\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N)B + A_2 \end{pmatrix}$$

得到这两部分的本征值分别应该为

$$\lambda_{1,2/1} = -\left(\frac{3}{4}\mu_B - \frac{1}{4}\mu_N\right)B + \frac{A_1 + A_2}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(A_1 - A_2)^2 + \frac{3}{4}(\mu_B - \mu_N)^2 B^2} \quad (17)$$

⁸注意：确实发现算错了，但是懒得改，领会精神 orz

$$\lambda_{-1,2/1} = \left(\frac{3}{4}\mu_B + \frac{1}{4}\mu_N \right) B + \frac{A_1 + A_2}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(A_1 - A_2)^2 + \frac{3}{4}(\mu_B - \mu_N)^2 B^2} \quad (18)$$

这两个本征值的行为在 B 非常小和相对大一点的时候有着截然不同的表现. 在很小的时候, 也就是说 $B \ll |A_1 - A_2|/\sqrt{3}(\mu_B - \mu_N)$, 我们可以把根号内进行展开, 得到

$$\sqrt{\frac{1}{4}(A_1 - A_2)^2 + \frac{3}{4}(\mu_B - \mu_N)^2 B^2} \approx \frac{1}{2}|A_1 - A_2| \left(1 + \frac{3}{2} \frac{(\mu_B - \mu_N)^2}{(A_1 - A_2)^2} B^2 \right) \quad (19)$$

得到了一个 Zeeman effect 的二次 shift. 而大的磁场下超精细结构 A_1, A_2 很小, 几乎忽略, 主要修正项都是 $\frac{\sqrt{3}}{2}\Delta\mu B$, 是线性的 Zeeman shift.

当然这只是一个关于二次 Zeeman shift 的例子, ${}^6\text{Li}$ 同理, 有兴趣的同学可以进行练习.

碱金属原子的另一个特点就是明显的第一激发态的劈裂. 第一激发态本身应该是 $L = 1$, 也就是 2P . 但是如果有了 LS 耦合, 不同的 J 会有不同的精细结构劈裂. 最简单的就是大家都实验过的 ${}^3\text{Na}$ 黄光双线. 当然如果考虑超精细结构还会更进一步分裂, 但是那个效应太小不容易观察到.

要注意, 在基态和这两个激发态之间的光跃迁是实验上对(冷)原子进行捕捉和操作的基本手段. 冷的目的是他们基本没有很大的动能, 这样就少去了很多的复杂因素(反冲能量损失、多普勒效应等).

最后一类有趣的原子就是高自旋原子. 不过我并不对这个感兴趣, 就先不写简介了.

接下来讨论一下上面提到的光跃迁过程——说白了就是一个原子在偶极作用下的行为.

光引入的附加 Hamiltonian 是:

$$\hat{H}_d = \mathbf{d} \cdot \mathbf{E} = d_j E_j^0 \cos(\omega t - \phi_j) \quad (20)$$

其中 $\mathbf{d} = \sum_\alpha (-e\mathbf{r}_\alpha)$, 代表原子的偶极矩.

比如, 我们研究碱金属的问题. 相对的, 我们研究的是从 ${}^2S_{1/2}$ 到 ${}^2P_{3/2}, {}^2P_{1/2}$ 的跃迁. 两个激发态可以用 D_1, D_2 表示, 能级差是有精细机构带来的; 一个数量级上的能量估计是: $\Delta_{sp} \gg \Delta_f \gg \Delta_{hf}$. 显然, 这里我们可以忽略掉超精细结构.

我们定义投影算符, 把态投影到基态或者激发态上. 显然这里可以使用

$$\mathcal{P}_g = \frac{\mathbf{L}^2}{2\hbar}, \quad \mathcal{P}_e = 1 - \mathcal{P}_g \quad (21)$$

而体系的 Hamiltonian 在无外场的时候则是

$$\hat{H} = \hat{H}_{at} + \hat{H}_d \quad (22)$$

我们前面分析了，无外场

$$\hat{H}_{at} = E_e \mathcal{P}_e + \frac{A_f}{\hbar^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (23)$$

这个解释就是：我们把基态能量扔了，而且不去管那些关于主量子数 n 的细节；在我们需要考虑的范围内，Hamiltonian 就可以写成你在激发态上的成分乘以激发态的能量 E_e 。显然，这个 Hamiltonian 并不包含在基态和激发态之间的任何 coupling.

我们定义一个算符

$$\mathcal{U}_{rot}(t) = e^{-i\omega t \mathcal{P}_e} = \mathcal{P}_g + \mathcal{P}_e e^{-i\omega t} \quad (24)$$

这算符相当于做一个 unitary 的变换⁹，我们现在看外场怎样变换

$$\hat{H}'_d = \mathcal{U}_{rot}^\dagger(t) \hat{H}_d \mathcal{U}_{rot} \quad (26)$$

显然的，我们知道无论基态还是激发态都没有特殊的极化方向， $\langle d_j \rangle = 0$ ，即

$$\mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_g = \mathcal{P}_e d_j \mathcal{P}_e = 0 \quad (27)$$

而另一方面， E_j 又是外场，不与投影算符 \mathcal{P} 有对易关系。因此，我们很容易的可以进行一步化简：

$$\hat{H}'_d = E_j^0 \cos(\phi_j - \omega t) (\mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e e^{-i\omega t} + \mathcal{P}_e e^{i\omega t} d_j \mathcal{P}_g) \quad (28)$$

而

$$\cos(\phi_j - \omega t) = \frac{e^{i(\phi_j - \omega t)} + e^{-i(\phi_j - \omega t)}}{2} \quad (29)$$

定义 $\tilde{E}_j = E_j^0 e^{i\phi_j}$ ，我们得到

$$\hat{H}'_d = \frac{1}{2} \left(\tilde{E}_j e^{-i\omega t} + \tilde{E}_j^* e^{i\omega t} \right) (\mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e e^{-i\omega t} + \mathcal{P}_e e^{i\omega t} d_j \mathcal{P}_g) \quad (30)$$

⁹实际上这就类似相互作用绘景里面常用的样子给反过来而已

$$U_I = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} = e^{i\omega_e t \mathcal{P}_e} \quad (25)$$

在近似共振的时候 $\omega \sim \omega_e = E_e/\hbar$, 某种程度上可以忽略到以 $\pm 2i\omega t$ 做震荡的成分（被称为 Rotating Wave Approximation RWA¹⁰），于是我们得到

$$\hat{H}'_d \approx \frac{1}{2} \left(\tilde{E}_j \mathcal{P}_e d_j \mathcal{P}_g + \tilde{E}_j^* \mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e \right) \quad (31)$$

因为包含精细结构 $A_f \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}/\hbar^2$ 的项已经很小了，其在这个 Unitary 变换下的变化可以忽略。而另一方面，一个 unitary 的变换，如果是含时的，则会带来一个变化，是由于要保证 Hamiltonian 的定义正确¹¹

$$|\psi\rangle \rightarrow \mathcal{U}(t)|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad (32)$$

$$H'|\psi'\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi'\rangle = i\hbar \frac{d\mathcal{U}(t)}{dt}|\psi\rangle + i\hbar \mathcal{U}(t) \frac{d}{dt}|\psi\rangle \quad (33)$$

而 $|\psi\rangle = \mathcal{U}^\dagger(t)|\psi'\rangle$ ，故

$$H'|\psi\rangle = \left(i\hbar \frac{d\mathcal{U}(t)}{dt} \mathcal{U}^\dagger(t) + \mathcal{U}(t) H \mathcal{U}^\dagger(t) \right) |\psi'\rangle \quad (34)$$

从而

$$H' = i\hbar \frac{d\mathcal{U}(t)}{dt} \mathcal{U}^\dagger(t) + \mathcal{U}(t) H \mathcal{U}^\dagger(t) \quad (35)$$

$$\hat{H}'_{at} = E_e \mathcal{P}_e - \hbar\omega \mathcal{P}_e + \frac{A_f}{\hbar^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (36)$$

我们研究对基态的二阶微扰。微扰理论的基本知识可以参考 Prof Fa, Wang 的讲义，见 [7]。

能量的修正应该是

$$\Delta E = \langle g | H'_d | g \rangle + \frac{\langle g | H'_d | e \rangle \langle e | H'_d | g \rangle}{0 - E'_e} \quad (37)$$

可以一目了然的看出来， H'_d 这种左边右边有不同的投影算符 \mathcal{P} 的，第一项为 0；而第二项可以简化成

$$\Delta E = -\langle g | H'_d | e \rangle H'^{-1}_{at} \langle e | H'_d | g \rangle \quad (38)$$

¹⁰适用条件：

- 场几乎共振，能级差 $E_e \sim \hbar\omega$
- 场很弱，具体的话要满足 $E_j d \ll \hbar\omega$

¹¹注意：这里我的这个 note 写的比较乱，但是我觉得可以阅读；我也懒得改了。

因为这里我们实际上扔了一个算符进去，并不应该写成这样子，而应该写成一个仅对基态有用的有效 Hamiltonian:

$$H_{\text{eff}} = -\mathcal{P}_g H'_d \mathcal{P}_e H'^{-1} \mathcal{P}_e H'_d \mathcal{P}_g \sim -\mathcal{P}_g H'_d H'^{-1}_{at} H'_d \mathcal{P}_g \quad (39)$$

其中近似是由于：我们只希望得到二阶的修正，所以 H'_{at} 基本只作用在激发态上，两个对激发态的投影算符可以忽略了。

来咱们继续，虽然发生了很多令人伤心的事情但是冷原子的学习还是要继续的。

我们定义一个二阶矩阵（算符）：

$$\mathcal{D}_{ij} = \mathcal{P}_g d_i \hat{H}_{at}^{-1} d_j \mathcal{P}_g \quad (40)$$

这样的话，考虑到

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= -\mathcal{P}_g \hat{H}'_d \hat{H}'^{-1}_{at} \hat{H}'_d \mathcal{P}_g \\ &= -\frac{1}{4} \mathcal{P}_g \left(\tilde{E}_j \mathcal{P}_e d_j \mathcal{P}_g + \tilde{E}_j^* \mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e \right) \hat{H}'^{-1}_{at} \left(\tilde{E}_i \mathcal{P}_e d_i \mathcal{P}_g + \tilde{E}_i^* \mathcal{P}_g d_i \mathcal{P}_e \right) \mathcal{P}_g \end{aligned} \quad (41)$$

显然，红色的两项包含诸如 $\mathcal{P}_e \mathcal{P}_g$, $\mathcal{P}_g \mathcal{P}_e$ 这种 (\tilde{E} 这种外场在这时候和他们都没有对易关系) 的，显然 = 0，所以最后我们有对基态的等效 Hamiltonian

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{4} \mathcal{P}_g \sum_j \tilde{E}_j^* \mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e \hat{H}'^{-1}_{at} \sum_i \tilde{E}_i \mathcal{P}_e d_i \mathcal{P}_g \mathcal{P}_g \quad (42)$$

或者，利用我们刚刚定义的二阶矩阵，我们有

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{4} \sum_{i,j} \tilde{E}_i^* \mathcal{D}_{ij} \tilde{E}_j \quad (43)$$

可以把这个 \mathcal{D}_{ij} 拆成三个部分：表示 trace 的各项同性矩阵 $\mathcal{D}_{ij}^0 = \frac{1}{3} \text{Tr}(\mathcal{D}) \delta_{ij}$, 全反对称的 $\mathcal{D}_{ij}^1 = \frac{1}{2} (\mathcal{D}_{ij} - \mathcal{D}_{ji})$, 和全对称无 trace 的 $\mathcal{D}_{ij}^2 = \frac{1}{2} (\mathcal{D}_{ij} + \mathcal{D}_{ji}) - \mathcal{D}_{ij}^0$, 于是

$$\mathcal{D}_{ij} = \mathcal{D}_{ij}^0 + \mathcal{D}_{ij}^1 + \mathcal{D}_{ij}^2 \quad (44)$$

我们接下来分析一下这种效应带来的 splitting，作为我们对于原子—光相互作用的结束。

1. 极端情况下，可以忽略精细结构，也就是说 $A_f = 0$. 这时候 \mathcal{D}_{ij} 就不再是一个很复杂的算符，而是简单地

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{1}{\Delta_e} \mathcal{P}_g d_i d_j \mathcal{P}_g \quad (45)$$

主要到这里两个到基态的投影算符使得中间的位置算符 d_j 并没有明显的极化效应，所以 $\mathcal{D}_{ij} \propto \delta_{ij}$, $\mathcal{D}_{ij}^1 = \mathcal{D}_{ij}^2 = 0$.

而

$$\mathcal{D}_{ij}^0 = \frac{1}{3\Delta_e} \mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e \mathcal{P}_e d_j \mathcal{P}_g \delta_{ij} = \frac{1}{3\Delta_e} |\mathcal{P}_g d_j \mathcal{P}_e|^2 \delta_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} -4u_s \delta_{ij} \quad (46)$$

其中，很显然的可以得到

$$u_s = -\frac{1}{12\Delta_e} |\langle l=0 | \mathbf{d} | l=1 \rangle|^2 \quad (47)$$

因此，有效 Hamiltonian 为

$$\hat{H}_{\text{eff}} = u_s \mathbf{E}^2 \quad (48)$$

这说明什么呢？这说明没有精细结构的话，光是没有办法改变电子的自旋的（Hamiltonian 里面没有包含自旋与其它参数耦合的项）；而且，这种作用并不依赖光的偏振，而仅仅和光的强度有关 (\mathbf{E}^2)；利用这点可以很好的进行实验上的光陷阱，从而捕捉原子；而 Δ_e 实际上与原子的速度有关 (Doppler 效应)，于是说给激光制冷提供了一个实验的理论指导.

2. 考虑精细结构（当然很小的精细结构）的时候的能级分裂

注意到，

$$\hat{H}^{-1} \equiv (\hat{H}_0 + \hat{V})^{-1} = \hat{H}_0^{-1} - \hat{H}_0^{-1} \hat{V} \hat{H}^{-1} \quad (49)$$

¹²我们可以得到

$$\hat{H}_{at} = \frac{1}{\Delta_e} \mathcal{P}_e - \frac{1}{\Delta_e} \frac{A_f}{\hbar^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \hat{H}_{at}^{-1} \quad (51)$$

¹²这里可以通过这种方法检验：

$$(\hat{H}_0^{-1} - \hat{H}_0^{-1} \hat{V} \hat{H}^{-1}) \hat{H} = 1 + \hat{H}_0^{-1} \hat{V} - \hat{H}_0^{-1} \hat{V} = 1 \quad (50)$$

从而，我们可以分出来和之前一样的 \mathcal{D}_{ij} 部分，和精细结构带来的效应

$$\mathcal{D}_{ij} = \mathcal{P}_g d_i \frac{1}{\Delta_e} d_j \mathcal{P}_g - \alpha \mathcal{P}_g d_i \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} d_j \mathcal{P}_g, \quad \alpha \equiv A_f / (\hbar^2 \Delta_e) \quad (52)$$

角动量算符和位置算符有着明显的对易关系：

$$[L_i, d_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} d_k \quad (53)$$

因此

$$d_i \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} d_j = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} d_i d_j + [\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, d_i] d_j \quad (54)$$

第一项很显然等于 0，因为这是作用在基态上的，而基态的话 $L = 0, j = s, \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = j(j+1) - s(s+1) = 0$ ，因此我们有

$$\mathcal{D}_{ij} = -4u_s \delta_{ij} - i\alpha \hbar \epsilon_{ilm} S_l \mathcal{D}_{mj} \quad (55)$$

做一级近似，也就是把上面式子的第二项中 $\mathcal{D}_{mj} \sim -4u_s \delta_{ij}$ ，于是

$$\mathcal{D}_{ij} = -4u_s \delta_{ij} - 4i u_s \alpha \hbar \epsilon_{ijl} S_l \quad (56)$$

注意到，这里面，第一项对能量的贡献是量级 $1/\Delta_e$ 的，而第二项是 $1/\Delta_e^2$. 热效应同样也是 $1/\Delta_e^2$ ，于是没办法在保持这种相互作用的程度而减小热效应. 化简可以得到

$$\hat{H}_{\text{eff}} = u_s |\mathbf{E}|^2 + i\alpha \hbar u_s (\mathbf{E}^* \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{S} \quad (57)$$

可以注意到，这样的光会使得自旋的极化. 例如，圆偏振， $\mathbf{E} = E_0(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)$ ，我们会发现

$$\mathbf{E}^* \times \mathbf{E} = 2iE_0^2 \mathbf{e}_z \quad (58)$$

不难想象，这在我们将来操作冷原子的时候有很好的应用潜力.

两个原子间的相互作用

冷原子有他很独到的地方：

- 1. 很冷，所以粒子动能很低，我们只需要一个低能理论

- 2. 相互作用很弱，很多时候都是 short-range ($\propto e^{-kr}$) 的，有一个截止距离 r_0
- 3. 原子非常稀薄，可以暂时不使用多体理论，而是使用少体散射解决一定问题

在更深入的研究之前，我们先回顾一下两体散射过程的量子力学（场论下的散射问题我们这里不详细谈）。我们很显然可以通过并非二次量子化而是基于波函数的量子力学来处理。

散射问题的一般解法是分波法，也就是

$$\Psi(r) = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\chi_{kl}(r)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (1)$$

其中呢， χ_{kl} 是分波之后的成分，需要进一步求解，而 $P_l(\cos \theta)$ 则是勒让德函数。 k 是受能量调控的。 $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ 。很容易的写出径向薛定谔方程：

$$\frac{d^2 \chi_{kl}(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_{kl}(r) + \frac{m}{\hbar^2} (E - V(r)) \chi_{kl}(r) = 0 \quad (2)$$

我们感兴趣的，由于所研究的是低能范围，更偏向于 $l = 0$ 的 S 波成分，也就是

$$\frac{d^2 \chi_{k0}(r)}{dr^2} + \frac{m}{\hbar^2} (E - V(r)) \chi_{k0}(r) = 0 \quad (3)$$

这个的解在大于我们的截止半径 r_0 的时候一目了然，就是简单地 $\sin(kr + \delta_k)$ 嘛；然而这个 δ 究竟是多少呢？这就要取决于在小于截止半径内的具体势能形式了。不过要注意，这里的这个截止半径确实是很关键的一个要求；但是，有的时候即使并不是 e^{-kr} 而是 $r^{-\alpha}$ 的形式的势能，在某些情况下我们的分析也是正确的，在本文的后半部分会涉及这一点。

关于这个 δ_k 的研究，我们实际上可以通过一个与归一化系数无关的办法，亦即

$$\frac{\chi'(r_0^+)}{\chi(r_0^+)} = \frac{k}{\tan(kr_0 + \delta_k)} \sim \frac{k}{\tan(\delta_k)} \stackrel{def}{=} -\frac{1}{a_s} \quad (4)$$

其中，这个 a_s 是人为定义的一个参数，叫做散射长度；其一个很直观的物理意义就是：在远处波函数的行为可以认为与一个半径为 a_s 的硬球模型一样（其势能为 $V(r) = (1 - \theta(r - a_s)) \times +\infty$ ）。

显然, 对于低能散射(小的 k), $-ka_s = \tan \delta_k \sim \delta_k$, 也就是说, phase shift $\delta_k \propto k$. 当然随着 k 变得不那么小, 这一现象也逐渐偏离; 这里大家需要有一个数量级的感觉, 也就是说, 在 δ_k 接近饱和(趋近于 $\pi/2$) 的时候, k 仍然是相对来说很低能的一个效应.

当然, 这里面最重要的参数还是 a_s , 尤其是我们这里并没有限制 a_s 的任何取值, 它可正可负, 反正就是一个参数.

当然, 我们这里只是描绘了 $l = 0$ 的情况; 而事实上, 对于任意的 l , 其 phase shift 的计算会得到 $\propto k^{2l+1}$ 的样子, 就像这里的线性关系.

既然我们这里已经得到了 Ψ 的形式, 我们把它做 $r > r_0$ 的展开, 并考虑到这时候 r 实际上已经很大了可以只取某一些项:

$$\Psi(r) = \frac{\sin(kr + \delta_k)}{kr} \rightarrow \cos \delta_k + \frac{1}{kr} \sin \delta_k = \frac{\sin \delta_k}{k} \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{a_s} \right] \quad (5)$$

可以看到, $\Psi(a_s) = 0$. 这对不同的 k 都是一样的. 这是一个散射长度的物理意义.

之前我们也提到过, 只要有相同的 δ_k , 那么对于不同的势能形式, 其原子远处的性质也是一样的. 于是我们来研究一个很有趣的 toy model:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < r_0 \\ 0 & r \geq r_0 \end{cases} \quad (6)$$

于是 Schrödinger 方程就是

$$\chi'' + \frac{m}{\hbar^2}(E + V_0)\chi = 0 \quad r < r_0 \quad (7)$$

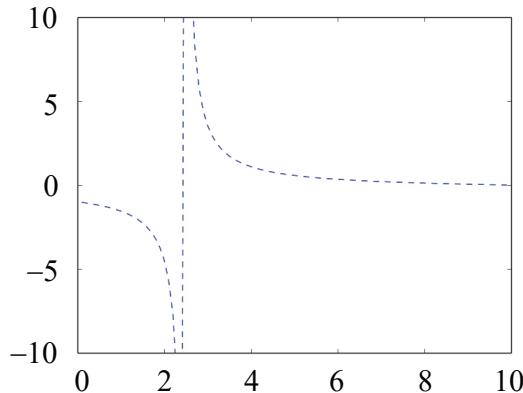
$$\chi'' + \frac{m}{\hbar^2}(E)\chi = 0 \quad r \geq r_0 \quad (8)$$

其中, E 表示由于是低能散射, 所以能量很小可以忽略. 如此我们就可以写出连接条件

$$\sqrt{\frac{V_0 m}{\hbar^2}} \cot \left(\sqrt{\frac{V_0 m}{\hbar^2}} r_0 \right) = -\frac{1}{a_s} \quad (9)$$

如此, 我们可以得到一个 a_s 和 V_0 的关系:

$$a_s = -\sqrt{\frac{\hbar^2}{V_0 m}} \tan \left(\sqrt{\frac{V_0 m}{\hbar^2}} r_0 \right) \quad (10)$$

图 1: a_s 和 V_0 的关系

大致如图 1, 横坐标 V_0 , 纵坐标 a_s . 可以看到, a_s 会迅速的变成负无穷, 然后再变成正无穷.

当然这是一个针对我们已经知道势能形式的验证; 如果想要得到一些实验上可以测量的东西的话, 就是

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) \frac{e^{i\delta_{lk}} \sin \delta_{lk}}{k} P_l(\cos \theta) \right|^2 \quad (11)$$

之前说的时候我们注意到这个 r_0 是很重要的一个假设; 但是如果我们有一个长程力会发生什么呢? 实际上, 有人证明, 如果力的作用是 $r^{-\alpha}$ 的形式, 那么对于 l 波,

$$\begin{aligned} \tan \delta_k &\propto k^{2l+1} (2l+1 \leq \alpha - 2) \\ \tan \delta_k &\propto k^{\alpha-2} (2l+1 \geq \alpha - 2) \end{aligned} \quad (12)$$

提一句, l 越高, δ_k 与 k 的关系幂次越高, 所以相移就 $\rightarrow 0$, 表明几乎没有相互作用. 而我们处理的 s 波问题, 要求 $\alpha > 3$. van der waals 相互作用是 $ar^{-5} + br^{-11}$ 的, 显然满足要求.

如果仔细的考虑分波问题的话, 把入射的平面波分解展开成球面波, 下面式子的左边应该等于右边

$$\begin{aligned} f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} + \frac{1}{2ikr} \left[\sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{ikr} - e^{-i(kr-\pi l)}) \right] \\ = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{\chi_{kl}(r)}{kr} P_l(\cos \theta) \end{aligned} \quad (13)$$

而可以显然的看到

$$\begin{aligned} e^{ikr} - e^{-i(kr-\pi l)} &= e^{i\pi l/2} (e^{i(kr-\pi l/2)} - e^{-i(kr-\pi l/2)}) \\ &= i^l 2i \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) \end{aligned} \quad (14)$$

其中定义得到的散射成分为

$$f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (15)$$

而第二项是平面波 e^{ikz} 的拆分. 不妨假设

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{+\infty} D_l P_l(\cos \theta) \quad (16)$$

从而, 在 $r \rightarrow \infty$ 的时候, 考虑 l 成分:

$$A_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right) = i^l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) + k e^{ikr} D_l \quad (17)$$

而 D_l 是个数, 与 r 无关, 那么显然我们就有

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[e^{-ikr} \left(A_l \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l + \delta_l\right) - i^l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l\right) \right) \right] = 0 \quad (18)$$

从而计算得到

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \left[\sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1) \right] = 0 \quad (19)$$

和

$$A_l = i^l (2l+1) e^{i\delta_l} \quad (20)$$

对于 s 成分, 有

$$\begin{aligned} f_s(\theta) &= \frac{e^{2i\delta} - 1}{2ik} = \frac{\sin \delta e^{i\delta + \pi/2}}{ik} = \frac{\sin \delta}{k e^{-i\delta}} = \frac{\sin \delta}{k(\cos \delta - i \sin \delta)} \\ &= \frac{1}{-ik + k/\tan \delta} = \frac{1}{-ik - 1/a_s} \end{aligned} \quad (21)$$

可以看出来, 当 $ka_s \ll 1$ 时, $f_s \sim -a_s$, 此时 s 波散射的散射截面 $\sigma = 8\pi|f(\theta)|^2 = 4\pi a_s^2$; 而另一个极限, $ka_s \gg 1$ 时, $f_s \sim -1/(ik)$, $\sigma = 8\pi/k^2$.

注意到，在第二个极限的时候，散射强度只与动能大小相关，我们称之为 unitary 区域。

就像固体里面一样，我们这里可以定义一个赝势从而得到我们想要的 a_s 。具体如何得到呢？我们通过如下这种特殊的势能： δ 势

$$V(r) = \delta(r)\hat{\mathcal{O}}(r) \quad (22)$$

这个势需要满足对于任意的 $\forall r$ 都有统一的薛定谔方程，而且解是我们期望的（低能的）

$$\Psi(r) = \frac{\sin(kr + \delta_k)}{kr} \rightarrow \frac{1}{kr} - \frac{1}{ka_s} \quad (23)$$

显然，动能部分得到非常简单的结果

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2mk}\nabla^2\frac{1}{r} + -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\frac{1}{ka_s} = -\frac{\hbar^2}{2mk}4\pi\delta(r) \quad (24)$$

势能为了满足薛定谔方程，应该，

$$\delta(r)\hat{\mathcal{O}}(r)\Psi(r) = \frac{\hbar^2}{2mk}4\pi\delta(r) \quad (25)$$

从积分角度理解，有

$$\int \delta(r)\hat{\mathcal{O}}(r)\Psi(r) = \hat{\mathcal{O}}(r)\Psi(r)|_{r=0} = \hat{\mathcal{O}}(r)\left(\frac{1}{kr} - \frac{1}{ka_s}\right)|_{r=0} \stackrel{\text{should}}{=} \frac{\hbar^2}{2mk}4\pi \quad (26)$$

那么，可以看出，如果我们令

$$\hat{\mathcal{O}}(r) = \frac{\hbar^2}{2m}4\pi a_s \partial_r \cdot r \quad (27)$$

其显然有

$$\hat{\mathcal{O}}(r)\frac{1}{kr} = \frac{\hbar^2}{2m}4\pi a_s \partial_r \frac{1}{k} = 0 \quad (28)$$

$$\hat{\mathcal{O}}(r)\frac{1}{ka_s} = \frac{\hbar^2}{2m}4\pi a_s \partial_r \frac{r}{ka_s} = \frac{\hbar^2}{2mk}4\pi \quad (29)$$

也就是说满足我们的要求。

接下来，我们考察另外一种情况：我们考虑点接触势，也就是说 $V(r) = g\delta(r)$ 。注意，这里的 g 不应该理解为一个参数。如果强行理解为一个参数，由于波函数的发散，我们通常这里需要进行重整化操作。

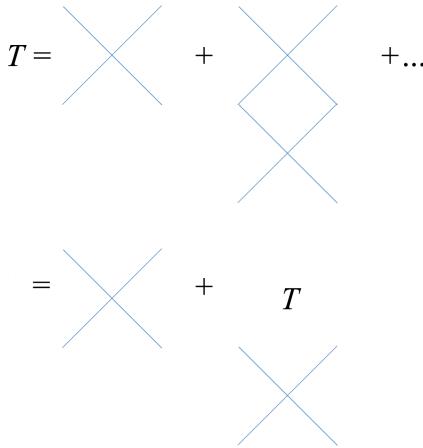


图 2: ladder 图

在这种考虑下，相互作用 Hamiltonian 就可以写为

$$\mathcal{H} = \int d^3r \left(\psi^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi + g\psi^\dagger \psi^\dagger \psi \psi \right) \quad (30)$$

我们可以建立两体散射的 T 矩阵，并且只考虑 ladder 图。如图：

也就是说我们可以写出形如 $T = g + fT$ 的 self-consistent 形式。

通过分析知道，最后 T 矩阵实际上是散射的入射能量的函数，也就是说，可以写成 $T(E)$ 的形式，有

$$T(E) = g + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} T(E) \quad (31)$$

其中第二项包含一个顶角、可供交换的动量 \mathbf{k} 以及相应带来的传播子。形式上我们解得

$$\begin{aligned} T(E) &= \frac{g}{1 - \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / m}} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} + \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} \right)} \end{aligned} \quad (32)$$

分母的第三项可以计算：

$$\begin{aligned} &\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{E - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} + \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} \right) \\ &= \frac{mE}{V \hbar^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\mathbf{k}^2 (E - \hbar^2 \mathbf{k}^2 / m)} \end{aligned} \quad (33)$$

求和可以变成积分，补上差的系数并且根据对称性，我们得到

$$\begin{aligned} &= \frac{V}{(2\pi)^3 V} \int d^3k \left(\frac{1}{E - \hbar^2 k^2/m} + \frac{1}{\hbar^2 k^2/m} \right) \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int dk \frac{1}{1 - \hbar^2 k^2/mE} \end{aligned} \quad (34)$$

令 $k_0 = \sqrt{mE/\hbar^2}$ ，结合留数定理（注意这里是奇点在实轴上，我们只有主值）我们有

$$\begin{aligned} &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int dk \frac{1}{1 - k^2/k_0^2} \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot 2 \cdot \pi i \cdot \left(-\frac{k_0}{2} \right) \\ &= \frac{-imk_0}{2\pi\hbar^2} \end{aligned} \quad (35)$$

于是

$$T(E) = \frac{1}{\frac{1}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2/m} + \frac{imk_0}{2\pi\hbar^2}} \quad (36)$$

利用散射振幅与 T 矩阵的关系：

$$T = \frac{4\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{1/a_s + ik} = \frac{1}{\frac{1}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2/m} + \frac{imk_0}{2\pi\hbar^2}} \quad (37)$$

实部相等于是我们得到了最重要的一个关系式：

$$\frac{ma_s}{4\pi\hbar^2} = \frac{1}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2/m} \quad (38)$$

对散射相移的一般定义是：散射波函数 $\Psi_{sc}(r) = f(\theta)e^{i(kr-\omega t)}/r$ 中的散射振幅 $f(\theta)$ 进行分波展开，

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta) \quad (39)$$

得到的 f_l 满足

$$f_l = \frac{e^{i\delta_{lk}} \sin \delta_{lk}}{k} \quad (40)$$

而在能量很低的时候， f_l 对 k 有一个大概的形式依赖关系：（其中利用了 $j_l(kr) \rightarrow a(kr/2)^l$ 以及径向部分 $A_l(r) = e^{i\delta_l} [\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)]$ ，在 $\delta \rightarrow 0$ 时 $A_l(r) \rightarrow j_l(kr)$ ）：

$$f_l = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr j_l(kr) V(r) A(r) r^2 \sim k^{2l} \quad (41)$$

从而得到在 $k \rightarrow 0$ 的时候

$$\delta_{lk} \propto k^{2l+1} \quad (42)$$

Feshbach 共振

相互作用 Hamiltonian，我们考虑一个坐标表象直积一个 open-closed 的 channel 表象。这种情况下，可以写为：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{m} \otimes I_2 + V_{2 \times 2} \quad (1)$$

其中因为约化所以 $2m \rightarrow m$. 此外，

$$V_{2 \times 2} = \begin{cases} \begin{pmatrix} -V_{\text{open}} & W \\ W & -V_{\text{close}} \end{pmatrix} & r < r_0 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & +\infty \end{pmatrix} & r > r_0 \end{cases} \quad (2)$$

这其实就是对我们之前的物理要求：在远处 close 通道有一个远高于能标的渐进值，近处有一个相互作用 (W) 但是很小. 它是由超精细结构提供的，比 $|V_{\text{open}} - V_{\text{close}}|$ 小几个量级.

在很前面的时候，我们知道， $E \rightarrow 0$ 的情况下，波函数可以写为 $\Psi = \frac{r-a_s}{r} |\text{open}\rangle$.

在近处，我们考虑相互作用部分的本征态 $|\pm\rangle$:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3)$$

其中, $\tan 2\theta = 2W/|V_{\text{open}} - V_{\text{close}}|$, 本征值可以近似认为是 V_{open} 和 V_{close} . 可以用未归一的波函数来描述这两个本征态各自独立的情况:

$$|\Psi\rangle \propto \frac{1}{r} [\sin(q_+ r)|+\rangle + A \sin(q_- r)|-\rangle] \quad (4)$$

其中, q_+, q_- 为该能量下的波矢, A 是一个系数. 由于整体 $E \rightarrow 0$ 为零能散射, 所以 $\hbar^2 q^2/m$ 就应该等于负的相互作用本征值, 也就是有

$$\frac{\hbar^2 q_{+/-}^2}{m} = V_{\text{open}}/V_{\text{close}} \quad (5)$$

考虑在 $r \geq r_0$ 的位置, 体系波函数就不再会包含 close 成分, 也就是说, $\langle \text{close} | \Psi \rangle(r_0) = 0$, 从而告诉我们这个系数 A 满足

$$A = -\tan \theta \frac{\sin(q_+ r_0)}{\sin(q_- r_0)} \quad (6)$$

此外, open 态在 r_0 处要连续, 不仅是波函数还有其导数. 利用之前得到的关系, 可以有

$$\left. \frac{L'}{L} \right|_{r=r_0} = \left. \frac{(r - a_s)'}{r - a_s} \right|_{r=r_0} \quad (7)$$

其中

$$L = \sin(q_+ r) \cos \theta - \frac{\sin(q_+ r_0)}{\sin(q_- r_0)} \sin(q_- r) \tan \theta \quad (8)$$

经过化简我们得到

$$\frac{q_+ \cos^2 \theta}{\tan(q_+ r_0)} + \frac{q_- \sin^2 \theta}{\tan(q_- r_0)} = \frac{1}{r_0 - a_s} \quad (9)$$

可以看到, 因为 $\theta \rightarrow 0$, 主要成分有 q_+ 贡献. 在没有相互作用的时候, 我们有

$$\frac{1}{r_0 - a_{\text{bg}}} = \frac{q_+}{\tan(q_+ r_0)} \quad (10)$$

只有在 $\tan(q_- r_0) \rightarrow 0$ 的时候, 第二项才有贡献. 考虑一个体系的束缚态, 能量 E_c , 其满足

$$\sin(qr)|_{r=0, r_0} = 0, \quad q = \sqrt{\frac{m(V_c + E_c)}{\hbar^2}} \quad (11)$$

在 $E_c \rightarrow 0$ 的时候, $q_- \sim q$, 从而

$$\tan(q_- r_0) \sim (q_- - q)r_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{m} (\sqrt{V_c} - \sqrt{V_c + E_c}) = -\frac{mE_c}{2\hbar^2 q_-} \quad (12)$$

也就是说，第二项约为

$$-\frac{2\hbar^2 q_-^2 \theta^2}{mr_0} \frac{1}{E_c} = -\gamma \frac{1}{E_c}, \quad \gamma \equiv \frac{2\hbar^2 q_-^2 \theta^2}{mr_0} \quad (13)$$

此时，

$$\frac{a_s - r_0}{a_{\text{bg}} - r_0} = 1 - \frac{\Delta B}{B - B_{\text{res}}} \quad (14)$$

其中， B 为施加的磁场，而我们的 E_c 则由磁场调控（因为磁矩不一样）： $E_c \rightarrow E_c + \delta\mu B$ ，而 $\Delta B = \frac{\hbar^2}{\delta\mu m} \gamma (a_{\text{bg}} - r_0)$ ， $B_{\text{res}} = -E_c/\delta\mu + \Delta B$ ，都是一些以 B 参数的东西。

BCS-BEC Crossover 的平均场描述

仍然沿用 BCS 的 Hamiltonian，在动量空间里面，

$$H - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (1)$$

假设不是一个微扰的情况下，也可以用 $|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle$ 来描述基态。仍然定义平均场参数 $\Delta = \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}, a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ 。不同的是，研究冷原子问题的时候，并不是只有在费米面附近才有 U ，而是一个队任意动量都可以的情况。重复同样的 Bogoliubov 变换，我们能够解出来 $u_{\mathbf{k}}^2, v_{\mathbf{k}}^2 = 1/2(1 \pm \epsilon_{\mathbf{k}}/E_{\mathbf{k}})$ ，其中元激发的能级关系 $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + |\Delta|^2}$ 。利用自治方程，我们得到

$$-\frac{1}{U} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (2)$$

而我们知道，“两个原子间的相互作用^[534]” 中式 38 给出了

$$\frac{ma_s}{4\pi\hbar^2} = \frac{1}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2 \mathbf{k}^2 / m} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (3)$$

定义无量纲参数来简化问题：

$$x^2 = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \frac{1}{\Delta}, \quad x_0 = \frac{\mu}{\Delta}, \quad \epsilon_x = x^2 - x_0 = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{\Delta}, \quad E_x = \sqrt{1 + \epsilon_x^2} = \frac{E_{\mathbf{k}}}{\Delta} \quad (4)$$

把求和化为积分，也就是 $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int_0^{\infty} d^3 \mathbf{k} / (2\pi)^3$ ，利用求对称性，我们很容易转写一些式子：

$$\begin{aligned}
 -\frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2 a_s} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{\Delta}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \\
 -\frac{m\Delta}{4\pi\hbar^2 a_s} &= \int_0^{\infty} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{2E_x} - \frac{1}{2x^2} \right) \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{dk \cdot 4\pi k^2}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{2E_x} - \frac{1}{2x^2} \right) \\
 -\frac{1}{a_s} &= \frac{2}{\pi\Delta} \frac{\hbar^2}{m} \int_0^{\infty} dk \cdot k^2 \left(\frac{1}{2E_x} - \frac{1}{2x^2} \right) \\
 k^2 &= \frac{mx^2}{\hbar^2} \\
 -\frac{1}{a_s} &= \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2m\Delta}{\hbar^2}} \int_0^{\infty} dx \cdot x^2 \left(\frac{1}{E_x} - \frac{1}{x^2} \right)
 \end{aligned} \tag{5}$$

可以看出来，右边的积分纯粹只是 x_0 的函数，可以定义

$$I_1(x_0) = \int_0^{\infty} dx \cdot x^2 \left(\frac{1}{E_x} - \frac{1}{x^2} \right) \tag{6}$$

而另一方面，我们可以根据热力学定律知道平均粒子数 $N = -\partial\Omega/\partial\mu$ 得到

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right) \tag{7}$$

而这个 N 是要满足我们的要求的，也就是说 $n = N/V = k_F^3/(3\pi^2)$ 。我们当然也可以用类似的无量纲参数来处理：

$$\begin{aligned}
 n &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right) \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\epsilon_x \Delta}{E_x \Delta} \right) \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{dk \cdot 4\pi k^2}{(2\pi)^3} \left(1 - \frac{\epsilon_x}{E_x} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{2m\Delta}{\hbar^2} \sqrt{\frac{2m\Delta}{\hbar^2}} \int_0^{\infty} dx \cdot x^2 \left(1 - \frac{\epsilon_x}{E_x} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m\Delta}{\hbar^2} \right)^{3/2} I_2(x_0)
 \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$I_2(x_0) = \int_0^\infty dx \cdot x^2 \left(1 - \frac{\epsilon_x}{E_x}\right) \quad (9)$$

于是我们得到了两个方程（代替原本的自治方程来给我们关于系统的信
息）

$$\begin{cases} \frac{\Delta}{E_F} = \left(\frac{2}{3I_2(x_0)}\right)^{2/3} \\ \frac{1}{k_F a_s} = -\frac{2}{\pi} \left(\frac{2}{3I_2(x_0)}\right)^{1/3} I_1(x_0) \end{cases} \quad (10)$$

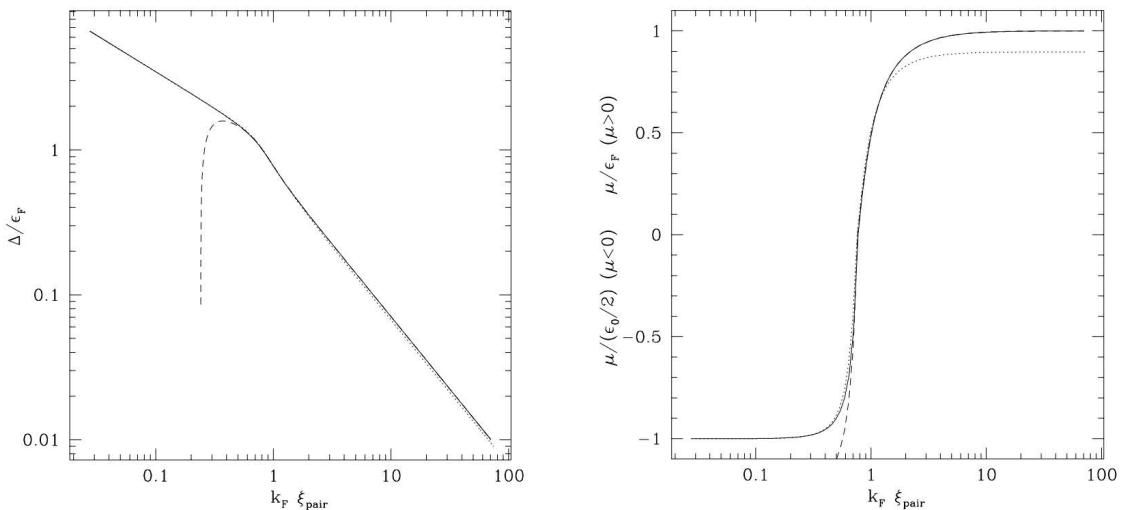


图 1: 左: Δ/E_F vs $k_F \xi_{\text{pair}}$, 右: $\mu/E_F (\mu > 0), \mu/(\epsilon_0/2) (\mu < 0)$, 区分两种情况是因为在 Bose 情况下没有费米能的定义, $\epsilon_0 \equiv 1/(ma_s^2)$

但是, 对于 I_1, I_2 的渐进行为并不好分析, 我们定义更多的积分

$$I_3(x_0) = \int_0^\infty dx \frac{x^4 \epsilon_x}{E_x^6} \quad (11)$$

$$I_4(x_0) = \int_0^\infty dx \frac{x^2}{E_x^2} \quad (12)$$

$$I_5(x_0) = \int_0^\infty dx \frac{x^2}{E_x^3} \quad (13)$$

$$I_6(x_0) = \int_0^\infty dx \frac{x^2 \epsilon_x}{E_x^3} \quad (14)$$

可以知道, $I_1 = (2x_0 I_6 - I_5)$, $I_2 = \frac{2}{3}(x_0 I_5 + I_6)$. 而 I_3, I_4 是很好计算的. 如果定义

$$x_1^2 = \frac{x_0 + \sqrt{1 + x_0^2}}{2} \quad (15)$$

就可以算出

$$I_3 = \frac{\pi}{16} \frac{x_1(1 + x_1^4)}{(1 + x_0^2)^{1/2}} \quad (16)$$

$$I_4 = \frac{\pi}{2} x_1 \quad (17)$$

平均场下可以计算费米子对的特征距离

$$\xi_{\text{pair}}^2 = \frac{1}{m^2} \frac{\int_0^\infty dk (k^4(\epsilon_k - \mu)^2 / E_k^6)}{\int_0^\infty dk (k^2 / E_k^2)} = \frac{2}{m\Delta} \frac{I_3}{I_4} \quad (18)$$

还有一些其它的参数信息

$$\frac{\Delta}{E_F} = \left(\frac{1}{x_0 I_5 + I_6} \right)^{2/3} \quad (19)$$

$$\frac{\mu}{E_F} = x_0 \frac{\Delta}{E_F} \quad (20)$$

$$\frac{1}{k_F a_s} = -\frac{4}{\pi} \frac{x_0 I_6 - I_5}{(x_0 I_5 + I_6)^{1/3}} \quad (21)$$

$$k_F \xi_{\text{pair}} = \sqrt{\frac{1 + x_1^4}{2}} \frac{(x_0 I_5 + I_6)^{1/3}}{(1 + x_0^2)^{1/4}} \quad (22)$$

现在仔细分析一下渐进行为:

- $x_0 \rightarrow \infty$, 此时 $\mu \rightarrow E_F$, $I_5 \sim \sqrt{x_0}$, $I_6 \sim \ln x_0 / (2\sqrt{x_0})$, 我们的 $1/k_F a_s \rightarrow (2/\pi) \ln x_0$, $a_s \rightarrow 0^+$, 表现为微弱的吸引力, 就是 BCS 态的情况. 此时 $k_F \xi_{\text{pair}} \rightarrow x_0 / \sqrt{2}$.
- $x_0 \rightarrow -\infty$, $I_5 \sim \pi / (16|x_0|^{3/2})$, $I_6 \sim \pi / (4|x_0|^{1/2})$. 此时 $\Delta \rightarrow \infty$, $\mu \rightarrow -\infty$, $a_s \rightarrow 0^+$, $k_F \xi_{\text{pair}} \rightarrow 0^+$. 表现为强吸引力 (Δ), 就是 BEC 极限.

可以用 $k_F \xi_{\text{pair}}$ 作为参数反解很多信息, 如图 1.

BEC 超流

首先，我们回顾一下理想玻色气体的 BEC. 假设这种玻色子的色散是 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ (实际上长什么样在我们这里一般的分析中并没有什么关系). 我们可以看到， $n_{\mathbf{k}} = 1/(e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1)$. 那么，在热力学极限下可以发现如果 $\mu < 0$, 换句话说温度处于 T_c , $N \rightarrow \infty$, $n_{\mathbf{k}}/N \rightarrow 0$. 而相变的时候 $T_c : \mu = 0$, 这时候物理图像是 de Broglie 波长 \approx 粒子间距. 在 $< T_c$ 时,

$$N = N_0 + \frac{V}{2\pi^3} \int d^3k \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - 1}, \quad N_0/N \neq 0 \quad (1)$$

呈现宏观占据. 看得出来我们虽然很熟悉什么是理想玻色气体的 BEC, 但是对于一般的情况, 如何规定它是否是处于凝聚的态呢?

首先, 我们可以写出某个多体 (N 体) 波函数 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ 密度矩阵 ρ . 它的矩阵元有 $2N$ 个指标, $\langle x_1, \dots, x_N | \rho | y_1, \dots, y_N \rangle$. 把它 trace 掉 $N - 1$ 个指标, 得到

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = N \int \sum_s p_s \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) p_s \psi(\mathbf{r}', \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d^3\mathbf{r}_2 \cdots d^3\mathbf{r}_N \quad (2)$$

二参数函数可以按照某一个基展开,

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i N_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_i(\mathbf{r}') \quad (3)$$

对于 N_i , 如果所有 $N_i/N = 0$, 那么就称这个态是 normal phase. 如果有一个不等于 0 的, 那就是一般的 BEC, 如果有多个 $N_i \neq 0$ 叫 fragment BEC. 后两者称之为存在非对角长程序 (off-diagonal long-range order, ODLRO).

对于正常的 BEC 的情况, $\exists N_0 \gg N_{i \neq 0}$, 如果我们忽略两体相互作用的细节, 我们就可以写出

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx N_0 \varphi^*(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}') \quad (4)$$

其中, 满足要求的系统的态是

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{\otimes} \varphi(\mathbf{r}_i) \quad (5)$$

我们考虑系统的 Hamiltonian. 利用赝势, 我们写出

$$\hat{H} = \sum_i^N \left(\frac{\nabla_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right) \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta^3(\mathbf{r}_{ij}) \frac{\partial}{\partial r_{ij}} r_{ij} \quad (6)$$

显然, 我们的波函数式 5 在这里面并不存在我们上一章讨论的 $r_i \rightarrow r_j$ 的那种发散行为, 因为我们实际上忽略了两体相互作用的细节. 当然, 这种情况下我们很容易发现, 没有奇异性的时候, 蕴势仅仅就是一个 δ 而已, 因为其形如 $r_{ij}\partial_{r_{ij}}$ 的成分在 $\delta^3(\mathbf{r}_{ij})$ 下不作任何贡献:

$$\delta^3(\mathbf{r}_{ij}) \frac{\partial}{\partial r_{ij}} r_{ij} = \delta^3(\mathbf{r}_{ij}) \quad (7)$$

我们可以通过对 $\langle \varphi | H + \mu N | \varphi \rangle$ 取极值得到本征值方程.

$$\varepsilon = N \int d^3\mathbf{r} \varphi^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \varphi(\mathbf{r}) + \frac{N(N-1)}{2} \int d^3\mathbf{r} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\varphi(\mathbf{r})|^4 \quad (8)$$

以 φ^* 作为变量, $N \rightarrow \infty$ 而且 $\phi = \sqrt{N}\varphi$, $U \equiv \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$, 我们有

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi + U|\phi|^2 \phi = \mu \phi \quad (9)$$

这就是著名的不含时 **Gross-Pitaevskii 方程**.

如果我们考虑的不是一个定态问题, 而是 $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$, 那么我们的这个方程实际上要稍作改动. 符合直觉的我们可以得到含时 **Gross-Pitaevskii 方程**

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi + U|\phi|^2 \phi \quad (10)$$

接下来我们做两个魔法操作. 首先将 $\phi^* \times$ 式 10 减去它的共轭, 显然其左手边为

$$i\hbar \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} + i\hbar \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \phi^* \phi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial |\phi|^2}{\partial t} \quad (11)$$

而右手边则为

$$\begin{aligned} & \left(\phi^* \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi + U|\phi|^4 \right) - \left(\phi \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi^* + U|\phi|^4 \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) \end{aligned} \quad (12)$$

于是，就得到

$$i\hbar \frac{\partial |\phi|^2}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi)$$

定义 $\rho(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho} e^{i\theta}$, 其中 $\rho = \rho(\mathbf{r})$, $\theta = \theta(\mathbf{r})$. 我们从而有

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}), \quad \mathbf{v} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar}{m} \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (13)$$

这就得到了连续性方程. 当然，还得补充一个无旋方程

$$\nabla \times \mathbf{v} = 0 \quad (14)$$

另一个魔法是将 $\phi^* \times$ 式 10 它的共轭. 左手边为

$$i\hbar \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - i\hbar \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} = i\hbar \phi^{*2} \frac{\partial \phi / \phi^*}{\partial t} = -2\hbar \rho \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (15)$$

而右边就有点复杂了，下面的最后一项会很复杂：

$$\begin{aligned} & \left(\phi^* \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi + U|\phi|^4 \right) + \left(\phi \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \phi^* + U|\phi|^4 \right) \\ &= 2V\rho + 2U\rho^2 - \frac{\hbar^2}{2m} (\phi^* \nabla^2 \phi + \phi \nabla^2 \phi^*) \end{aligned} \quad (16)$$

我们显然希望能够提取出来一个 ρ , 所以我们给出详细的计算过程：

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi &= \nabla^2 (\sqrt{\rho} e^{i\theta}) \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{e^{i\theta}}{2\sqrt{\rho}} \nabla \rho + i\sqrt{\rho} e^{i\theta} \nabla \theta \right) \\ &= \frac{e^{i\theta}}{2\sqrt{\rho}} \nabla^2 \rho + \frac{ie^{i\theta}}{\sqrt{\rho}} \nabla \theta \nabla \rho - \frac{e^{i\theta}}{4\rho^{3/2}} (\nabla \rho)^2 - \sqrt{\rho} e^{i\theta} (\nabla \theta)^2 + i\sqrt{\rho} e^{i\theta} \nabla^2 \theta \end{aligned} \quad (17)$$

类似有

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi^* &= \nabla^2 (\sqrt{\rho} e^{-i\theta}) \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{e^{-i\theta}}{2\sqrt{\rho}} \nabla \rho - i\sqrt{\rho} e^{-i\theta} \nabla \theta \right) \\ &= \frac{e^{-i\theta}}{2\sqrt{\rho}} \nabla^2 \rho - \frac{ie^{-i\theta}}{\sqrt{\rho}} \nabla \theta \nabla \rho - \frac{e^{-i\theta}}{4\rho^{3/2}} (\nabla \rho)^2 - \sqrt{\rho} e^{-i\theta} (\nabla \theta)^2 - i\sqrt{\rho} e^{-i\theta} \nabla^2 \theta \end{aligned} \quad (18)$$

从而有

$$\phi^* \nabla^2 \phi + \phi \nabla^2 \phi^* = \nabla^2 \rho - \frac{1}{2\rho} (\nabla \rho)^2 - 2\rho (\nabla \theta)^2 = 2\sqrt{\rho} \nabla^2 \sqrt{\rho} - 2\rho (\nabla \theta)^2 \quad (19)$$

从而我们得到原本的式子右边等于

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \theta)^2 + V + U\rho \quad (20)$$

将 ∇ 作用到等式两边，得到

$$m \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\rho}} \nabla^2 \sqrt{\rho} + \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + V + U\rho \right] \quad (21)$$

以上的推导都是零温情况，只包含超流成分；有限温的问题可以加入正常流体的成分，从而变成二流体模型。考虑一个均匀系统 $V(\mathbf{r}) = 0$ ，基态有均匀的密度 ρ_0 ，且 $\mathbf{v} = 0$ 。我们可以对非基态的态的密度函数作展开： $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ 。只取 $\delta\rho, \mathbf{v}$ 和 k 的领头阶，我们可以简化刚刚得到的方程：

$$m \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -U \nabla \cdot \delta\rho, \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \mathbf{v}) \approx -\rho_0 \nabla \mathbf{v} \quad (22)$$

联合起来就得到

$$\frac{\partial^2 \delta\rho}{\partial t^2} = \frac{U \rho_0}{m} \nabla^2 \delta\rho \quad (23)$$

即得到了声子色散

$$\omega = \sqrt{\frac{U \rho_0}{m}} k \quad (24)$$

声速得到为 $c = \sqrt{\frac{U \rho_0}{m}}$ ，是一个低能的线性 gapless 激发（从而无色散）。这与 U(1) 对称性是联系起来的。

最后我们来说一下超流与临界速度。这个临界速度就和我们 BCS 里面的临界磁场有点像：超过这个速度，超流就不再是超流了。考虑一个质量为 m_0 ，速度 \mathbf{v}_i 的杂质，在与某处于 BEC 态的物体相互作用。如果有摩擦，也就是说，这个杂质被散射到某一速度 \mathbf{v}_f 了，我们可以在初始 BEC 质心系写能动量守恒

$$m_0 \mathbf{v}_i + \mathbf{q} = m_0 \mathbf{v}_f, \quad \frac{m_0 \mathbf{v}_i^2}{2} = \frac{m_0 \mathbf{v}_f^2}{2} + c |\mathbf{q}| \quad (25)$$

得到

$$\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{q} - c |\mathbf{q}| = \frac{\mathbf{q}^2}{2m} \quad (26)$$

可见右边等式大于 0, 如果 $\mathbf{v}_i < c$, 则左边无法满足也为正, 即无法发生散射, 也就是真正意义的“超流”(不会产生摩擦作用), 这个临界速度也就是声速 c .

参考文献

- [1] J. N. J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd ed., edited by L. Kenny (Addison-Wesley, 2011).
- [2] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2010).
- [3] H. Araki and E. H. Lieb, *Communications in Mathematical Physics* 18, 160 (1970).
- [4] B. Zeng, X. Chen, D. Zhou, and X. Wen, ArXiv e-prints (2015), arXiv:1508.02595 [cond-mat.str-el].
- [5] C. Nayak *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* 80, 1083 (2008).
- [6] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer Science & Business Media, 2012.
- [7] Fa Wang, Summary of Lecture 6: perturbation theory, **laserroger: Site** Part C, 2nd-order perturbation

第七章

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.

$$\begin{aligned} g_n(z) &= z + \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} \dots \\ f_n(z) &= z - \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} \dots \end{aligned} \quad (25)$$

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?

分子平均碰撞数

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,

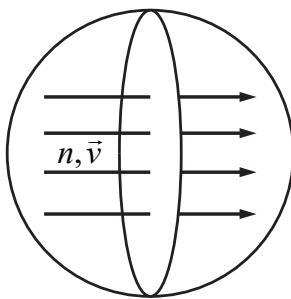


图 1: 分子同向运动的情况

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

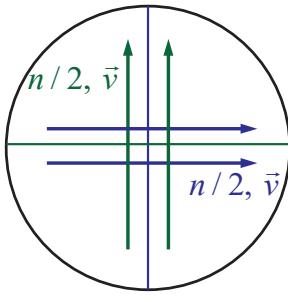


图 2: 分子向两个方向运动的情况

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, 所以结论不变.

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 $d\Omega_1 = d^3q \cdot d^3p$.

$$\Omega_1 = \frac{1}{h^3} \int_{\Omega_1} d^3q d^3p \quad (2)$$

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

$$\Omega_1 = \frac{1}{h^3} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \int d^3q d^3p = \frac{L_x L_y L_z}{h^3} \int d^3p \quad (3)$$

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）

预备知识 N 维球体的体积

结论

$$\Omega_0 = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (1)$$

$$g(E) = \frac{V^N}{N!h^3} \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{(3N/2 - 1)!} E^{3N/2 - 1} \quad (2)$$

在 N 个不相干粒子的相空间中，能量小于 E 的体积为

$$\Omega_0 = \frac{1}{N!h^3} \int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^{3N}q d^{3N}p = \frac{V^N}{N!h^3} \int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^{3N}p \quad (3)$$

其中积分 $\int_{\dots} d^{3N}p$ 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,

$$\int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^{3N}p = \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{(3N/2)!} \quad (5)$$

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

$$\Omega_0 = \frac{1}{h^3} \int_{\sum p^2 \leq 2mE} d^3q d^3p = \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi p^3 = \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi (2m\varepsilon)^{3/2} \quad (1)$$

$$a(\varepsilon) = \frac{d\Omega_0}{d\varepsilon} = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2} \quad (2)$$

量子力学法

由盒中粒子得，单粒子的能级为

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\pi n_x}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_y}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{\pi n_z}{L_z} \right)^2 \right] = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (3)$$

在 k 空间中，每个能级所占的体积为

$$V_1 = \frac{\pi^3}{L_x L_y L_z} = \frac{\pi^3}{V} \quad (4)$$

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）

$$\Omega_0 = \frac{1}{8} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4}{3} \pi k^3 \Big/ \frac{\pi^2}{V} = \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi (2m\varepsilon)^{3/2} \quad (5)$$

$$a(\varepsilon) = \frac{d\Omega_0}{d\varepsilon} = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2} \quad (6)$$

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.

正则系综法

亥姆霍兹自由能

由于最可能的能级的可能性为“1”

$$1 = \Omega e^{-E/\tau} / Q = e^{S/k} e^{-E/\tau} / Q = e^{-F/\tau} / Q \quad (1)$$

所以

$$F = -kT \ln Q \quad (2)$$

系统总能量

$$E = \frac{\sum_i E_i e^{-E_i/kT}}{Q} \quad (3)$$

考虑到 $E_i e^{-E_i/kT} = \tau^2$

$$E = \tau^2 \frac{\partial}{\partial \tau} \ln Q \quad (4)$$

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）

$$\begin{aligned} Q_{dis} &= \sum_{i_1=0}^{\infty} \sum_{i_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{i_N=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_{i_1} + \varepsilon_{i_2} \dots)} = \sum_{i_1=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_{i_1}} \sum_{i_2=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_{i_2}} \cdots \sum_{i_N=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_{i_N}} \\ &= \left(\sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta\varepsilon_i} \right)^N = Q_1^N \end{aligned} \quad (1)$$

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。

$$Q_1 = \frac{1}{h^3} \int e^{-\frac{p^2}{2m \cdot kT}} d^3p d^3x = \frac{V}{h^3} \int e^{-\frac{p^2}{2m \cdot kT}} d^3p = \frac{V}{\lambda^3} \quad (6)$$

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

$$\Xi = \exp(zQ_1) = \exp\left(\frac{zV}{\lambda^3}\right) \quad (1)$$

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.

等间隔能级系统（正则系宗）

预备知识 玻尔兹曼因子配分函数

结论

若一个系统的能量只能取一系列离散的值（能级），但相邻能级间距恰好为 ε ，那么该系统在温度 τ 达到热平衡时，平均能量为

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/\tau} - 1} \quad (1)$$

推导 1

令第 n 个能级的能量为 ε_n ，能量的平均值为

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n \exp(-\varepsilon_n/\tau)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\varepsilon_n/\tau)} \quad (2)$$

其中 $\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\varepsilon_n/\tau)$ 就是配分函数 Q .

对于等间距能级，假设等间距能级 $\varepsilon_n = n\varepsilon$ （也可以假设 $\varepsilon_n = \varepsilon_0 + n\varepsilon$ ，上式的分子分母都多出一个因子 $\exp(-\varepsilon_0/\tau)$ ，最后的结果相同）。首先化简配分函数

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon/\tau} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\varepsilon/\tau})^n \quad (3)$$

由于 $e^{-\varepsilon/\tau} < 1$ ，根据等比数列求和公式

$$Q = \frac{1}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}} \quad (4)$$

再化简分子

$$\sum_{n=0}^{\infty} n\varepsilon \exp(-n\varepsilon/\tau) = \varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} n(e^{-\varepsilon/\tau})^n \quad (5)$$

令 $x = e^{-\varepsilon/\tau}$, 有 $x < 1$. 同样根据等比数列求和公式

$$\sum_{n=0}^{\infty} nx^n = x \frac{d}{dx} \sum_{n=0}^{\infty} x^n = x \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{1-x} \right) = \frac{x}{(1-x)^2} \quad (6)$$

把 x 换成 $e^{-\varepsilon/\tau}$, 式 5 变为

$$\frac{\varepsilon e^{-\varepsilon/\tau}}{(1 - e^{-\varepsilon/\tau})^2} \quad (7)$$

把分子分母代入平均值公式式 2 得到最后结论

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon/\tau}}{(1 - e^{-\varepsilon/\tau})^2} / \frac{1}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}} = \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon/\tau}}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/\tau} - 1} \quad (8)$$

推导 2

由式 4 已知配分函数

$$Q = \frac{1}{1 - e^{-\varepsilon/\tau}} = \frac{1}{1 - e^{-\varepsilon\beta}} \quad (9)$$

我们也可以直接用能量均值公式

$$\langle \varepsilon \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Q = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(1 - e^{-\varepsilon\beta}) = \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon\beta}}{1 - e^{-\varepsilon\beta}} = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/\tau} - 1} \quad (10)$$

结果相同.

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”

$$\begin{aligned}
 \Xi &= \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \exp \left(N\mu - \sum_{i=1}^{\infty} n_i \varepsilon_i \right) \beta = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* z^N \prod_{i=0}^{\infty} (\mathrm{e}^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} \\
 &= \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \prod_{i=0}^{\infty} (z \mathrm{e}^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} = \sum_{n_1}^* \sum_{n_2}^* \cdots \prod_{i=0}^{\infty} (z \mathrm{e}^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i} \\
 &= \sum_{n_1}^* (z \mathrm{e}^{-\varepsilon_1 \beta})^{n_1} \sum_{n_2}^* (z \mathrm{e}^{-\varepsilon_2 \beta})^{n_2} \cdots = \prod_i^{\infty} \sum_{n_i}^* (z \mathrm{e}^{-\varepsilon_i \beta})^{n_i}
 \end{aligned} \tag{3}$$

系统的热力学性质

由最大概率项假设,

$$1 = \frac{\Omega \mathrm{e}^{(\mu N - E)/(kT)}}{\Xi} = \frac{\mathrm{e}^{S/k} \mathrm{e}^{(\mu N - E)/(kT)}}{\Xi} \tag{4}$$

$$\mathrm{e}^{S/k} \mathrm{e}^{(\mu N - E)/(kT)} = \Xi \tag{5}$$

$$E - ST - \mu N = -kT \ln \Xi \tag{6}$$

令 $\Phi = -kT \ln \Xi$ 叫做巨势

$$\Phi = E - ST - \mu N \tag{7}$$

$$\Phi = E - ST - \mu N = F - G = E - ST - (E - ST + PV) = -PV \tag{8}$$

考慮到 $dE = T dS - P dV + \mu dN$

$$d\Phi = -P dV - S dT - N d\mu \tag{9}$$

所以

$$S = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T} \right)_{V,\mu} \quad N = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \right)_{V,T} \quad P = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial V} \right)_{T,\mu} \tag{10}$$

另外有一个求能级分布的公式

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* n_i \exp \left(N\mu - \sum_{i=1}^{\infty} n_i \varepsilon_i \right) \beta = -\frac{1}{\beta \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \varepsilon_i} = -kT \frac{\partial}{\partial \varepsilon_i} \ln \Xi = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_i} \tag{11}$$

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。

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{n_i} \sum_{E_j} e^{(n_i \mu - E_j) \beta} = \sum_{n_i} e^{(n_i \mu - E) \beta} \\ &= \sum_{n_i} e^{(n_i \mu - n_i \varepsilon_i) \beta} = \sum_{n_i} [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i}\end{aligned}\quad (1)$$

系统 (ε_i 能级) 中的平均粒子数为

$$\begin{aligned}\langle n_i \rangle &= \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i} \sum_{E_j} n_i e^{(n_i \mu - E_j) \beta} \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i} n_i [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i}\end{aligned}\quad (2)$$

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）。

$$\Xi = \sum_{n_i=0}^1 [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i} = 1 + e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta} \quad (3)$$

ε_i 能级的平均粒子数为

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i=0}^1 n_i [e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}]^{n_i} = \frac{0 + e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}}{1 + e^{(\mu - \varepsilon_i) \beta}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu) \beta} + 1} \quad (4)$$

这就是著名的费米—狄拉克分布。

玻色子

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 $\mu < \varepsilon_i$.

$$\Xi = \sum_{n_i=0}^{\infty} [e^{(\mu-\varepsilon_i)\beta}]^{n_i} = \frac{1}{1 - e^{(\mu-\varepsilon_i)\beta}} \quad (5)$$

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{n_i=0}^1 n_i [e^{(\mu-\varepsilon_i)\beta}]^{n_i} = [1 - e^{(\mu-\varepsilon_i)\beta}] \frac{e^{(\mu-\varepsilon_i)\beta}}{[1 - e^{(\mu-\varepsilon_i)\beta}]^2} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)\beta} - 1} \quad (6)$$

这就是著名的玻色—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

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* e^{(N\mu-\varepsilon_i)\beta} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* z^N \exp\left(-\beta \sum_i^m n_i \varepsilon_i\right) \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \left(\prod_{i=1}^{\infty} z^{n_i}\right) \left(\prod_{i=1}^{\infty} (e^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i}\right) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \prod_{i=1}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i} \end{aligned} \quad (1)$$

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

$$\sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* (\dots) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{m=0}^{\infty} (\dots) \quad (2)$$

于是

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_i\}}^* \prod_{i=1}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_m=0}^{\infty} \prod_{i=1}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i} \\ &= \sum_{n_1=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_1})^{n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_2})^{n_2} \cdots \sum_{n_m=0}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_m})^{n_m} \\ &= \prod_{i=1}^m \sum_{n_i}^{\infty} (ze^{-\beta\varepsilon_i})^{n_i} \end{aligned} \quad (3)$$

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 1 kg 物体获得 1 m/s² 加速度的力。

真空磁导率 (μ_0) 的定义

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2 \quad (2)$$

真空介电常数 (ϵ_0) 的定义

$$\epsilon_0 = 1/(c^2 \mu_0) = 8.8541878176 \dots \times 10^{-12} \text{ F/m} \quad (3)$$

说明：其中 c 是光速， μ_0 是真空磁导率。根据该定义， $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$.

库仑 (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 库仑。

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 库仑的电流就是 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 2×10^{-7} N/m.

第五部分

小时物理笔记

第一章

摘选

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 $[\cdot]_{\partial A}$ 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幺正变换

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \hat{U} \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3)$$

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 的公式不受幺正变换的影响. 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 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 对角化 (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

$$\hat{H} = \sum_i \hat{h}_i + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad \hat{h}_i = -\frac{1}{2} \nabla^2 + \frac{Z}{r_i} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \sum_i \hat{h}_i | \Psi \rangle &= \sum_i \sum_{N!} (-1)^p \langle \Psi_H | \hat{h}_i \hat{P} | \Psi_H \rangle = \sum_i \langle \Psi_H | \hat{h}_i | \Psi_H \rangle \\ &= \sum_i \langle u_i | \hat{h}_i | u_i \rangle \end{aligned} \quad (11)$$

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

$$\begin{aligned} L &= 2 \langle \phi\phi | \hat{h} | \phi\phi \rangle + \langle \phi\phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi\phi \rangle - \lambda [\langle \phi | \phi \rangle - 1] \\ &= 2 \langle \phi | \hat{h} | \phi \rangle + \langle \phi\phi | \frac{1}{r_{12}} | \phi\phi \rangle - \lambda [\langle \phi | \phi \rangle - 1] \end{aligned} \quad (20)$$

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。

FEDVR 算法

预备知识 高斯积分 (Gauss-Lobatto) [??]

FEDVR 基底

现在以一维 FEDVR 为例，把整个区间划分成 N_e 个有限元，第 i 个有限元的区间为 $[x_i, x_{i+1}]$. 每个有限元内进一步加入格点，令 x_{ij} ($j = 1 \dots N$) 为

第 i 有限元的 N 阶 Gauss-Lobatto 数值积分的 N 个采样点. 这样, $x_{j1} = x_j$, $x_{jN} = x_{j+1}$.

现在来定义 FEDVR 基底 $u_{ij}(x)$. 令 a_i 是第 i 个 FE 长度的一半, b_i 是第 i 个 FE 的终点坐标, 把^{??[??]} 中的 $f_n(x)$ (x 超出 $[-1, 1]$ 时令 $f_n(x) = 0$) 记为 $f_n(t)$, 并把 $t \in [-1, 1]$ 线性依次映射到每个有限元的区间 $x \in [x_i, x_{i+1}]$ 上, 有

$$x_{ij} = a_i t_j + b_i \quad (1)$$

$$x = a_i t + b_i \quad (x_{i1} \leq x \leq x_{iN}) \quad (2)$$

则基底的定义为

$$u_{ij}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a_i}} f_j \left(\frac{x - b_i}{a_i} \right) & (1 < j < N) \\ \frac{1}{\sqrt{a_i + a_{i+1}}} \left[f_N \left(\frac{x - b_i}{a_i} \right) + f_1 \left(\frac{x - b_{i+1}}{a_{i+1}} \right) \right] & (j = N) \end{cases} \quad (3)$$

易证正交归一关系

$$\int_{x_1}^{x_{N_e+1}} u_{ij}(x) u_{i'j'}(x) dx = \delta_{ii'} \delta_{jj'} \quad (4)$$

在总区间的两端我们一般采用函数值为零的边界条件, 所以不定义 $u_{11}(x)$ 和 $u_{N_e, N}(x)$. 这样, 我们最终共有 $N_e(N - 1) - 1$ 个节点 x_{ij} 和对应的基底 $u_{ij}(x)$. 令 w_{0i} 为^{??[??]} 中的 w_i , 则每个基底在每个节点处的函数值为

$$u_{ij}(x_{i'j'}) = \delta_{ii'} \delta_{jj'} \times \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a_i w_{0j}}} & (1 < j < N) \\ 1 & (j = N) \end{cases} \quad (5)$$

易证, 若要对整个区间积分, 所需权重为

$$w_{ij} = \frac{1}{u_{ij}^2(x_{ij})} = \begin{cases} a_i w_{0j} & (1 < j < N) \\ (a_i + a_{i+1}) w_{0N} & (j = N) \end{cases} \quad (6)$$

但如果只需要在某个 FE 区间内做积分, 只需用 $w_{ij} = a_i w_{0j}$ 即可。

一个函数 $f(x)$ 用基底展开为

$$\langle u_{ij}(x) | f(x) \rangle = \int_{x_1}^{x_{N_e+1}} u_{ij}(x) f(x) dx \approx \sqrt{w_{ij}} f(x_{ij}) \quad (7)$$

把所有基底按对应的 x_{ij} 从小到大排序。 $f(x)$ 的展开系数就可以记为一个列矢量。

动能算符

使用分部积分可以把动能矩阵元表示为两个基底的导函数的内积¹

$$\begin{aligned} K_{ij} &= -\frac{1}{2} \langle u_i | \frac{d^2}{dx^2} | u_j \rangle = -\frac{1}{2} \int u_i(x) u_j''(x) dx \\ &= -\frac{1}{2} u_i(x) u_j'(x) \Big|_{x_1}^{x_2} + \frac{1}{2} \int u_i'(x) u_j'(x) dx \\ &= \frac{1}{2} \langle u_i'(x) | u_j'(x) \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

可以看出 \mathbf{K} 是实对称矩阵。这个积分可以精确地用求和表示，而且只有同一个 FE 里面的 $u_i(x), u_j(x)$ 才能使积分不为零 (bridge function 属于两个 FE)，所以就得到了几乎是 block diagonalized 的矩阵，只是每一个 block 左上角和右下角的一个矩阵元与其他 block 重叠。

那如何计算基底函数的导数呢？可以通过计算勒让德插值多项式的导数得到

$$\begin{aligned} f'_i(t_j) &= \frac{1}{\sqrt{w_{0i}}} \times \\ &\begin{cases} \frac{t_j - t_1}{t_i - t_1} \frac{t_j - t_2}{t_i - t_2} \cdots \frac{1}{t_i - t_j} \cdots \frac{t_j - t_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \frac{t_j - t_{i+1}}{t_i - t_{i+1}} \cdots \frac{t_j - t_N}{t_i - t_N} & (i \neq j) \\ \frac{1}{t_i - t_1} + \cdots + \frac{1}{t_i - t_{i-1}} + \frac{1}{t_i - t_{i+1}} + \cdots + \frac{1}{t_i - t_N} & (i = j) \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

代入得

$$u'_{ij}(x_{ij'}) = \frac{1}{a_i^{3/2}} f'_j(t_{j'}) \quad (1 < j < N) \quad (10)$$

$$u'_{iN}(x_{ij'}) = \frac{1}{a_i \sqrt{a_i + a_{i+1}}} f'_N(t_{j'}) \quad (11)$$

$$u'_{iN}(x_{i+1,j'}) = \frac{1}{a_{i+1} \sqrt{a_i + a_{i+1}}} f'_1(t_{j'}) \quad (12)$$

注意 u'_{iN} 在 x_{iN} 处的左右导数不相等。

¹未完成：这么说不严谨！因为并不是所有基底都是光滑的，分部积分的常数项也未必能消掉。

现在就可以求动能矩阵的矩阵元了（由于是对称矩阵，我们只列出半边），先看不含 bridge function 的矩阵元

$$\begin{aligned}
 K_{(im),(in)} &= \frac{1}{2} \int_{x_{i1}}^{x_{iN}} u'_{im}(x) u'_{in}(x) dx \\
 &= \frac{1}{2} \sum_k a_i w_{0k} u'_{im}(x_{ik}) u'_{in}(x_{ik}) \\
 &= \frac{1}{2a_i^2} \sum_k w_{0k} f'_m(t_k) f'_n(t_k) \quad (1 < m \leq n < N)
 \end{aligned} \tag{13}$$

再看含 bridge function 的矩阵元

$$\begin{aligned}
 K_{(im),(iN)} &= \frac{1}{2} \int_{x_{i1}}^{x_{iN}} u'_{im}(x) u'_{iN}(x) dx \\
 &= \frac{1}{2a_i^{3/2} \sqrt{a_i + a_{i+1}}} \sum_k w_{0k} f'_m(t_k) f'_N(t_k) \quad (1 < m < N)
 \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}
 K_{(iN),(iN)} &= \frac{1}{2} \int_{x_{i1}}^{x_{iN}} u'_{iN}(x)^2 dx + \frac{1}{2} \int_{x_{i+1,1}}^{x_{i+1,N}} u'_{i+1,1}(x)^2 dx \\
 &= \frac{1}{2(a_i + a_{i+1})} \sum_k w_{0k} \left[\frac{1}{a_i} f'_N(t_k)^2 + \frac{1}{a_{i+1}} f'_1(t_k)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned}
 K_{(iN),(i+1,n)} &= \frac{1}{2} \int_{x_{i+1,1}}^{x_{i+1,N}} u'_{i,N}(x) u'_{i+1,n}(x) dx \\
 &= \frac{1}{2a_{i+1}^{3/2} \sqrt{a_i + a_{i+1}}} \sum_k w_{0k} f'_1(t_k) f'_n(t_k) \quad (1 < n < N)
 \end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}
 K_{(iN),(i+1,N)} &= \frac{1}{2} \int_{x_{i+1,1}}^{x_{i+1,N}} u'_{i,N}(x) u'_{i+1,N}(x) dx \\
 &= \frac{1}{2a_{i+1} \sqrt{(a_i + a_{i+1})(a_{i+1} + a_{i+2})}} \sum_k w_{0k} f'_1(t_k) f'_N(t_k)
 \end{aligned} \tag{17}$$

势能矩阵

$$V_{\alpha\beta} = \int_{x_1}^{x_{N_e+1}} u_n^j(x) u_{n'}^{j'}(x) V(x) dx = \tag{18}$$

Lanczos 算法

背景介绍

在计算含时薛定谔方程时，若已知某时刻 t 的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ，要求 $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ ，通常使用传播算符

$$U(\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt \cdot H(t)\right) \approx \exp(-iH(t + \Delta t/2)\Delta t) \quad (1)$$

其中 H 为哈密顿算符。若 H 不含时，约等号变为等号

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp(-iH\Delta t/\hbar)\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

通常情况下，用有限个正交归一基底 $\Psi_0, \dots, \Psi_{K-1}$ 近似展开 $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ ，这时， H 可以表示成矩阵的形式。

$$H_{ij} = \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle \quad (3)$$

这样，幺正算符 $\exp(-iH\Delta t/\hbar)$ 也可以表示成矩阵。根据定义

$$\exp(-iH\Delta t/\hbar) = 1 + (-iH\Delta t/\hbar) + \frac{1}{2!}(-iH\Delta t/\hbar)^2 \dots \quad (4)$$

此时若把 H 对角化（求解本征方程），得到本征矢列矩阵 \mathbf{P} （单位正交阵）以及本征值矩阵 $\mathbf{\Lambda}$ （对角矩阵），则可进行基底变换变到 H 矩阵的本征空间求解上式

$$\begin{aligned} \exp(-iH\Delta t/\hbar) &= \mathbf{P} \times \text{diag}(e^{-iE_1 t/\hbar}, e^{-iE_2 t/\hbar} \dots e^{-iE_N t/\hbar}) \times \mathbf{P}^{-1} \\ &= \sum_{j=0}^{K-1} P_{ij} e^{-iE_j t/\hbar} P_{jk}^{-1} = \sum_{j=0}^{K-1} P_{ij} P_{kj} e^{-iE_j t/\hbar} \end{aligned} \quad (5)$$

要说明的是，这种算法的误差（除数值计算误差）来源于两个方面，第一是用 $\exp(iH\Delta t/\hbar)$ 代替 $\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt \cdot H(t)\right)$ ，但如果不含时就没有该误差，第二是有限数量的基底不具有完备性，这个误差可以随着基底数量增加而减小。

Lanczos 算法

在以上的算法中, 选取施密特正交归一化的 Krilov 基底作为基底. 令 $\Psi_0 \equiv \Psi(\mathbf{r}, t)$, K 阶的 Krilov 基底为

$$\{|\Psi_0\rangle, H|\Psi_0\rangle, H^2|\Psi_0\rangle \dots H^{K-1}|\Psi_0\rangle\} \quad (6)$$

我们把正交归一化的基底记为

$$\{|\Psi_0\rangle, |\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \dots |\Psi_{K-1}\rangle\} \quad (7)$$

这样, 用其展开哈密顿算符

$$H_{ij} = \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle \quad (8)$$

在算法上, 本来我们可以按部就班地按照以上步骤做, 然而由于 Krilov 基底的性质, 可以通过一些定理 (见词条最后) 大大减少计算量. 正交归一化步骤如下

1. 如果 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 没有归一化, 将其进行归一化 $|\Psi_0\rangle = \Psi(\mathbf{r}, t) / \langle \Psi(\mathbf{r}, t) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$.
2. 把 Ψ_1 进行施密特正交化, 令

$$|\tilde{\Psi}_1\rangle = (1 - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) |\Psi_1\rangle \quad |\Psi_1\rangle = |\tilde{\Psi}_1\rangle / \langle \tilde{\Psi}_1 | \tilde{\Psi}_1 \rangle \quad (9)$$

3. 现在起我们令 $\beta_j = \langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle$.

定理 1

对以上定义的基底

$$(1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - |\Psi_{j-1}\rangle \langle \Psi_{j-1}| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) H^{j+1} |\Psi_0\rangle \quad (10)$$

与

$$(1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - |\Psi_{j-1}\rangle \langle \Psi_{j-1}| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) H |\Psi_j\rangle \quad (11)$$

共线. 故现在起采用后者进行正交化.

定理 2

$$\langle \Psi_{j-1} | H | \Psi_j \rangle = \sqrt{\langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle} = \beta_j \quad (12)$$

4. 把 $H^2 |\Psi_0\rangle$ 进行施密特正交化，令 $\alpha_i = \langle \Psi_i | H | \Psi_i \rangle$ ，根据两个定理，正交化结果也可以写成

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_2\rangle &= (1 - |\Psi_1\rangle \langle \Psi_1| - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|)H|\Psi_1\rangle \\ &= H|\Psi_1\rangle - \alpha_1|\Psi_1\rangle - \beta_1|\Psi_0\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

5. 再次归一化 $|\Psi_2\rangle = |\tilde{\Psi}_2\rangle / \langle \tilde{\Psi}_2 | \tilde{\Psi}_2 \rangle = |\tilde{\Psi}_2\rangle / \beta_2$

定理 3

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}_{j+1}\rangle &= (1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|)H|\Psi_j\rangle \\ &= (1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - |\Psi_{j-1}\rangle \langle \Psi_{j-1}|)H|\Psi_j\rangle \\ &= H|\Psi_j\rangle - \alpha_j|\Psi_j\rangle - \beta_j|\Psi_{j-1}\rangle \end{aligned} \quad (14)$$

这就是最简洁的正交化公式。比起最原始的正交化

$$|\tilde{\Psi}_{j+1}\rangle = (1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|)H^{j+1}|\Psi_0\rangle \quad (15)$$

定理 3 只用到了一个矩阵-矢量乘法，两个矢量数乘和两个矢量减法。

接下来只要对 $j = 2, 4, 5 \dots K-1$ 不断重复定理 3 中的正交化和归一化，就可以得到所有正交归一基底 $|\Psi_j\rangle$ 。

现在我们来求该基底下的 **H** 矩阵。根据 α_i 的定义以及定理 2 可以发现它们分别是矩阵的主对角元和副对角元。

定理 4

在正交归一基底 $|\Psi_j\rangle$ 中, 矩阵 \mathbf{H} 是对称三对角矩阵. 所以我们已经顺便求出了所有的矩阵元!

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{K-1} \\ & & & \beta_{K-1} & \alpha_{K-1} \end{pmatrix} \quad (16)$$

该矩阵具有维数小, 易求本征问题的优势.

定理 1 证明

根据施密特正交化的性质, Krilov 基底的前 j 项的与 $|\Psi_0\rangle \dots |\Psi_j\rangle$ 展开同一空间. 所以 $H^j |\Psi_0\rangle = c_j |\Psi_j\rangle + \dots + c_0 |\Psi_0\rangle$, 所以 (以下所有系数只是用来表示线性组合, 具体值不重要)

$$\begin{aligned} H^{j+1} |\Psi_0\rangle &= c_j H |\Psi_j\rangle + H(c_{j-1} |\Psi_{j-1}\rangle \dots + c_0 |\Psi_0\rangle) \\ &= c_j H |\Psi_j\rangle + H(c'_{j-1} H^{j-1} |\Psi_0\rangle + c'_{j-2} H^{j-2} |\Psi_0\rangle \dots + c'_0 |\Psi_0\rangle) \\ &= c_j H |\Psi_j\rangle + (c'_{j-1} H^j |\Psi_0\rangle + c'_{j-2} H^{j-1} |\Psi_0\rangle \dots + c'_0 |\Psi_0\rangle) \\ &= c_j H |\Psi_j\rangle + (c''_{j-1} |\Psi_j\rangle + c''_{j-2} |\Psi_{j-1}\rangle + \dots + c''_0 |\Psi_0\rangle) \end{aligned} \quad (17)$$

把 $H^{j+1} |\Psi_0\rangle$ 施密特正交归一化

$$\begin{aligned} &(1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) H^{j+1} |\Psi_0\rangle \\ &= c_j (1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) H |\Psi_j\rangle \\ &\quad + (1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) (c''_{j-1} |\Psi_j\rangle + c''_{j-2} |\Psi_{j-1}\rangle + \dots + c''_0 |\Psi_0\rangle) \\ &= c_j (1 - |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) H |\Psi_j\rangle \end{aligned} \quad (18)$$

定理 2 证明

要证 $\langle \Psi_{j-1} | H | \Psi_j \rangle = \sqrt{\langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle}$, 即证 $\langle \Psi_{j-1} | H | \tilde{\Psi}_j \rangle = \langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle$, 即证 $\langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle = \langle \tilde{\Psi}_j | H \Psi_{j-1} \rangle$ 而

$$\langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle = \langle \tilde{\Psi}_j | (1 - |\Psi_{j-1}\rangle \langle \Psi_{j-1}| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) H |\Psi_{j-1}\rangle \quad (19)$$

由于上式中 $\langle \tilde{\Psi}_j | (|\Psi_{j-1}\rangle \langle \Psi_{j-1}| - \dots - |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|) = 0$

$$\langle \tilde{\Psi}_j | \tilde{\Psi}_j \rangle = \langle \tilde{\Psi}_j | H | \Psi_{j-1} \rangle \quad (20)$$

定理 3 证明

要证明定理 3, 即证, 对 $n \leq j-2$, 有 $\langle \Psi_n | H | \Psi_j \rangle = 0$, H 为厄米算符时即证 $\langle \Psi_j | H | \Psi_n \rangle = 0$, 即证对 $m \geq j+2$, $\langle \Psi_m | H | \Psi_j \rangle = 0$. 在定理 1 的证明类似, 我们知道

$$\begin{aligned} H | \Psi_j \rangle &= H(c_j H^j | \Psi_0 \rangle + \dots + c_0 | \Psi_0 \rangle) = c_j H^{j+1} | \Psi_0 \rangle + \dots + c_0 H | \Psi_0 \rangle \\ &= c'_j | \Psi_{j+1} \rangle + \dots + c'_0 | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (21)$$

所以对 $m \geq j+2$ 有

$$\langle \Psi_m | H | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_m | (c'_j | \Psi_{j+1} \rangle + \dots + c'_0 | \Psi_0 \rangle) = 0 \quad (22)$$

定理 4 证明

首先证明 **H** 是三对角矩阵. 即证 $m \geq j+2$ 或 $m \leq j-2$ 时 $\langle \Psi_m | H | \Psi_j \rangle = 0$. $m \geq j+2$ 的情况在证明 3 中已经证明, 只需证明另一种情况. 对厄米矩阵, $\langle H \Psi_m | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_m | H | \Psi_j \rangle = 0$, 取复共轭, 即 $\langle \Psi_j | H | \Psi_m \rangle = 0$. 可见左边的角标的确小于等于右边的角标减 2, 证毕.

然后证明 **H** 是实矩阵, 考虑到厄米矩阵 $H_{mn} = H_{nm}^*$ 的性质, 只需要证明 $H_{j,j+1}$ 是实数. 对任意 $j = 2 \dots K-1$

$$\begin{aligned} H_{j,j+1} &= \langle \Psi_j | H | \Psi_{j+1} \rangle = \langle \Psi_j | H(H | \Psi_j \rangle - \alpha_j | \Psi_j \rangle - \beta_j | \Psi_{j-1} \rangle) \\ &= \langle \Psi_j | H^2 | \Psi_j \rangle - \alpha_j \langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle - \beta_j \langle \Psi_j | H | \Psi_{j-1} \rangle \end{aligned} \quad (23)$$

易证 $\langle \Psi_j | H^2 | \Psi_j \rangle$, α_j 及 β_j 是实数, 只需要证明 $\langle \Psi_j | H | \Psi_{j-1} \rangle$ 是实数即可, 即证 $\langle \Psi_{j-1} | H | \Psi_j \rangle$ 是实数, 重复上述论证, 即证 $\langle \Psi_{j-2} | H | \Psi_{j-1} \rangle$ 是实数..., 即证 $\langle \Psi_1 | H | \Psi_0 \rangle$ 是实数, 即证 $\langle \Psi_0 | H | \Psi_1 \rangle$ 是实数, 即证 $\langle \Psi_0 | H | \tilde{\Psi}_1 \rangle$ 是实数. 而

$$\langle \Psi_0 | H | \tilde{\Psi}_1 \rangle = \langle \Psi_0 | H(H | \Psi_0 \rangle - \alpha_0 | \Psi_0 \rangle) = \langle \Psi_0 | H^2 | \Psi_0 \rangle - \alpha_0 \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle \quad (24)$$

显然是实数. 以上的思路是数学归纳法的逆过程.

Crank-Nicolson TDSE 笔记

氢原子的数值误差

解三维氢原子的时候，为了防止势能为无穷，中心点要选在八个格点中间.

首先用的 $60 \times 60 \times 60$ a.u. 的范围， $401 \times 401 \times 401$ 的格点，0.032 a.u. 的时间步长.

TDSE 传播时，如果把 log 概率灰度图的范围取得很大 (10^{-25} 左右)，即使没有电场，也会出现一个方形的花纹很快地扩散出来，然后波函数还会向外温柔地扩散.

比较了用解析的基本波函数和 Imaginary Time 得到的基本波函数，虽然两者都有类似情况，但是后者的程度明显要轻.

爱华说 XUV 的强度并不太重要，频率越大，氢原子的截面就越小，所以反而需要更大的强度才能电离出同样的概率. 但只要不超过 1×10^{16} W/cm² (0.5338 a.u.) 就好.

Virtual Detector 的两个问题

一个是如何电场还没有完全消失，那么电离出来的波函数仍然会随着电场振动，那么检测到的动量分布就不可靠了.

第二个是如何用 histogram 的办法来获得动量分布，那么有可能数据点不够，bin 太窄又波动大，bin 太宽又分辨率不够. 如果像 Uwe 的论文那样通过 interpolate 的方法来获取动量分布，那么要求 Virtual Detector 检测到的“概率-时间”曲线和“动量-时间”曲线都非常平滑，用高斯波（无势能）测试的时候还足够平滑，一旦用氢原子电离的波函数就不行了. 而且电离出的波函数检测到的动量会上下波动（有可能是因为电场），这样就要把“动量-时间”函数分成单调的分段，而且在导数为零的时候，还有可能会 blowup.

所有考虑了一下还是想做傅里叶变换. 一是即使 Virtual Detector 做了种种修改后出结果了，也可以用 FFT 进行验证. 二是如果 FFT 比较好，就直接用呗. FFT 的一个限制就是要等到波函数电离完成后，最远的波函数也不能超过 box 的边界，还有就是电离出的波函数最好远离原子核，少受库仑力的影响，这样

才能保证接下来的动量谱不随时间变化.

从高斯波包的实验来看，即使在理想情况下 3D 的 local Virtual Detector 和 FFT 也是不同的，因为高斯波包会随时间变大，概率波也会更稀，所以 Virtual Detector 检测到的动量分布并不是对称的，而是前面胖后面瘦.

另外我觉得即使使用 FFT 也需要一圈 absorber 用于吸收开始是的方形花纹噪音.

Streaking

SFA 公式中当 XUV 为零时，IR 是不会对能量谱造成任何影响的. 那么 TDSE 中会吗？理想的情况是，IR 不会产生任何电离，只会使基态波函数发生微弱的形变. 一旦 XUV 电场结束后，IR 电场同样不会产生任何电离，只会让已经电离出来的波函数加速和减速.

那接下来 IR 对电离出的波函数的影响应该完全模拟吗？如果是的话，那么将需要一个很大的 box，Ivanov paper 中的 TDSE 用了 5000 个径向格点（不等间距），2000 个原子单位的长度，我的 GPU 代码是绝对实现不了这个的.

有一种想法是在电离波函数离开 box 之前将它们 FFT 分解成平面波，然后在用 Volkov State 的解析办法分析接下来每个平面波在剩下的 IR 场中的变化情况，这样或许是可行的.

Streaking

这里的目地是用 TDSE 模拟出氢原子的 Streaking 谱，XUV 和 IR 参数就用 Ivanov 的论文（Attosecond recorder of ...）中的.

XUV 是 250 as, 41 eV (动能 1.007 a.u.)，还有 varying ellipticity，最大强度约 5×10^{-4} a.u. (不重要)，IR 是 800 nm, 7.2 fs (297.5 a.u.)，强度 3.5×10^{12} W/cm² (0.01 a.u.).

用经典电子来估计 TDSE 所需 box 的大小，速度为 $\sqrt{2}$ 左右，若最大传播时间为 IR 长度的两倍，可以走 841 a.u.，比我测试 XUV 用的 60 a.u. 盒子大了一个数量级. 再加上我的直角坐标网格不能改变长度，结果就非常地惨烈了.

唯一有可能挽救我的程序的方法就是只模拟到 XUV 消失，这时只要保证波函数还在盒内就可以做一个 FFT 然后用 Volkov 波函数来解析传播. 但是 XUV 消失的时候电离波包也就离原子核 40 a.u. 左右，所以如果这时开始忽略

库仑力，那么动能谱将会有 2.5% 的误差，这应该是不能接受的。即使波函数继续传播到 100 a.u. 开外，动能普也会有 1% 的误差。所以师兄还是老的辣，第一反应就是不行。

所以最后的解决方法只能是用参考文献 29 的超级复杂的球坐标 TDSE 代码了（Fortran）。

SCID-TDSE

看来 TDSE Streaking 真的远远没有我想的那么简单。试了一下 State of Art 的 SCID-TDSE 代码，单核 CPU 就完爆我的 GPU 代码了！而且 Memory 使用更是少得不能再少。这个算法是在球坐标中把波函数在球谐函数展开，具体见论文就好，总之这个算法超级复杂。

好不容易用 Matlab 写好了处理运行结果的程序，用傅里叶变换分析最后的波函数谱。但出来以后动量普并不是一个完美的波包。然而师兄一跑出来就是！师兄真的好猛啊，想起了当年的坦兄。

傅里叶变换的一个问题是，如果波函数不做任何处理，由于电离出的总概率很小，那么基态波函数的动量谱将会把电离出的波包的动量谱覆盖。我的第一反应是挖掉中间的波函数，而师兄的做法是挖掉 $l = 0$ 的分量，理由是根据微扰理论/选择定理，电离出来的 $l = 1$ 。但我试过以后发现如果电离波包和基态完全分离两种做法并无差别，但如果重叠的，还是师兄的做法好。另外用我的参数 $2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 的光强，比师兄的 1×10^{10} 到 1×10^{11} 强很多，我的电离总概率是 $1/1000$ 左右，而师兄的是 7.6×10^{-7} ，差了三个数量级。结果他的动量谱是高斯的，而我的是一个不对称的包；他的电离波包是和基态完全分离的，我的不是。根据微扰理论，电离概率应该适合电场平方成正比的。

FROG

如果我们要测量线偏振的超快激光脉冲的波形（即电场关于时间的函数），我们不能直接用仪器测量，因为电子元件的时间分辨率远远不够。但我们可以使用 Frequency Resolved Optical Gating (FROG)。FROG 有许多不同的实现方法，这里只讨论比较常见的 SHG FROG (Second Harmonic Generation FROG) 和 PCGPA。

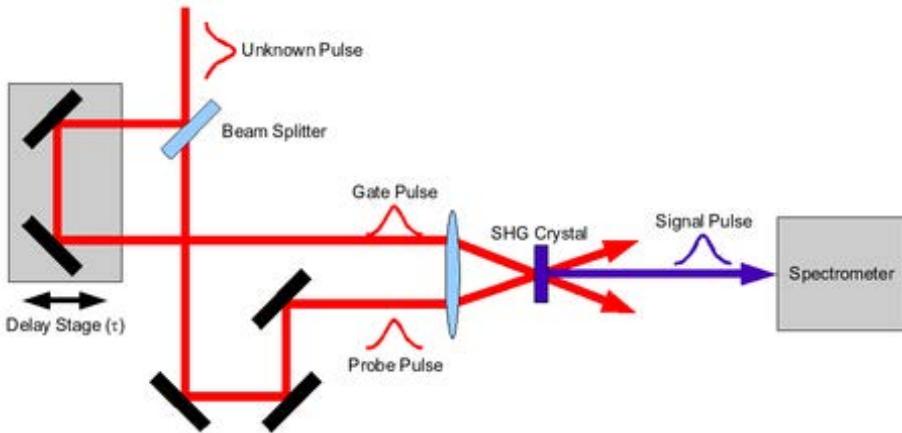


图 1: SHG FROG 的光路 (图片来自 Wikipedia)

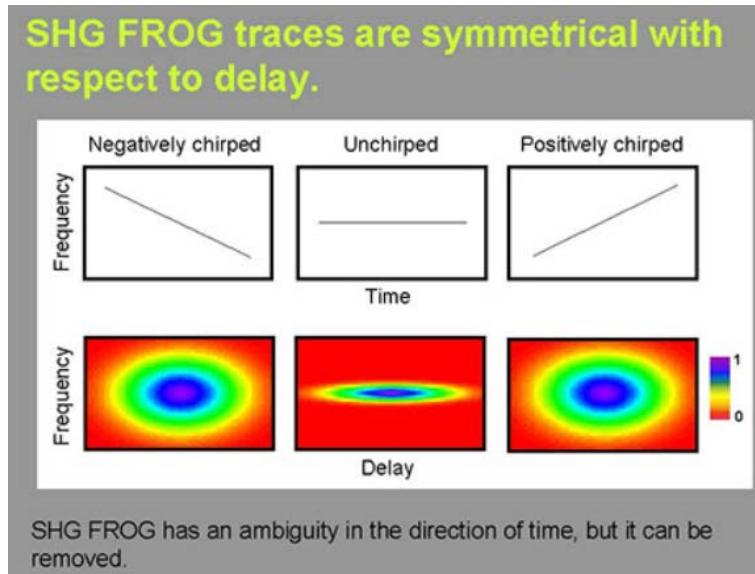


图 2: SHG FROG trace (图片来自网络)

Frog 的大概原理就是把被测量的脉冲 (prob) $f(t)$ 和令一个脉冲 (gate) $g(t)$ 叠加 (注意 $f(t)$ 和 $g(t)$ 都是实函数), 然后通过一个二阶非线性介质产生一个 $f(t)g(t)$ 脉冲并分离出来, 再测量光谱 (即傅里叶变换). 接下来我们可以控制两个脉冲的相对延迟 (time delay) τ , 就得到不同延迟下 $f(t - \tau)g(t)$ 的光谱, 也就是一个二维函数, 叫做 **FROG trace** (图 2). 很多情况下, gate 就是 prob 通过一个 beam splitter 分出来的, 实验光路如图 1 所示.

$$a(\omega, \tau) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t - \tau) g(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \quad (1)$$

只要用特定的算法，就可以从式 1 中解出 $f(t)$ 和 $g(t)$.

PCGPA 算法

PCGPA (Principal Component General Projection Algorithm) 就是从式 1 中解出 $f(t)$ 和 $g(t)$ 的一种常见算法。在得到我们假设 $f(t)$ 和 $g(t)$ 都是等时间间隔的离散点 f_1, f_2, \dots, f_N 和 g_1, g_2, \dots, g_N ，可以看成两个列矢量。我们先来做两矢量的外积，即

$$\mathbf{f}\mathbf{g}^T = \begin{pmatrix} f_1g_1 & \dots & f_1g_N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_Ng_1 & \dots & f_Ng_N \end{pmatrix} \quad (2)$$

然后我们把第 i 行向左移动 $i - 1$ 个元（左边多出的矩阵元补到右边），得到

$$\begin{pmatrix} f_1g_1 & f_1g_2 & \dots & f_1g_N \\ f_2g_2 & f_2g_3 & \dots & f_2g_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_Ng_N & f_Ng_1 & \dots & f_Ng_{N-1} \end{pmatrix} \quad (3)$$

现在可以发现每一列恰好是 $f(t - \tau)g(t)$ 的离散形式²，第 i 列 $\tau = (i - 1)\Delta t$ 。然而当 $i > N/2$ 的时候，更自然的理解是 $\tau = (i - N)\Delta t$ 。例如与其认为第 N 列是 g 向上移动了 $N - 1$ 个元，倒不如认为是向下移动了 1 个元。根据这种思想，我们可以把矩阵左半和右半调换得到

$$\begin{pmatrix} f_{1g_{N/2+1}} & f_{1g_{N/2+2}} & \dots & f_{1g_{N/2}} \\ f_{2g_{N/2+2}} & f_{2g_{N/2+3}} & \dots & f_{2g_{N/2+1}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{Ng_{N/2}} & f_{Ng_{N/2+1}} & \dots & f_{Ng_{N/2-1}} \end{pmatrix} \quad (4)$$

这样，从左到右的每列分别对应从 $\tau = -(N/2)\Delta t, \dots, (N/2 - 1)\Delta t$.

²唯一的区别是从最上面移出的 g_i 跑到了最下面，而在实验中最下面应该由 0 来填补。但如果 \mathbf{f} 和 \mathbf{g} 矢量的首尾都有足够多的 0，这个问题就自动解决了。

现在我们对每一列做离散傅里叶变换（注意前后都要 fftshift），就得到了含相位的 Frog trace 矩阵，其中的每一列都是式 1 中的

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t - \tau) g(t) e^{-i\omega t} dt \quad (5)$$

Crank-Nicolson 算法（一维）

薛定谔方程为

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi = i \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1)$$

用 Crank-Nicolson 或 Caley scheme³ 得到的结果是

$$\left(1 + \frac{i}{2} \mathbf{H} \Delta t\right) \psi^{n+1} = \left(1 - \frac{i}{2} \mathbf{H} \Delta t\right) \psi^n \quad (2)$$

其中二阶导数用三点差分计算，得

$$\begin{aligned} \psi_i^{n+1} - \psi_i^n &= \frac{i \Delta t}{4 \Delta x^2} (\psi_{i-1}^n - 2\psi_i^n + \psi_{i+1}^n + \psi_{i-1}^{n+1} - 2\psi_i^{n+1} + \psi_{i+1}^{n+1}) \\ &\quad - \frac{i \Delta t}{2} (V_i^n \psi_i^n + V_i^{n+1} \psi_i^{n+1}) \end{aligned} \quad (3)$$

令 $\alpha = i \Delta t / (4 \Delta x^2)$, $\beta = i \Delta t / 2$, 整理可得

$$-\alpha \psi_{i-1}^{n+1} + (1 + 2\alpha + \beta V_i^{n+1}) \psi_i^{n+1} - \alpha \psi_{i+1}^{n+1} = \alpha \psi_{i-1}^n + (1 - 2\alpha - \beta V_i^n) \psi_i^n + \alpha \psi_{i+1}^n \quad (4)$$

其中 $\psi_i^n = \psi(x_i, t_n)$, $V_i^n = V(x_i, t_n)$.

我们把一个区间划分成 $N_x - 1$ 段等长的区间，并令 N_x 个格点为 $x_1 \dots x_{N_x}$. 最简单的边界条件是取 $\psi(x_1) = \psi(x_{N_x}) = 0$. 这样式 4 中的 i 可以取 $i = 2 \dots N_x - 1$, 得到 $N_x - 2$ 条式子，其中只有 $\psi_2^{n+1} \dots \psi_{N_x-1}^{n+1}$ 这 $N_x - 2$ 个未知量，每条式子最多包含连续 3 个未知量. 将线性方程用矩阵表示，就可以得到一个三对角矩阵（第一行和最后一行只有两个系数）.

但事实上，还可以继续减少计算量. 将式 4 整理后得

$$\left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4} \mathbf{H} \Delta t\right) (\psi^{n+1} + \psi^n) = \psi^n \quad (5)$$

解这个方程，再减去 ψ^n 即可.

³二者是一回事，见 Numerical Recipes 19.2

虚时间

使用虚时间后，式 4 和式 5 分别变为

$$\left(1 + \frac{1}{2}\mathbf{H}\Delta t\right)\psi^{n+1} = \left(1 - \frac{1}{2}\mathbf{H}\Delta t\right)\psi^n \quad (6)$$

$$\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\mathbf{H}\Delta t\right)(\psi^{n+1} + \psi^n) = \psi^n \quad (7)$$

虚时间法求基态波函数

这里介绍一种求解基态波函数的数值方法。如果薛定谔方程中势能不含时间，用分离变量法解薛定谔方程的结果是

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) e^{-iE_i t} \quad (1)$$

其中 $\psi_i(\mathbf{x})$ 是能量为 E_i 的能量本征态。

现在若要求基态，我们可以用虚数时间，即 $t' = -it$ ，使得含时波函数变为

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_i \psi_i(\mathbf{x}) e^{-E_i t} \quad (2)$$

这样，激发态衰减的速度就都比基态要快，当 $t \rightarrow +\infty$ 的时候，就只剩下基态波函数了。

假设我们有一个求解 TDSE 的数值方法，那么我们只需要用其求解方程

$$\mathbf{H}\Psi = -\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (3)$$

然后每个循环对波函数进行归一化即可。因为该方程的分离变量解就是式 2.

函数求值

函数求值归根结底，就是找到一个解析公式，用加减乘除表示一个函数。如果算法没有用到近似，有限精度和任意精度都是一样的，只是每个数占的内存不同罢了。任意精度的加减乘除和开根号参考 Numerical Recipes 最后一节。

最常见的展开有三种，分别是泰勒展开，渐进展开，以及连续分数。这些展开在 functions.wolfram.com 都可以找到。

接下来是如何计算级数或连续分数。求级数的方法一般是用

$$f_N(x) = \sum_{n=0}^N c_n x^n = (\dots ((c_n x + c_{n-1})x + c_{n-2} \dots)x + c_0) \quad (1)$$

这么做误差和直接对多项式求和一样，但计算量却少了很多。将上式中的 x 换成 $1/x$ 就是渐进展开的形式。注意我们可以在计算开始前估计误差，根据精度要求得到我们需要的项数。

显然， $|x|$ 越小时泰勒展开收敛得越快，而 $|x|$ 越大时渐进展开收敛得越快。再来看连续分数

$$f_N(x) = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots \frac{a_N}{b_N}}} \quad (2)$$

也可以表示为

$$f_N(x) = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \dots \frac{a_N}{b_N}}}} \quad (3)$$

其中 a_n 和 b_n 都可以是 x 的函数。

乍看之下连续分数只能从右往左求，其实不然。由递归法可以证明

$$f_n = \frac{A_n}{B_n} \quad (4)$$

其中

$$A_n = b_n A_{n-1} + a_n A_{n-2} \quad B_n = b_n B_{n-1} + a_n B_{n-2} \quad (5)$$

$$A_{-1} = 1 \quad B_{-1} = 0 \quad A_0 = b_0 \quad B_0 = 1 \quad (6)$$

还有一种 Steed's 方法，详见 Numerical Recipes。正向求和的好处是可以判断什么时候开始收敛。据说特定情况下连续分数收敛较快，但具体什么时候用还有待考察。

另外两种不明觉厉的算法分别是切比雪夫多项式（Chebyshev Polynomial）和算数几何平均（Algorithmic-Geometric Mean, AGM，后者也通常被用于计算高精度的 π ，且有二次收敛。