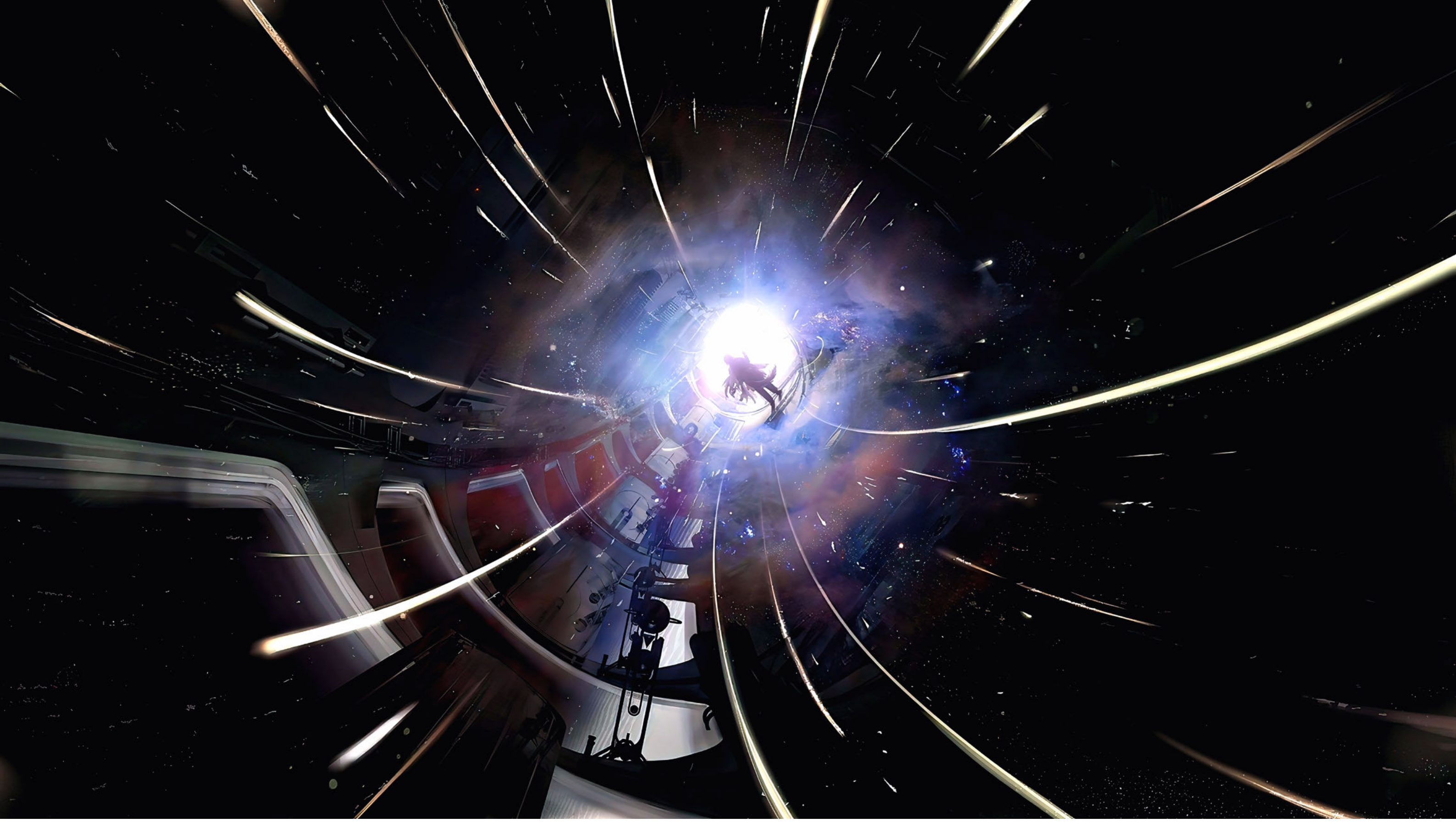

Quantum Mechanics

作者：徐易捷

时间：2023 年 5 月 23 日

目录

Chapter 1

Mathematics tools

§ 1.1 Dual spaces and tensor

此部分的不少内容参考的是 https://zhuanlan.zhihu.com/p/508715535, 本打算通过该文快速了解张量, 但看完之后感觉还是有很多内容没讲清楚, 故该部分我的 note 的确存在一些歧义的地方, 日后再进行完善.

1.1.1 基础概念的引入

定义 1.1.1

对于域 F 上的线性空间 V 我们称 $f \in \mathrm{Hom}(V, F)$ 为一个线性函数.

命题 1.1.1

任意一个 V 到 F 的映射是线性函数, 当且仅当其还满足

$$f(a\alpha + b\beta) = af(\alpha) + bf(\beta), \quad \forall \alpha, \beta \in V; a, b \in F \tag{1.1}$$

由于我们知道两个有限维线性空间 V, U 之间的线性映射全体 $\mathrm{Hom}(V, U)$ 是一个线性空间, 其维数是

$$\dim(\mathrm{Hom}(V, U)) = \dim V \dim U \tag{1.2}$$

由于域 F 本身就是一个 1 维的域 F 上的线性空间, 所以容易发现有

定义 1.1.2: Dual spaces

对于一个域 F 上的线性空间 V, 称 V 上的所有线性函数全体 $\mathrm{Hom}(V, F)$ 为其对偶空间, 其也可以记录为 V^*, 由于 $\dim V = \dim V^*$, 所以自然有

$$V \cong V^* \tag{1.3}$$

研究一个有限维线性空间的出发角度往往是从基的角度出发的, 若 $\{\alpha_i\}_{1 \le i \le n}$ 是 V 的一个

基, 那么容易发现满足

$$f_i(\alpha_j) = \delta_{ij} \tag{1.4}$$

的函数族 $\{f_i\}_{1\leq i\leq n}$ 是 V^* 的一组基, 此时通过定义可以发现如下性质 (使用 Einstein 求和约定)

$$\alpha = f_i(\alpha)\alpha_i; \quad \forall\alpha \in V \tag{1.5}$$

$$f = f(\alpha_i)f_i; \quad \forall f \in V \tag{1.6}$$

额外的, 我们可以发现一个显然的同构映射

$$\begin{aligned} \sigma: \quad V &\longrightarrow V^* \\ \alpha = x_i\alpha_i &\longmapsto x_i f_i =: \alpha^* \end{aligned} \tag{1.7}$$

有了这个同构映射, 若我们考虑 $F = \mathbb{R}$ 则我们能自然地诱导出一个 V 上的内积

$$(\alpha, \beta) = \alpha^*\beta \tag{1.8}$$

从而使得 V 变为了一个内积空间.

注 1.1.1

若 $F = \mathbb{C}$ 则修改 σ 定义为

$$\begin{aligned} \sigma: \quad V &\longrightarrow V^* \\ \alpha = x_i\alpha_i &\longmapsto \overline{x}_i f_i =: \alpha^* \end{aligned} \tag{1.9}$$

(其中 $\overline{x}$ 是 x 的共轭) 可以同样地自然诱导出一个内积使得 V 变为一个酉空间.

现在我们来挖掘对偶空间为什么称之为对偶的原因, 首先容易发现

$$V \overset{\sigma}{\cong} V^* \overset{\tau}{\cong} V^{**} \tag{1.10}$$

然而 V 和 V^{**} 之间的联系远比普通的同构关系更紧密, 这是因为对于 $\alpha^{**} \in V^{**}, f \in V^*$ 有

$$\alpha^{**}(f) = (\alpha^*, f) = x_i f(\alpha_i) = f(x_i\alpha_i) = f(\alpha) \tag{1.11}$$

从而

$$\begin{aligned} \tau\circ\sigma: \quad V &\longrightarrow V^{**} \\ \alpha &\longmapsto \alpha^{**} \end{aligned} \tag{1.12}$$

是一个与基的选取无关的同构映射, 我们称呼这样的同构映射为*自然同构*, 其内蕴的实质是我们能在跟广泛的意义上 (相较于同构而言) 等同的看待 V 与 V^{**} 从而

$$V \cong V^* \cong V^{**} \overset{\text{自然同构}}{=} V \tag{1.13}$$

可以 V 经过两次对偶之后又回到了自己. 这也就是为什么称 V^* 为其对偶空间的主要原因.

注 1.1.2

补充性的说明以下对偶基的存在性, 我们考虑到 $\dim \mathrm{Hom}(V, F) = \dim F^n$, 从而对于给

定的一组基 $\{\alpha_i\}$ 可以发现

$$\begin{aligned}\sigma: \quad \mathrm{Hom}(V,F) &\longrightarrow F^n \\ f &\longmapsto (f(\alpha_1), f(\alpha_2), \cdots, f(\alpha_n))\end{aligned} \tag{1.14}$$

是一个 Hom 到 F^n 的同构映射, 此时若令

$$\varepsilon_i = (0,\cdots,0,1,0,\cdots,0) \tag{1.15}$$

其中 q 在第 i 个位置, 那么容易发现 $\{\sigma^{-1}(\varepsilon_i)\}$ 就是 V^* 的对偶基.

1.1.2 一些概念的优化

事实上之前所给出的基 $\{\alpha_i\}$ 以及对偶基 $\{f_i\}$ 的指代十分的容易混淆, 现在将优化的术语以及一些结论一并标出如下:

1. 线性空间 V 的基为 $\{e_\mu\}$;
2. 对偶空间 V^* 对应于 $\{e_\mu\}$, 其需要满足 $e^\mu e_\nu = \delta^\mu{}_\nu$;
3. V 中的元素 v 总可表为

$$v = v^\mu e_\mu = v(e^\mu)e_\mu = v^{**}(e^\mu)e_\mu = e^\mu(v)e_\mu \tag{1.16}$$

因为 $v(e^\nu) = v(e^\mu)\delta_\mu{}^\nu = v(e^\mu)e^\nu e_\mu = v(e^\mu){e_\mu}^{**}e^\nu = v(e^\mu)e_\mu e^\nu$

4. V^* 中的元素 v^* 从可表为

$$v^* = v^*_\mu e^\mu = v^*(e_\mu)e^\mu \tag{1.17}$$

1.1.3 张量以及张量积空间

定义 1.1.3: 张量积空间

对于线性空间 $\{V_i\}_{1\le i\le n}$ 定义它们的张量积空间 $V_1\otimes V_2\otimes\cdots\otimes V_n$ 为

$$V_1\otimes V_2\otimes\cdots\otimes V_n \equiv \{T^{(\cdot,\cdot,\cdots,\cdot)}: V_1^*\times V_2^*\times\cdots\times V_n^* \xrightarrow{linear} F\} \tag{1.18}$$

由于张量积空间中的元素都是映射, 从而若在空间中定义自然的映射的加法和乘法, 那么张量积空间是一个线性空间.

定义 1.1.4: 张量

对于 $v_i\in V_i$, 定义它们的张量积 $v_1\otimes v_2\otimes\cdots\otimes v_n \in \bigotimes_{i=1}^n V_i$ 为

$$(v_1\otimes v_2\otimes\cdots\otimes v_n)^{(\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n)} = v_1^{(\varphi_1)}v_2^{(\varphi_2)}\cdots v_n^{(\varphi_n)} \tag{1.19}$$

其中 $\varphi_i \in V_i^*$

值得注意的是不是所有的 $\bigotimes_{i=1}^n V_i$ 中的元素都可以被表示为 $\bigotimes_{i=1}^n v_i$ 的形式. 事实上考虑到 $v_i \in V_i$ 都是一个线性的映射, 从而上述定义的张量积满足

$$v_1 \otimes \cdots \times (a_j v_{ij}) \times \cdots \otimes v_n = a_j(v_1 \otimes \cdots \otimes v_{ij} \otimes \cdots \otimes v_n) \tag{1.20}$$

命题 1.1.2: 张量积空间的基

如果 $\dim U = m, \dim V = n$ 那么有

$$\dim U \otimes V = \dim \mathrm{Hom}(U^* \times V^*, F) = \dim U^* \times \dim V^* = \dim U \times \dim V = mn \tag{1.21}$$

同时容易发现若 $\{s_\mu\}$ 是 U 的一组基, $\{e_\nu\}$ 是 V 的一组基, 那么

$$\{s_\mu \otimes e_\nu\} \tag{1.22}$$

线性无关, 从而其为 $U \otimes V$ 的一组基. 从而可知道 $\forall T \in U \otimes V$ 都可以表示为

$$T = T^{\mu\nu} s_\mu \otimes e_\nu \tag{1.23}$$

且其中 $T^{\mu\nu}$ 具体可以写为

$$T^{\mu\nu} = T^{(s^\mu, e^\nu)} \tag{1.24}$$

有了上述的概念现在可以给出

定义 1.1.5: 线性空间 V 上的 (k,l) 型张量

线性空间 V 上的 (k,l) 型张量 T 就是 k 个 V 和 l 个 V^* 的张量积空间中的元素, 即

$$T \in \underbrace{V \otimes \cdots \otimes V}_{k\text{个}} \otimes \underbrace{V^* \otimes \cdots \otimes V^*}_{l\text{个}} \equiv \mathscr{T}_V(k,l) \tag{1.25}$$

其也就是下述的多重线性映射

k 个上槽用于输入 V^* 中对偶矢量

$$T^{(\cdot,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,\cdot)} : \underbrace{V^* \times \cdots \times V^*}_{k\text{个}} \times \underbrace{V \times \cdots \times V}_{l\text{个}} \xrightarrow{linear} F \tag{1.26}$$

l 个下槽用于输入 V 中矢量

通过上述的定义可以发现, 矢量作为一个 V^{**} 中元素是一个 (1,0) 型张量, 而 v^* 作为一个 V^* 中的元素是一个 (0,1) 型张量. 即有

$$V = \mathscr{T}_V(1,0), \quad V^* = \mathscr{T}_V(0,1) \tag{1.27}$$

当然张量积之间也可以有张量积的概念

定义 1.1.6: 张量积的张量积

若 $T \in \mathscr{T}_V(k,l), S \in \mathscr{T}_V(m,n)$ 则 T 和 S 的张量积 $T \otimes S$ 为

$$(T \otimes S)^{(\varphi^1,\cdots,\varphi^k,\varphi^{k+1},\cdots,\varphi^{k+m})}_{(v_1,\cdots,v_l,v_{l+1},\cdots,v_{l+n})} := T^{(\varphi^1,\cdots,\varphi^k)}_{(v_1,\cdots,v_l)} S^{(\varphi^{k+1},\cdots,\varphi^{k+m})}_{(v_{l+1},\cdots,v_{L+n})} \tag{1.28}$$

从而

$$T \otimes S \in \mathscr{T}_V(k+m, l+n) \tag{1.29}$$

值得注意的是一般而言

$$T \otimes S \neq S \otimes T \tag{1.30}$$

这是因为槽的输入是由顺序的. 由之前对于张量积空间的讨论可以简单知道

$$\dim \mathscr{T}_V(k,l) = n^{k+l} \tag{1.31}$$

且若 $\{e_\mu\}$ 为 V 的一组基的话, 那么

$$\{e_{\mu_1} \otimes \cdots \otimes e_{\mu_k} \otimes e^{\nu_1} \otimes \cdots \otimes e^{\nu_l}\} \tag{1.32}$$

是 $\mathscr{T}_V(k,l)$ 的一组基且 $\forall T \in \mathscr{T}_V(k,l)$ 有

$$T = T^{\mu_1\cdots\mu_k}_{\nu_1\cdots\nu_l} e_{\mu_1} \otimes \cdots \otimes e_{\mu_k} \otimes e^{\nu_1} \otimes \cdots \otimes e^{\nu_l} \tag{1.33}$$

且展开系数可表示为

$$T^{\mu_1\cdots\mu_k}_{\nu_1\cdots\nu_l} = T^{(e^{\mu_1},\cdots,e^{\mu_k})}_{(e_{\nu_1},\cdots,e_{\nu_l})} \tag{1.34}$$

命题 1.1.3: 张量的退化 (柯里化 Currying)

以一例来一以蔽之, 很符合直观的有, 若

$$V^{(\cdot,\cdot,\cdot)}_{(\cdot,\cdot)} \in \mathscr{T}_V(3,2) \tag{1.35}$$

那么对于给定的 $\varphi, w \in V^*$ 有

$$V^{(\varphi,w,\cdot)}_{(\cdot,\cdot)} \in \mathscr{T}_V(1,2) \tag{1.36}$$

1.1.4 抽象指标与缩并运算

在上一节中我们发现张量积的运算不满足交换律, 如果我们令 $\{e_\mu\}$ 为 V 的一个基那么有

$$e_1 \otimes e_2 \neq e_2 \otimes e_1 \tag{1.37}$$

从而我们必须以张量积的顺序来区分不同的张量积, 然而我们可以换另外一种方法来表示这种顺序, 具体而言我们给参与张量积运算的基矢添加一个字母标号:

$$(e_1)^a(e_2)^b, \quad (e_2)^a(e_1)^b \tag{1.38}$$

用这总标记的话就有

$$(e_1)^a(e_2)^b=(e_2)^b(e_1)^a\neq(e_1)^b(e_2)^a \tag{1.39}$$

从而可知张量积的运算可以带着字母标号交换顺序, 而不可不带着字母标号 (即按照原先给出的交换方法) 交换顺序. 这些字母标号就称为抽象指标. 对于 V 中的基矢 e_μ 习惯将抽象指标写为上标, 而对于对偶空间中的对偶基 e^μ 则习惯将抽象指标写为下标. 当然抽象指标不仅仅局限于基, 对于任意 $v\in V$ 都可以无影响的附带一个抽象指标, 即

$$v=v^a \tag{1.40}$$

如果考虑到之前给出的 $v\in V$ 的恒等式, 那么还有

$$v=v^a=v^\mu\left(e_\mu\right)^a \tag{1.41}$$

类似的对于 $\varphi\in V^*$ 有

$$\varphi=\varphi_a=\varphi_\mu\left(e^\mu\right)_a \tag{1.42}$$

抽象指标也可运用于张量的表示之中, 以 $(2,1)$ 型张量为例子, 有

$$T^{ab}{}_c=T^{\mu\nu}_\rho\left(e_\mu\right)^a\left(e_\nu\right)^b\left(e^\rho\right)_c \tag{1.43}$$

至此我们可以发现有了抽象指标后, 我们可以一眼从指标来看出张量的型号, 因为 *(k,l)* 型张量就具有 k 个抽象上标, l 个抽象下标记. 在书写习惯上, 张量的抽象指标的位置和抽线指标的符号 $(a,b,c,\cdots)$ 应该与槽所对应.

注 1.1.3

一般而言我们在写指标的时候, 会把上下指标错开来写, 比如写为 $T^{ab}{}_c$ 而不是 T^{ab}_c, 原因是只有错开来写我们才能赋予指标一个序, 即断言 "第 i 个指标", 从而才能说第 i 个指标是上标还是下标.

事实上在定义张量的时候完全可以定义出

$$S^a{}_b{}^c=S^\mu{}_\nu\rho(e_\mu)^a(e^\nu)_b(e_\rho)^c \tag{1.44}$$

即不把上标和下标放在一起写, 但不管怎么样如果一个张量一定定义好了, 上下指标以及顺序就不能更改了, 即我们不能一会写 $T^{ab}{}_c$ 一会写 $T^a{}_b{}^c$.

抽象指标之所以叫抽象指标是因为 $a,b,c,\cdots$ 是类似于 $\vec{v}$ 的 $\rightarrow$ 的概念, 是一个符号来表示所修饰的符号的类型的，与之相对的 μ,ν 往往就表示具体的数, 从而它们往往称为具体指标.

注 1.1.4: 指标平衡

虽然抽象指标的字母可以任意选, 但是在书写的时候需要主义指标平衡, 即

$$pv^a+u^a=w^2\quad\checkmark \tag{1.45}$$

但是

$$pv^a+u^b=w^a\quad\times \tag{1.46}$$

注 1.1.5: 线性空间的抽象指标

代表线性空间的符号 V 也是可以被赋予抽象指标的, 比如 V^a 就指的是 v^a 所在的空间, φ_b 所在的空间就可以即为 V_b(注意, 这实际上是 V 的对偶空间), 从而 $T^{ab}{}_c$ 所在的空间就是

$$V^a \otimes V^b \otimes V_c \overset{\text{简化}}{=} V^a V^b V_c \overset{\text{简化}}{=} V^{ab}_c \tag{1.47}$$

1.1.5 缩并运算

在之前的讨论中我们没有涉及抽象指标的字母出现重复的情况, 现在对于同一字母出现在一对抽象上下标中的情况, 规定其运算 (对于基和对偶基中的元素) 为

$$\left(e^\mu\right)_a \left(e_\nu\right)^a = e^\mu(e_\nu) = \delta^\mu{}_\nu \tag{1.48}$$

不难看出, 上面定义的这个规则意味着 $\left(e^\mu\right)_a \left(e_\nu\right)^a$ 代替了 $e^\mu(e_\nu)$. 从而对于对偶矢量和矢量的作用, 也就定义 $\varphi_a v^a$ 为 $\varphi(v)$. 值得注意的是我们仅允许同一字母出现在一上一下的两个抽象指标之中, 而不允许同一个字母重复出现在上指标或者下指标之中. 之前的一些结论通过刚刚提及的语言可以改写为

1. $\left(e^\mu\right)_a \left(e_\nu\right)^a = \delta^\mu{}_\nu$;
2. $v^a = v^\mu \left(e_\mu\right)^a$;
3. $\varphi_a = \varphi_\mu (e^\mu)_a$;
4. $v^\mu = v^a \left(e^\mu\right)_a$;
5. $\varphi_\mu = \varphi_a \left(e_\mu\right)^a$;
6. $\varphi_a v^a = \varphi_\mu v^\mu$

因为 $\varphi_a v^a = \varphi(v) = (\varphi_\mu e^\mu)\,(v^\nu e_\nu) = \varphi_\mu v^\nu e^\mu(e_\nu) = \varphi_\mu v^\mu$

在这套规则之下, 张量作用于矢量、对偶矢量的结果可以表示为

命题 1.1.4

$$T^{(\varphi,\omega)}_{(v)} = T^{ab}{}_c \varphi_a \omega_b v^c \tag{1.49}$$

证明.

$$LHS = T^{(\varphi,\omega)}_{(v)} = \left(T^{\mu\nu}{}_\rho e_\mu \otimes e_\nu \otimes e^\rho\right)^{(\varphi,\omega)}_{(v)} = T^{\mu\nu}{}_\rho e^{(\varphi)}_\mu e^{(\omega)}_\nu e^\rho_{(v)} \tag{1.50}$$

$$RHS = T^{ab}{}_c \varphi_a \omega_b v^c = \left(T^{\mu\nu}{}_\rho \left(e_\mu\right)^a \left(e_\nu\right)^b \left(e^\rho\right)_c\right) \varphi_a \omega_b v^c = T^{\mu\nu}{}_\rho ((e_\mu)^a \varphi_a)((e_\nu)^b \omega_b)((e^\rho)_c v^c) \tag{1.51}$$

而考虑到 $e^{(\varphi)}_\mu = e_\mu(\varphi) = (e_\mu)^a \varphi_a$. □

从上述的证明之中可以看出抽象指标与输入的槽是对应的. 这样我们可以知道

1. 一个张量可以写为 $T^{ab}{}_c = T^{\mu\nu}{}_\rho (e_\mu)^a (e_\nu)^b (e^\rho)_c$;
2. 张量的作用可以写为 $T^{(\varphi,\omega)}_{(v)} = T^{ab}{}_c \varphi_a \omega_b v^c$;
3. 张量作用到基矢上恰好有 $T^{\mu\nu}{}_\rho = T^{(e^\mu,e^\nu)}_{(e_\rho)} = T^{ab}{}_c (e^\mu)_a (e^\nu)_b (e_\rho)^c$;

运用抽象指标我们写出

$$(M^a{}_b v^c)\varphi_a u^b \omega_c = \left(M^a_b \varphi_a u^b\right)\left(v^c \omega_c\right) \tag{1.52}$$

容易发现这是与张量积间的张量积运算所自洽的.

除此之外运用抽象指标还可以简化张量积的退化, 举个例子若 $T \in \mathscr{T}_V(2,1)$, 考虑

$$T^{(e^\mu,\cdot)}_{(\cdot)} = \left(T^{\omega\nu}{}_\rho e_\omega \otimes e_\nu \otimes e^\rho\right)^{(e^\mu,\cdot)}_{(\cdot)} \underbrace{=}_{\text{因为它们作为 (1,1) 型张量的作用是相同}} T^{\mu\nu}{}_\rho e_\nu \otimes e^\rho \tag{1.53}$$

由于如果我们把槽填满的话, 那么所得到的就是张量的分量, 从而这种不彻底的张量的退化可以被视为是一种张量分量的不彻底提取. 运用抽象指标可以把之前的表达式简化, 具体而言有

$$T^{\mu b}{}_c \equiv T^{ab}{}_c (e^\mu)_a = T^{\omega\nu}{}_\rho (e_\omega)^a (e_\nu)^b (e^\rho)_c (e^\mu)_a = T^{\mu\nu}{}_\rho (e_\nu)^b (e^\rho)_c \tag{1.54}$$

同时还能有关系式

$$T^{ab}{}_c = T^{\mu b}{}_c (e_\mu)^a \tag{1.55}$$

这是因为

$$T^{ab}{}_c = \underbrace{T^{ab}{}_c (e^\mu)_a}_{= T^{\mu b}{}_c} (e_\mu)^a = T^{\mu b}{}_c (e_\mu)^a \tag{1.56}$$

根据上述的运算规则, 我们还可以给出例如 $T^{ab}S_{ab}, T^{ab}S_{bc}, T^{ab}{}_a$ 这样的形式, 这种运算我们统称为缩并, 为了理解定义其我们以 $T^{ab}{}_a$ 为例:

$$T^{ab}{}_a = T^{\mu b}{}_\rho (e_\mu)^a (e^\rho)_a = T^{\mu b}{}_\mu \tag{1.57}$$

容易看出, 此时抽象指标 a 消失了, 从而 $T^{ab}{}_a$ 就变为了一个 (1,0) 型张量, 因此这里的 a 就称之为哑指标, 至此我们给出缩并的严格定义:

定义 1.1.7: 缩并运算

对于 *(k,l)* 型张量 T, 第 i 个上槽和第 j 个下槽的缩并运算 C^i_j 定义为

$$(C^i_j T)^{(\cdot,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,\cdot)} = T^{(\cdot,\cdots,\overbrace{e^\mu}^{\text{第 } i \text{ 个上槽}},\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,\underbrace{e_\mu}_{\text{第 } j \text{ 个下槽}},\cdots,\cdot)} \tag{1.58}$$

当然在使用抽象指标的情况下, 也就是第 i 个上指标和第 j 个下指标写为相同的字母.

通俗点来说就是定义

$$T^{\cdots,a,\cdots}{}_{\cdots,a\cdots} = T^{\cdots,\mu,\cdots}{}_{\cdots,\mu\cdots} \tag{1.59}$$

由于缩并掉的指标本质上已经消失了, 从而我们可以把它替换为别的字母而不影响指标平衡, 即

$$T^{ab}{}_{a} = T^{cb}{}_{c} \tag{1.60}$$

已经缩并掉的指标我们就称之为哑指标, 而也正是因为哑指标的字母可以任意换, 这也就是为什么其哑. 显然, 张量作用域矢量与对偶矢量的实质就是先张量积再缩并, 故简称作用即缩并.

利用抽象指标和缩并, 可以更直观地看待张量的含义: 现在考虑一个 (1,1) 型张量 $M^a{}_b$, 作用与一个矢量 $v \in V$ 得到 $M^a{}_b v^b$ 其退化为了一个矢量, 从而 $M \in \mathscr{T}_V(1,1)$ 也可视为一个 $V \to V$ 的线性映射, 类似的当 M 作用在对偶矢量 $\varphi \in V^*$ 上的时候, 得到 $\varphi_a M^a{}_b$ 退化为了一个对偶矢量, 从而 $M \in \mathscr{T}_V(1,1)$ 还可以被视为一个 $V^* \to V^*$ 的线性映射.

1.1.6 Einstein 求和约定

事实上在之前的叙述中都采用了 Einstein 求和约定, 能使用这种约定的实质就是因为我们求和的指标总是一上一下成对地出现, 所以我们不妨令指标的重复内蕴了求和即可. 运用这种求和约定那么就可以有如下的间接的式子 (此处只是之前结论的一些复述), 当然我们在使用 Einstein 求和约定的时候考虑的总是具体指标, 而不是抽象指标, 所以具体指标的重复为求和, 抽象指标的重复为作用.

1. $\varphi_a v^a = \varphi_\mu v^\mu$;
2. $T^{ab}{}_a = T^{\mu b}{}_\mu$; 这作为一个 (1,0) 形的张量, 分量为 $T^{\mu\nu}_\mu$;
3. $v^a = v^\mu (e_\mu)^a$;
4. $\varphi_a = \varphi_\mu (e^\mu)_a$;
5. $T^{ab}{}_c = T^{\mu\nu}{}_\rho (e_\mu)^a (e_\nu)^b (e^\rho)_c$.

物理中有一种常见的思想就是用分量表示张量, 即我们考虑张量 $T^{ab}{}_c$ 其分量为 $T^{\mu\nu}{}_\rho$, 我们往往就会以 $T^{\mu\nu}{}_\rho$ 来指代张量本身, 这种想法也可以被视为省略给定的基矢

$$T^{ab}{}_c = T^{\mu\nu}{}_\rho \underbrace{(e_\mu)^a (e_\nu)^b (e^\rho)_c}_{\text{略去}} \to T^{\mu\nu}{}_\rho \tag{1.61}$$

所以我们之前一直强调区分的抽象指标和具体指标在一定程度上是一个东西! 用这种观点, 可以发现

$$pv^a + M^a{}_b u^b = w^a \Longleftrightarrow pv^\mu + M^\mu{}_\nu u^\nu = w^\nu \tag{1.62}$$

从而在不涉及基矢展开式的时候, 同一张量等式在抽象指标的记号和具体指标的记号下的形式是完全一致的!

1.1.7 实例

考虑对偶矢量 φ 和矢量 v 的缩并, 因为

$$\varphi_a v^a = \varphi_\mu v^\mu \tag{1.63}$$

从而如果我们把 v 在基 e_μ 下表出为列向量 $(v^1, \cdots, v^n)^T$, 同样的把对偶矢量在其基 e^μ 下表出为行向量 $(\varphi_1, \cdots, \varphi_n)$, 那么可以发现

$$\varphi v = \varphi(v) = \varphi_a v^a = \varphi_\mu v^\mu = \begin{pmatrix} \varphi_1 & \cdots & \varphi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^1 \\ \vdots \\ v^n \end{pmatrix} \tag{1.64}$$

现在来考虑 (1,1) 型张量 M 和矢量 v 的缩并:

$$M^a{}_b v^b = M^a{}_\nu v^\nu = u^a \tag{1.65}$$

其分量为

$$M^\mu{}_\nu v^\nu = u^\mu \tag{1.66}$$

考虑到上式, 如果我们把 M 表示为一个方阵

$$M = \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^n{}_1 & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.67}$$

即 $M^\mu{}_\nu$ 的上标 μ 表示的是行, 而下标 ν 表示的是列. 那么有

$$Mv = M^a{}_b v^b = M^a{}_b (v^b) = \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^n{}_1 & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^1 \\ \vdots \\ v^n \end{pmatrix} \tag{1.68}$$

类似的我们可以通过矩阵的方式来研究两个线性变换 (即 (1,1) 形张量) M, N 的复合, 既

$$M^a{}_b N^b{}_c = M^a{}_\mu N^\mu{}_c = (MN)^a{}_c \tag{1.69}$$

如果一样的, 我们把 M 和 N 视为矩阵

$$M = \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^n{}_1 & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} N = \begin{pmatrix} N^1{}_1 & \cdots & N^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ N^n{}_1 & \cdots & N^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.70}$$

那么有

$$MN = \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^n{}_1 & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N^1{}_1 & \cdots & N^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ N^n{}_1 & \cdots & N^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.71}$$

我们之前提及过还可以把 (1,1) 型张量 M 视为 $V^* \to V^*$ 的线性变换, 具体而言就是

$$\varphi_a M^a{}_b = \varphi_\mu M^\mu{}_b = \omega_b \tag{1.72}$$

分量为

$$\varphi_\mu M^\mu{}_\nu = \omega_\nu \tag{1.73}$$

基于形式的巧合, 我们可以发现视 M 为 $V^* \to V^*$ 的线性变换的话, 只需要考虑左乘即可, 即

$$\varphi M = \begin{pmatrix} \varphi_1 & \cdots & \varphi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^n{}_1 & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.74}$$

在我们上述所构建的体系之中, 有一个重要的共同点: 分量的上标永远对于矩阵元所在的行, 而下标永远对应矩阵元所在的列. 因此 (1,0), (0,1), (1,1) 型的张量分别就对应了列矩阵, 行矩阵, 和方阵, 能这样 "同构" 的本质原因就是运算法则一致. 或者说矩阵的左乘右乘的定义的根源就来自于这种张量的观点. 习惯上我们习惯把需要缩并的指标排列为左边 "矩阵" 的下指标和右边 "矩阵" 的上指标缩并 m 即

$$\varphi v = \varphi_\mu v^\mu, \quad Mv = M^\mu{}_\nu v^\nu, \quad NM = N^\mu{}_\nu M^\nu{}_\rho \tag{1.75}$$

矢量与对偶矢量的张量积 $v^a \varphi_b$ 是一个 (1,1) 型的张量, 从而也就是一个矩阵.

从张量的视角就很容易定义矩阵的 trace 了, 具体而言

$$\text{tr}(M) = M^a{}_a = M^\mu{}_\mu \tag{1.76}$$

命题 1.1.5

$\text{tr}(MN) = \text{tr}(NM)$

证明.

$$\text{tr}(MN) = M^a{}_b N^b{}_a = N^b{}_a M^a{}_b = \text{tr}(NM) \tag{1.77}$$

□

定义 1.1.8: 单位线性变换 (恒等映射 identity)

我们称 $\delta : V \to V$ 是一个单位线性变换, 如果其满足

$$\delta^a{}_b v^b = v^a \tag{1.78}$$

命题 1.1.6

$\delta^a{}_b$ 同时还是 $V^* \to V^*$ 的恒等映射.

证明. 为此只需要证明

$$\varphi_a \delta^a{}_b = \varphi_b \tag{1.79}$$

即可, 考虑到

$$\varphi_a \delta^a{}_b v^b = \varphi_a v^a = \varphi_b v^b \tag{1.80}$$

即证. □

同时我们之前提及过一个 (1,1) 型张量的上标对应行, 下标对应列, 我们现在来看 $\delta^a{}_b$ 的分量

$$\delta^a{}_b\,(e^\mu)_a\,(e_\nu)^b = (e^\mu)_a(e_\nu)^a = \delta^\mu{}_\nu \tag{1.81}$$

从而可以知道如果将 $\delta^a{}_b$ 写为一个矩阵的话那么就是一个单位矩阵 I. 而考虑到

$$(e_\mu)^a(e^\mu)_b(e^\nu)_a(e_\omega)^b = (e_\mu)^a(e^\nu)_a(e^\mu)_b(e_\omega)^b = \delta^\nu{}_\mu\delta^\mu{}_\omega = \delta^\nu{}_\omega \tag{1.82}$$

同时

$$\delta^a{}_b(e^\nu)_a(e_\omega)^b = (e^\nu)_a(e_\omega)^a = \delta^\nu{}_\omega \tag{1.83}$$

从而我们可以发现成立恒等式

$$\delta^a{}_b = (e_\mu)^a(e^\mu)_b \tag{1.84}$$

注 1.1.6

值得注意的是我们使用了抽象指标了之后, 遇到的大部分都是可以交换的, 比如

1. 基可以交换, 即

$$e^\mu \otimes e^\nu \otimes e_\omega = (e^\mu)_a(e^\nu)_b(e_\omega)^c = (e_\omega)^c(e^\mu)_a(e^\nu)_b = (e^\nu)_b(e_\omega)^c(e^\mu)_a = \cdots \tag{1.85}$$

2. “作用”可以交换 1

$$\varphi_a v^a = (v^{**})^a\varphi_a = v^a\varphi_a \tag{1.86}$$

3. “作用”可以交换 2

$$\varphi_a T^a{}_b = \varphi_\mu T^\mu{}_b = T^\mu{}_b\varphi_\mu = T^a{}_b\varphi_a \tag{1.87}$$

4. “作用”可以交换 3

$$(\varphi^a\psi_b)(v_a\eta^b) = (\varphi^a v_a)(\psi_b\eta^b) \tag{1.88}$$

5. $\cdots$

回归正题, 之前提到的 $\delta^a{}_b$ 有一个特殊的作用–“更换指标” 的作用, 举个例子:

命题 1.1.7

$T^{ab}{}_c\delta^c{}_d = T^{ab}{}_d$

证明. 利用 $\delta^c{}_d = (e_\mu)^c(e^\mu)_d$ 有

$$T^{ab}{}_c\delta^c{}_d = T^{ab}{}_c(e_\mu)^c(e^\mu)_d = T^{ab}{}_\mu(e^\mu)_c = T^{ab}{}_c \tag{1.89}$$

□

附带一提的, 可以发现 $\delta^a{}_b$ 还有这样的一个性质: $\operatorname{tr}\delta^a{}_b = \dim V$.

因为这是哑指标

注 1.1.7

一个有趣的事实是:

$$\delta^a{}_b = \delta_b{}^a \tag{1.90}$$

至于它们为什么一样, 我们回忆, 指标的先后顺序只是为了方便给槽一个序来方便说明, 这个序是在定义张量的时候赋予的, 而张量的存在是不依赖与序的, 毕竟张量只是一个形如 $T^{(\cdot,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,\cdot)}$ 的东西, 所以对于同一个 (1,1) 形张量 $\delta^{(\cdot)}_{(\cdot)}$, 有

$$\delta^a{}_b = \delta^\mu{}_\nu (e_\mu)^a (e^\nu)_b \tag{1.91}$$

而

$$\delta_b{}^a = \delta_\nu{}^\mu (e^\nu)_b (e_\mu)^a \tag{1.92}$$

同时我们再来理解一下上述两个张量的分量 $\delta^\mu{}_\nu$ 和 $\delta_\nu{}^\mu$, 容易发现的交错只是因为它们继承了张量定义的时候的交错, 实质上 $\delta^\mu{}_\nu$ 和 $\delta_\nu{}^\mu$ 分别只是一个 F 中的元素, 同时观察发现有

$$\delta^\mu{}_\nu = \delta_\nu{}^\mu = \delta^{(e^\mu)}_{(e_\nu)} \in F \tag{1.93}$$

至此我们再来看 $\delta^\mu{}_\nu (e_\mu)^a (e^\nu)_b$ 和 $\delta_\nu{}^\mu (e^\nu)_b (e_\mu)^a$ 作为一个映射的作用, 由于

$$\delta^\mu{}_\nu (e_\mu)^a (e^\nu)_b (e^\omega)_a (e_\rho)^b = \delta^\mu{}_\nu \delta^\omega{}_\mu \delta^\nu{}_\rho = \delta^\omega{}_\rho \tag{1.94}$$

同时

$$\delta_\nu{}^\mu (e^\nu)_b (e_\mu)^a (e^\omega)_a (e_\rho)^b = \delta^\mu{}_\nu \delta^\omega{}_\mu \delta^\nu{}_\rho = \delta^\omega{}_\rho \tag{1.95}$$

所以

$$\delta^a{}_b = \delta_b{}^a \tag{1.96}$$

事实上考虑 $\delta^a{}_b$ 和 $\delta_b{}^a$ 的作用都是比较麻烦的考虑方式, 直接注意到

$$\delta^a{}_b = \delta^\mu{}_\nu (e_\mu)^a (e^\nu)_b = \delta_\nu{}^\mu (e^\nu)_b (e_\mu)^a = \delta_b{}^a \tag{1.97}$$

即可.

定义 1.1.9: 线性变换的逆

对于线性变换 $M: V \to V$, 若存在映射 M^{-1} 使得对于 $\forall u, v \in V$ 有

$$u = M(v) \Longleftrightarrow v = M^{-1} * u \tag{1.98}$$

则称 M^{-1} 为 M 的逆映射.

容易发现如果逆映射存在, 那么一定有

$$M^a{}_b (M^{-1})^b{}_c = (M^{-1})^a{}_b M^b{}_c = \delta^a{}_c \tag{1.99}$$

反之, 如果上式满足, 那么容易发现 $(M^{-1})^a{}_b$ 就是 M 的逆映射. 从而 M^{-1} 是 M 的逆映射等价

于

$$M^a{}_b(M^{-1})^b{}_c = (M^{-1})^a{}_b M^b{}_c = \delta^a{}_c \tag{1.100}$$

写成矩阵就是

$$MM^{-1} = M^{-1}M = I \tag{1.101}$$

由于上述我们在考虑 M 和 M^{-1} 作为 V 上的变换的时候, 使用的是 v^a 去作用的, 所以类似地如果我们用 φ_a 去作用, 可以一样的得到 M 作为 V^* 到 V^* 地线性变换的逆也是 M^{-1}, 这里的 M^{-1} 也被理解为一个 V^* 到 V^* 的线性变换.

1.1.8 量子力学中的 Dirac 符号

事实上量子力学中的 Dirac 符号就是严格遵从我们刚刚所叙述的张量体系的一个例子, 在 Dirac 符号体系之中

- (1,0) 型张量为右矢 $|\psi\rangle$ 对应到列矩阵;
- (0,1) 型张量为左矢 $\langle\varphi|$ 对应到行矩阵;
- (1,1) 型张量为算符 $\hat{A}$ 对应到方阵.

1.1.9 矩阵语言的另一种体系

我们之前构建的体系, 可以将 (1,0) 型, (1,1) 型, (0,1) 型张量转换为矩阵来思考, 但是对于 (2,0) 型张量, (0,2) 型张量却束手无策, 事实上考虑到 (2,0) 型张量 (0,2) 型张量也是 “两个指标”, 从而也可被理解为一个二维数组, 从而也可被理解为一种矩阵, 更何况我们市场遇到类似于

$$F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{1.102}$$

这样的张量运算, 所以实际上把 (2,0) 型张量以及 (0,2) 型张量也通过矩阵的方式来理解是十分有利的. 一个引入的例子是: 当我们考虑缩并 $T^{\mu\nu}S_{\nu\rho}$ 的时候, 很自然的可以理解为

$$TS = \begin{pmatrix} T^{11} & \cdots & T^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T^{n1} & \cdots & T^{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S^{11} & \cdots & S^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S^{n1} & \cdots & S^{nn} \end{pmatrix} \tag{1.103}$$

所得到的矩阵 TS 的 $\mu\rho$ 分量就是 $(TS)^\mu{}_\rho$ 的值. 所以就运算规则上来看, 诚然, $T^{\mu\nu}S_{\nu\rho}$ 和 $N^\mu{}_\nu M^\nu{}_\rho$ 是完全类似的. 受到上个例子的启发, 现在给出以下的一般意义上的张量变换到矩阵的法则:

1. (1,0) 型张量, (0,1) 型张量对应到矩阵时, 各自都可以指定为行矩阵或者列矩阵 (即矢量可以对应到行矩阵, 也可以对应到列矩阵, 而不必是如之前所言的一定是对应到列矩阵, 同理对偶矢量也可以对应到行矩阵或者列矩阵, 而不必像以前一样一定对应到行矩阵)
2. (1,1) 型, (2,0) 型, (0,2) 型张量, 按照分量的左指标为行, 右指标为列来指定为矩阵.

矩几个例子:

$$v^\mu \to \begin{pmatrix} v^1 \\ \vdots \\ v^n \end{pmatrix} \text{或者} v^\mu \to \begin{pmatrix} v^1 & \cdots & v^n \end{pmatrix} \tag{1.104}$$

$$M^\mu{}_\nu \to \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^n{}_1 & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.105}$$

$$A_\nu{}^\mu \to \begin{pmatrix} M_1{}^1 & \cdots & M_n{}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M_1{}^n & \cdots & M_n{}^n \end{pmatrix} \tag{1.106}$$

$$T^{\mu\nu} \to \begin{pmatrix} T^{11} & \cdots & T^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T^{n1} & \cdots & T^{nn} \end{pmatrix} \tag{1.107}$$

但是, 一开始对于行, 列矩阵的指定不一定合适, 而且对于写成方阵的张量, 缩并的两个指标也不是一左一右, 所以需要对矩阵进行转置来交换行和列, 对于行矩阵、列矩阵而言, 其可以使得行矩阵和列矩阵相互转换, 而对于方阵而言, 其可以改变指标的左右位置.

我们考虑

$$(M^T)_\nu{}^\mu := M^\mu{}_\nu \tag{1.108}$$

其相应的矩阵就是

$$(M^T)_\nu{}^\mu \to M^T = \begin{pmatrix} M^1{}_1 & \cdots & M^n{}_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ M^1{}_n & \cdots & M^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.109}$$

类似的我们定义

$$(T^T)^{\mu\nu} := T^{\nu\mu} \tag{1.110}$$

从而有

$$(T^T)^{\mu\nu} \to T^T = \begin{pmatrix} T^{11} & \cdots & T^{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T^{1n} & \cdots & T^{nn} \end{pmatrix} \tag{1.111}$$

当然我们目前还没有说明要把矢量变为行向量还是列向量, 对于对偶矢量我们目前也还没有说明要把对偶矢量变为行向量还是列向量, 除此之外, 我们引入的转置也没说明白什么时候需要使用这个符号来表示, 现在我统一给出回复, 那就是*你觉得改用, 那么就用!* , 因为这种矩阵的表示方式归根结底是对于相同指标求和的一种等价表述方式, 换而言之我们的矩阵表示方式只是一种*形式上的便利*, 有了这种想法之后我们来看

例 1.1.1

$$g_{\mu\nu}u^\mu v^\nu = u^\mu g_{\mu\nu}v^\nu = \begin{pmatrix} u^1 & \cdots & u^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^1 \\ \vdots \\ v^n \end{pmatrix} \tag{1.112}$$

$$g_{\mu\nu}u^\mu v^\nu = v^\nu (g^T)_{\nu\mu}u^\mu = \begin{pmatrix} v^1 & \cdots & v^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & \cdots & g_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{1n} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^1 \\ \vdots \\ u^n \end{pmatrix} \tag{1.113}$$

例 1.1.2

$$F^{\mu\nu}\Lambda^\rho{}_\mu\Lambda^\sigma{}_\nu = \Lambda^\rho{}_\mu F^{\mu\nu}(\Lambda^T)_\nu{}^\sigma = \begin{pmatrix} \Lambda^1{}_1 & \cdots & \Lambda^1{}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda^n{}_1 & \cdots & \Lambda^n{}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F^{11} & \cdots & F^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F^{n1} & \cdots & F^{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda^1{}_1 & \cdots & \Lambda^n{}_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda^1{}_n & \cdots & \Lambda^n{}_n \end{pmatrix} \tag{1.114}$$

然而值得注意的是, 如果我们不以矩阵的形式来思考的话, 即我们直接考虑张量的话, 那么引入转置是没有意义的! 毕竟你转置只是为了凑 "一上一下的指标"(也只有一上一下的指标结合左指标为行右指标为列的概念, 才能与矩阵运算所自洽), 所以说到底转置只为了方便对应到 "矩阵运算", 毕竟张量的表达式中关心的是指标的字母, 而不是指标的左右位置.

定义 1.1.10: (2,0) 型张量和 (0,2) 型张量的逆

由于 (2,0) 型张量 T^{ab} 可以被视为一个 $V^* \to V$ 的线性映射, 我们定义该张量的逆为对应线性映射的逆, 由于逆映射是一个 $V \to V^*$ 的线性映射, 所以其可被理解为是一个 (0,2) 型张量, 不妨将其记作 $(T^{-1})_{ab}$. 类似的对于 (0,2) 型张量 S_{ab} 我们可以定义其逆为 $(S^{-1})^{ab}$.

值得注意的是在定义中 T^{ab} 作为一个映射, 我们没有指定输入的槽位, 若我们默认输入槽位为 b 的话, 那么容易发现: $(T^{-1})_{ab}$ 是 T^{ab} 的逆, 当且仅当

$$T^{ab}(T^{-1})_{bc} = (T^{-1})_{cd}T^{da} \overset{\mathscr{A}}{=} \delta^a{}_c \tag{1.115}$$

从 $\mathscr{A}$ 这里也可以看出指标的左右并没有那么的重要, 虽然其诚然有用就是了.

如果我们认为 T^{ab} 的输入槽位是前者的话, 类似的可以发现 $(T^{-1})_{ab}$ 是 T^{ab} 的逆, 当且仅当

$$(T^{-1})_{bc}T^{ab} = T^{da}(T^{-1})_{cd} = \delta^a{}_c \tag{1.116}$$

而考虑到

$$(T^{-1})_{bc}T^{ab} = T^{ab}(T^{-1})_{bc}, \quad T^{da}(T^{-1})_{cd} = (T^{-1})_{cd}T^{da} \tag{1.117}$$

从而可以发现不管我们认为 T^{ab} 的输入槽是哪个, $(T^{-1})_{ab}$ 如果存在那么就是唯一的. 当然我们这里默认了输入槽是匹配的, 即若 T^{ab} 的输入槽是 a, 那么 $(T^{-1})_{ab}$ 的输入槽也是 a. 至此对于 (1,0), (0,1), (1,1), (2,0), (0,2) 型张量之间运算的 "矩阵" 法就已经阐述完毕了.

我们之前提及过可以将 (1,1) 型张量视为一个 $V \to V$ 的线性变换, 也可视为一个 $V^* \to V^*$ 的线性变换, 当然如何考虑往往和我们输入的东西有关, 就比如

$$\varphi_a T^a{}_b \tag{1.118}$$

就是强调了其是一个 $V^* \to V^*$ 的变换, 即右作用的时候是 $V^* \to V^*$ 的变换, 同时我们发现

$$\varphi_a T^a{}_b = (T^{-1})_b{}^a \varphi_a \tag{1.119}$$

故 "转置" 后的张量其左作用才是 $V^* \to V^*$ 的变换, 即其交换了 "原来运算的方向", 这是对于转置用处的一种理解.

命题 1.1.8

若 M 是一个 (2,0) 型, (1,1) 型, (0,2) 型张量, 那么有

$$(M^T)^{-1} = (M^{-1})^T \tag{1.120}$$

证明. 不妨令 M 是一个 (2,0) 型张量, 我们要证明的是

$$((M^{-1})^T)^{ab}(M^T)_{bc} = (M^T)_{cd}((M^{-1})^T)^{da} = \delta^a{}_c \tag{1.121}$$

即需要证明

$$(M^{-1})^{ba}M_{cb} = M_{dc}(M^{-1})^{ad} = \delta^a{}_c \tag{1.122}$$

也即

$$M_{cb}(M^{-1})^{ba} = (M^{-1})^{ad}M_{dc} = \delta^a{}_c \tag{1.123}$$

而考虑到 M^{-1} 的定义, 上式是显然的, 从而得证. □

1.1.10 基变换与 "协变""逆变"

这一小节中, 我们来考虑不同基矢下张量分量的转换关系. 为此我们先给定两组基 $\{(e_\mu)^a\}$ 和 $\{(e'_{\mu'})^a\}$, 它们之间的变换为

$$(e'_{\mu'})^a = A_{\mu'}{}^{\mu}(e_\mu)^a \tag{1.124}$$

从而同时有

$$(e_\mu)^a = (A^{-1})_\mu{}^{\mu'}(e'_{\mu'})^a \tag{1.125}$$

对于矢量 v^a 其在两组基下分别可表为

$$v^a = v^\mu(e_\mu)^a = v^{\mu'}(e'_{\mu'})^a \tag{1.126}$$

利用之前的基之间的关系, 有

$$v^a = v^\mu(e_\mu)^a = v^\mu(A^{-1})_\mu{}^{\mu'}(e'_{\mu'})^a \tag{1.127}$$

通过比较基前的系数可以知道:

$$v^{\mu'} = v^\mu(A^{-1})_\mu{}^{\mu'} \tag{1.128}$$

接下来考虑对偶基的变换, 记新旧的对偶基为 $\{(e^\mu)_a\}$ 与 $\{(e'^{\mu'})_a\}$, 那么对于 $v \in V$ 其可以展开为

$$v^a = v'^{\mu'}(e'_{\mu'})^a, \quad v'^{\mu'} = v^a(e'^{\mu'})_a \tag{1.129}$$

同时 $v \in V$ 还可以在原先的基中展开有:

$$v^a = v^\mu (e_\mu)^a, \quad v^\mu = v^a (e^\mu)_a \tag{1.130}$$

由于矢量分量的变换:

$$v^{\mu'} = v^\mu {(A^{-1})_\mu}^{\mu'} = v^a (e^\mu)_a {(A^{-1})_\mu}^{\mu'} = v^a \left((e^\mu)_a {(A^{-1})_\mu}^{\mu'} \right) \tag{1.131}$$

再加之对比之前得到的 $v'^{\mu'} = v^a (e'^{\mu'})_a$ 就得到了

$$(e'^{\mu'})_a = (e^\mu)_a {(A^{-1})_\mu}^{\mu'} \tag{1.132}$$

考虑 “逆” 我们还能得到:

$$(e^\mu)_a = (e'^{\mu'})_a {A_{\mu'}}^\mu \tag{1.133}$$

从而我们得到了对偶基之间的变换, 现在我们再来考虑对偶矢量分量的变换, 由于

$$\varphi_a = \varphi_\mu (e^\mu)_a = \varphi'_{\mu'} (e'^{\mu'})_a \tag{1.134}$$

另一方面有

$$\varphi_a = \varphi_\mu (e^\mu)_a = \varphi_\mu (e'^{\mu'})_a {A_{\mu'}}^\mu = {(A)_{\mu'}}^\mu \varphi_\mu (e'^{\mu'})_a \tag{1.135}$$

对于 $\varphi_a = \varphi'_{\mu'} (e'^{\mu'})_a$ 可以得到

$$\varphi'_{\mu'} = {(A)_{\mu'}}^\mu \varphi_\mu \tag{1.136}$$

总结上述的内容可以得到:

定理 1.1.1

以带 ′ 和不带 ′ 分别表示新, 旧基底的情况, 那么对于 $\forall v \in V, \forall \varphi \in V^*$, 各基矢以及分量之间的变换关系可以写为:

- $(e'_{\mu'})^a = {A_{\mu'}}^\mu (e_\mu)^a$;
- $v'^{\mu'} = v^\mu {(A^{-1})_\mu}^{\mu'}$;
- $(e'^{\mu'})_a = (e^\mu)_a {(A^{-1})_\mu}^{\mu'}$;
- $\varphi'_{\mu'} = {A_{\mu'}}^\mu \varphi_\mu$

可以发现只要是指标在下面的, 那么变换的张量就是 A, 而只要指标在上面, 那么变换的张量就是 A^{-1}. 正因为这些变换的性质我们称: *基矢为协变矢量, 对偶矢量为逆变矢量, 矢量的分量叫做逆变分量, 对偶矢量的分量叫做协变分量.*

对于一般的张量, 也不难写出其分量的变换规律 (归结于多重线性映射的 “线性” 以及展开的唯一性) 结果表出如下:

定理 1.1.2

对于 $T \in \mathscr{T}_V(k,l)$ 在基变换

$$(e'_{\mu'})^a = {A_{\mu'}}^\mu (e_\mu)^a \tag{1.137}$$

下, 分量的变换可以写为:

$$T'^{\mu'_1\cdots\mu'_k}{}_{\nu'_1\cdots\nu'_l} = (A^{-1})_{\mu_1}{}^{\mu'_1}\cdots(A^{-1})_{\mu_k}{}^{\mu'_k}A_{\nu'_1}{}^{\nu_1}\cdots A_{\nu'_l}{}^{\nu_l}T^{\mu_1\cdots\mu_k}{}_{\nu_1\cdots\nu_l} \tag{1.138}$$

推论 1.1.1: 缩并的基矢量无关性

即我们在张量运算中所设计的所有缩并的结果与基矢的选取无关.

证明. 考虑到

$$\begin{aligned} T^{(\cdot,\cdots,e'^{\mu'},\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,e'_{\mu'},\cdots,\cdot)} &= T^{(\cdot,\cdots,(A^{-1})_\nu{}^{\mu'}e^\nu,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,A_{\mu'}{}^{\mu}e_\mu,\cdots,\cdot)} = (A^{-1})_\nu{}^{\mu'}A_{\mu'}{}^{\mu}T^{(\cdot,\cdots,e^\nu,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,e_\mu,\cdots,\cdot)} \\ &= \delta^\mu{}_\nu T^{(\cdot,\cdots,e^\nu,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,e_\mu,\cdots,\cdot)} = T^{(\cdot,\cdots,e^\mu,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,e_\mu,\cdots,\cdot)} \end{aligned} \tag{1.139}$$

□

注意到凡是涉及 "变换" 这一词, 特别是基变换, 我们就喜欢从两个视角来看待变换本身:

1. 被动观点: 张量本身不变而是基矢量选取发生变化.
2. 主动观点: 张量本身变化了, 但是基没有发生变换.

之前的论述之中对于被动观点的阐明已经是比较明确的了, 因为我们之前所在干的事情就是同一个张量在不同的基下的表示. 现在来阐明主动变换: 实际上主动变换就是

$$\begin{array}{c} \sigma : V \xrightarrow{linear} V \\ \Downarrow \\ \mathscr{T}_V(k,l) \longrightarrow \mathscr{T}_V(k,l) \end{array}$$

就是说当我给出了一个

$$\begin{aligned} \sigma:\quad V &\longrightarrow V \\ v^a &\longmapsto M^a{}_b v^b \end{aligned} \tag{1.140}$$

这是一个 $V \to V$ 的线性变换 (实际上这还需要是一个线性同构), 那么这个变换就能诱导出一个 $\mathscr{T}_V(k,l) \to \mathscr{T}_V(k,l)$ 的线性变换, 而且这个线性变换还需要满足保持缩并 (张量与矢量和对偶矢量的缩并) 不变. 举个例子我们考虑 $\mathscr{T}_V(1,0)$ 中的一个元素 (一个对偶矢量) φ_a, 不妨令我们想要寻找的 $\mathscr{T}_V(1,0) \to \mathscr{T}_V(1,0)$ 的那个保缩并的线性映射 (实际上也是一个线性同构) 为 σ' 那么由于其需要保护内积, 从而有

$$\sigma'(\varphi)_a\sigma(v)^a = \varphi_a v^a \Longrightarrow \sigma'(\varphi)_a M^a{}_b v^b = \varphi_a v^a \Longrightarrow \sigma'(\varphi)_b M^b{}_a v^a = \varphi_a v^a \tag{1.141}$$

从而可知

$$\sigma'(\varphi)_b M^b{}_a = \varphi_a \tag{1.142}$$

也即

$$\sigma'(\varphi)_a = \varphi_b (M^{-1})^b{}_a \tag{1.143}$$

类似的可以知道 $\mathscr{T}_V(k,l) \to \mathscr{T}_V(k,l)$ 的保缩并的线性同构是唯一的, 其正是

$$\sigma'(T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}) = M^{a_1}{}_{c_1}\cdots M^{a_k}{}_{c_k}(M^{-1})^{d_1}{}_{b_1}\cdots(M^{-1})^{d_l}{}_{b_l}T^{c_1\cdots c_k}{}_{d_1\cdots d_l} \tag{1.144}$$

利用 Penrose 图示记法可以很好的表述这种主动的观点, 其即为

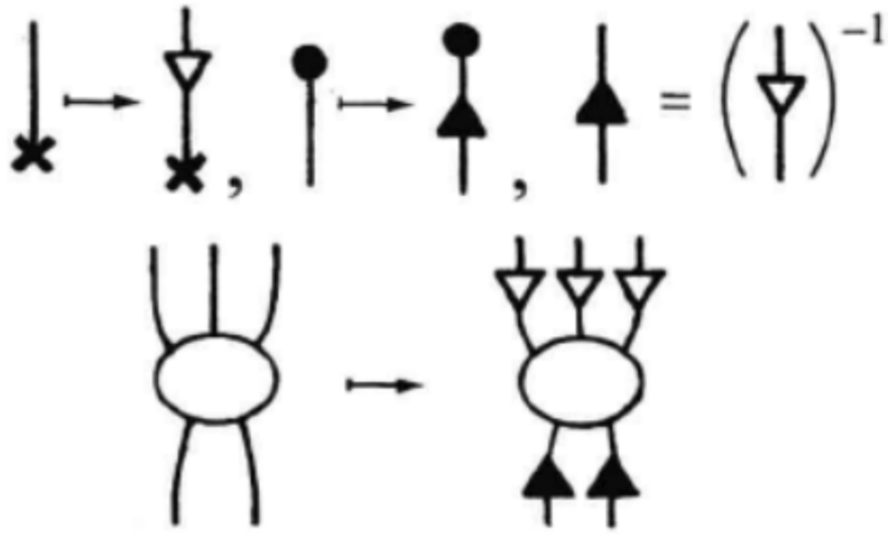

图 1.1

1.1.11 度规空间与内积空间

定义 1.1.11: 度规空间

度规空间就是一个给定了度规的线性空间 (这个线性空间通常是实矢量空间), 而度规就是一个双线性映射 $g: V\times V \xrightarrow{linear} F$, 额外地其需要满足:

- 对称性: $g(u,v)=g(v,u)$;
- 非退化性: $\forall v\in V, g(u,v)=0 \Longrightarrow u=0$.

并且如果对于 $\forall v\in V$ 都有 $g(v,v)\geq 0$, 那么我们称度规 g 是正定的, 若都有 $g(v,v)\leq 0$ 那么就称之为负定的, 其他的情况就叫作不定的.
如果度规是正定的, 那么对应的度规空间 (实数域上的), 我们也称之为实内积空间.

如果 $g(u,v)=0$, 那么我们称 u,v 是正交的, 并且对于 $v\in V$ 定义其模长为

$$|v| = \sqrt{|g(v,v)|} \tag{1.145}$$

注 1.1.8

在不引起混淆的情况下, $u,v\in V$ 的度规作用 $g(u,v)$ 有时候也称为 u 和 v 在度规 g 下的内积.

由于度规是一个 $V\times V\to F$ 的双线性映射, 所以其自然就是一个 $(0,2)$ 型张量 g_{ab}, 具体而言有

$$g(u,v)=g_{ab}u^av^b \tag{1.146}$$

从而依据 $g(u,v)=g(v,u)$ 可以知道

$$g_{ab}u^av^b=g_{ba}u^av^b\Longrightarrow g_{ab}=g_{ba} \tag{1.147}$$

额外的容易发现 g_{ab} 的分量 $g_{\mu\nu}$ 可以表示为

$$g_{\mu\nu}=g_{ab}(e_\mu)^a(e_\nu)^b \tag{1.148}$$

进一步可以注意到

$$g_{\mu\nu}=g_{ab}(e_\mu)^a(e_\nu)^b=g_{ba}(e_\mu)^a(e_\nu)^b=g_{\nu\mu} \tag{1.149}$$

故也就有了 $g_{\mu\nu}=g_{\nu\mu}$.

有了度规之后, 我们可以对线性空间 V 的基矢附带一些额外的结构, 具体而言我们定义标准正交基:

定义 1.1.12: 标准正交基

给定了度规 g 的线性空间 V 的标准正交基满足:

$$g(e_\mu,e_\nu)=g_{\mu\nu}=\begin{cases}\pm 1 & \mu=\nu\\ = & \mu\neq\nu\end{cases} \tag{1.150}$$

从而如果在标准正交基下把度规写为矩阵的话, 那么其就是对角元只能为 ±1 的对角矩阵.

定理 1.1.3

任意度规空间都存在标准正交基, 且不管依据哪个标准正交基来表出度规为矩阵, 所得到的对角矩阵的对角线元素中的 $+1$ 数目和 -1 数目是不变的. 我们把对角元素的和称为度规的"号差".

显然正定度规的对角元全是 $+1$, 负定度规的对角元全是 -1.

物理中有两个比较常用的度规, 分别是三维空间的欧式度规

$$\delta_{\mu\nu}\to\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} \tag{1.151}$$

以及四维时空的 Minkowski 度规

$$\eta_{\mu\nu}\to\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix} \tag{1.152}$$

当线性空间 V 给定了一个度规 g 之后, 就可以自然诱导出一个 $V \to V^*$ 的同构映射, 具体而言就是

$$\begin{aligned} \phi : V &\longrightarrow V^* \\ v &\longmapsto v^\dagger \equiv g(v, \cdot) \end{aligned} \tag{1.153}$$

运用抽象指标来表述的话就是:

实质上就是 $v^\dagger = \phi(v)$

$$v_a \equiv g_{ab}v^b \tag{1.154}$$

$g_{ab}v^b = g_{ba}v^b = g(v, \cdot)$

值得注意的就是我们使用 v_a 来代替 $v^\dagger = \phi(v)$, 这是合理的, 因为在存在度规的空间中 $v \mapsto v^\dagger$ 的映射是自然的. 实质上这里的 v_a 也就是 $(v^\dagger)_a$ 的一种简写方法, 之所以能这样写的另一原因是我们已经可以通过上下指标的位置来区分 v 与 $v^\dagger$ 了, 所以 $\dagger$ 就可以省略掉, 这样写的好处除了 "简洁" 了以外, 还有就是其强调了v^a 和 v_a 虽然在数学性质上不同, 但是实质是同一个事物（毕竟联系两者的是一个 "同构" 映射）. 在这样的符号系统里面可以发现有:

$$g(u, v) = g_{ab}u^a v^b = u_a v^a = u^a v_a \tag{1.155}$$

注 1.1.9

有意思的事情是: $\varphi_a v^a$ 表示的是 φ_a 作为 V^* 中的一个元素对于 v^a 的作用, 将其表示为矩阵的话就是

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 & \cdots & \varphi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \\ \vdots \\ v^n \end{pmatrix} \tag{1.156}$$

但是对于 $u_a v^a$, 如果视 u_a 为 V^* 中的元素即强调了 u_a 是一个映射的话, 那么将 $u_a v^a$ 写成矩阵的是和之前类似的; 但是如果视 $u_a v^a$ 表示的是 u, v 两个作为 V 中的元素之间的度规作用 $g(u, v)$ 的话, 即我们强调了 u_a 实质上是由 u^a 生成的, 那么 $u_a v^a = u^b g_{ba} v^a$ 从而其表示为矩阵形式就是

$$\begin{pmatrix} u^1 & u^2 & \cdots & u^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \\ \vdots \\ v^n \end{pmatrix} \tag{1.157}$$

注 1.1.10

实际上我们之前完全没有必要给 $v \mapsto g(v, \cdot)$ 的映射取名为 ϕ, 因为我们之前说过 g_{ab} 是一个 (0,2) 型的张量, 而 (0,2) 型张量可以被视为一个 $V \to V^*$ 的映射, 如果我们认为输入槽是右槽, 那么这个 $V \to V^*$ 的映射是 $v^b \mapsto g_{ab}v^b$, $g_{ab}v^b$ 恰恰就是 v_a! 所以我们一开始的 ϕ 实际上完全就是 g 本身!

由于 $g: V \to V^*$ 是一个同构映射, 故其自然是一个双射, 从而也就有着逆映射, 不妨记其逆映射为 $g^{-1}: V^* \to V$. 也就是我们令 g_{ab} 的逆为 $(g^{-1})^{ab}$, 但是实际上由于我们可以通过指标的上下位置来判断出这到底是 g 还是 g^{-1} 所以, 往往将度规的逆 $(g^{-1})^{ab}$ 简记为 g^{ab}, 这是一个 (2,0) 型张量, 有了 g^{ab} 我们对于任意的 $\varphi \in V^*$ 其就可以自然对应到一个 V 中的元素, 我们将这样自然的对应方法表示为:

$$\varphi_b \mapsto (\varphi^\dagger)^a = g^{ab}\varphi_b \tag{1.158}$$

同样的, 这里的 † 可以省略, 从而也就有: $\varphi^a \equiv g^{ab}\varphi_b$.

命题 1.1.9

由 g_{ab} 和 g^{ab} 的互为逆的性质, 容易知道:

$$v_a = g_{ab}v^b \Longleftrightarrow v^a = g^{ab}v_b \tag{1.159}$$

换种方式表达也就是:

$$g^{ab}g_{bc} = \delta^a{}_c \tag{1.160}$$

注 1.1.11

事实上有限维线性空间中的 φ, ψ, 如果满足

$$\varphi\psi = \mathrm{id} \tag{1.161}$$

那么一定有

$$\psi\varphi = \mathrm{id} \tag{1.162}$$

也就是说如果 φ 是 ψ 的左逆, 那么 φ 也就一定是 ψ 的右逆. 同样的, 如果 φ 是 ψ 的右逆, 那么 φ 也就一定是 ψ 的左逆.

所以在之前张量的逆的定价条件之中实际上完全写

$$M^{ab}(M^{-1})_{bc} = \delta^a{}_c \tag{1.163}$$

也就足以了.

我们之前提到过在标准正交基下 $g_{ab} = \mathrm{diag}\{\pm 1\}$, 所以如果将 g^{ab} 也在相应的基 (此处是 $\{e^\mu \otimes e^\nu\}$, $\{e^\mu\}$ 是标准正交基 $\{e_\mu\}$ 的对偶基) 下展开, 那么可以得到

$$\begin{pmatrix} g^{11} & \cdots & g^{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g^{n1} & \cdots & g^{nn} \end{pmatrix} \mathrm{diag}\{\pm 1\} = \mathrm{diag}\{1\} \tag{1.164}$$

由于 $\mathrm{diag}\{\pm 1\}$ 的逆是显然的, 其正是 $\mathrm{diag}\{\pm 1\}$ 本身！这里 $\mathrm{diag}\{\pm 1\}$ 指的是对角线上要么是 1 要么是 -1 的对角矩阵. 所以我们就可以知道 g^{ab} 在相应的基下表出为矩阵就是 $\mathrm{diag}\{\pm 1\}$ 也就是 g_{ab} 在相应的基下表出的矩阵.

利用 g^{ab}, 我们可以定义对偶矢量之间的度规作用

定义 1.1.13: 对偶矢量之间的度规

对于任意的 $\varphi, \psi \in V^*$, 我们定义

$$g(\varphi, \psi) \equiv g^{ab}\varphi_a\psi_b = \varphi^a\psi_a = \varphi_a\psi^a \tag{1.165}$$

事实上一个有意思的事情是: 对于 V 的基 $\{(e_\mu)^a\}$ 我们注意到对偶基 $\{(e^\mu)_a\}$ 是一种意义上的指标下降 (就 a 而言), 同时注意到

$$(e_\mu)_a \equiv (e_\mu^\dagger)_a = g_{ab}(e_\mu)^b \tag{1.166}$$

所得到的 $(e_\mu)_a$ 也是一种指标下降, 然而需要强调的是:

$$(e^\mu)_a \neq (e_\mu)_a \tag{1.167}$$

具体而言, 有:

$$(e_\mu)_a = g_{ab}(e_\mu)^b \underset{\text{张量的退化}}{=} g_{a\mu} \overset{\text{(0,1) 型张量的展开}}{=} g_{\nu\mu}(e^\nu)_a = g_{\mu\nu}(e^\nu)_a \neq (e^\mu)_a \tag{1.168}$$

类似的对于对偶矢量 $(e^\mu)_a$ 可以得到

$$(e^\mu)^a \equiv (e^{\mu\dagger})^a = g^{ab}(e^\mu)_b \neq (e_\mu)^a \tag{1.169}$$

实际上有

$$(e^\mu)^a = g^{ab}(e_\mu)_b = g^{a\mu} = g^{\nu\mu}(e_\nu)^a = g^{\mu\nu}(e_\nu)^a \neq (e_\mu)^a \tag{1.170}$$

命题 1.1.10

$v^a = v^\mu(e_\mu)^a = v_\mu(e^\mu)^a$, 这里 v_μ 就是 $v_a = g_{ab}v^b$ 的分量.

证明. 由于

$$v_\mu = g_{\mu b}v^b \tag{1.171}$$

所以

$$v_\mu(e^\mu)^a = g_{\mu b}v^b g^{ac}(e^\mu)_c = g_{\mu b}g^{a\mu}v^b = g^{a\mu}g_{\mu b}v^b = \delta^a{}_b v^b = v^a \tag{1.172}$$

□

从结论中可以发现 $(e^\mu)^a$ 就结论而言还是挺工整的. $(e^\mu)^a$ 也被称为倒格子矢量.

注 1.1.12

一个有意思的事实是, 对于 $v^a \in V$ 有

$$g(v_a, \cdot) = v^a \tag{1.173}$$

为了证明至一点只需要考虑到

$$g(v_a, \cdot) = g^{ab}v_b = g^{ab}g_{bc}v^c = \delta^a{}_c v^c = v^a \tag{1.174}$$

1.1.12 升降指标操作与伴随映射

定义 1.1.14: 升降指标运算

对于一般的张量来说, 度规张量可以诱导出一个 $\mathscr{T}_V(k,l) \to \mathscr{T}_V(k-1,l+1)$ 的映射

$$T^{ab\cdots}{}_{\cdots} \mapsto T_a{}^{b\cdots}{}_{\cdots} =: g_{ac}T^{cb\cdots}{}_{\cdots} \tag{1.175}$$

容易发现这个 g 所诱导出的映射, 在运用抽象指标的语言之中, 所反映出的就是对于任意一个上标的下降.

当然从上述的定义之中可以看出将指标错开来写的重要性, 逼近如果不错开来的话, 那我在降指标的时候不就 “撞在一起了么”.

当然度规所诱导出的映射也可以通过多重线性映射来理解, 即为

$$T_a{}^{b\cdots}{}_{\cdots}\varphi^a \equiv T^{ab\cdots}{}_{\cdots}\varphi_a \tag{1.176}$$

其中 $\varphi^a = g_{ab}\varphi^b$ 是度规所诱导出来的自然同构.

反过来, 度规张量的逆 g^{ab} 可以诱导出一个 $\mathscr{T}_V(k,l) \to \mathscr{T}_V(k+1,l-1)$ 的升指标操作, 具体而言是:

$$T^{\cdots}{}_{a\cdots} \mapsto T^{\cdots a}{}_{\cdots} =: g^{ab}T^{\cdots}{}_{b\cdots} \tag{1.177}$$

通过多重线性映射的视角来看也就是:

$$T^{\cdots a}{}_{\cdots}v_a \equiv T^{\cdots}{}_{a\cdots}v^a \tag{1.178}$$

这里的 $v_a = g_{ab}v^b$ 是自然诱导出来的同构映射的像.

有了度规之后, 我们就可以通过升降指标把一个 *(k,l)* 型张量变成 “代表同一事物” 的 *(m,n)* 型张量, 只要 $k+l = m+n$, 所以张量的型号是能变的, 但是上下槽的总数 $k+l$ 是不变的, 有时候 $k+l$ 也被称为秩.

事实上这里需要理解一下为什么一个张量在升降指标了之后还是同一个东西. 实质上, 通过之前多重线性映射来看待升降指标的观点, 可以发现升降指标前后的区别唯一之处就是在于往槽中输入元素的时候需不需要对输入的元素升降指标, 而我们知道往槽内输入的元素无非就是 V 或者是 V^* 中的元素, 而它们的升降指标实质上是自然的同构映射的结果完全可以视为一个东西, 故张量作为一个多重线性映射在升降指标的前后是自然的一个东西.

之前提到过 $(g^{-1})^{ab}$ 可以不引起歧义的简记为 g^{ab}, 但考虑到 g^{ab} 还可被认为是 g_{ab} 升两个指标得到的结果, 故之前的那个符号指代就需要验证其自洽性

命题 1.1.11

$(g^{-1})^{ab} = g^{ab}$

<u>**证明.**</u> 为此我们只需要说明 $g^{ac}g^{bd}g_{cd}$ 就是 g^{ab} 的逆就行了, 而考虑到

$$g^{ac}g^{bd}g_{cd}g_{be} = \delta^a{}_d\delta^d{}_e = \delta^a{}_e \tag{1.179}$$

故 $g^{ac}g^{bd}g_{cd} \equiv g^{ab}$ 诚然就是 g^{ab} 的逆. □

如果我们对 g_{ab} 升一个指标, 或者对于 g^{ab} 降一个指标所得到的结果就是 $\delta^a{}_b$, 因为

$$g^{ab}g_{bc} = \delta^a{}_c \tag{1.180}$$

此处有一个神奇的证明:

命题 1.1.12

$\delta^a{}_b = \delta_b{}^a$

<u>**证明.**</u> 这只需要考虑到

$$\delta^a{}_c = g^{ab}g_{bc} = g^{ba}g_{bc} = \delta_c{}^a \tag{1.181}$$

□

定义 1.1.15: 对偶空间伴随式 (度规空间情形)

对于度规空间 V 上的张量 $T \in \mathscr{T}_V(k,l)$, 我们可以定义它的 "对偶空间伴随对象" $T^\dagger \in \mathscr{T}_V(l,k)$, 满足:

$$T^{\dagger(v_1^\dagger,\cdots,v_l^\dagger)}{}_{(\varphi^{1\dagger},\cdots,\varphi^{k\dagger})} \equiv T^{(\varphi^1,\cdots,\varphi^k)}{}_{(v_1,\cdots,v_l)} \tag{1.182}$$

如果将 T 写为:

$$T^{a_1,\cdots,a_k}{}_{b_1,\cdots,b_l} \tag{1.183}$$

那么事实上可以把 $T^\dagger$ 表示为:

$$T_{a_1,\cdots,a_k}{}^{b_1,\cdots,b_l} \tag{1.184}$$

这是因为

$$\begin{aligned}
&T^{\dagger(v^1,\cdots,v^l)}{}_{(\varphi_1,\cdots,\varphi_k)} \\
=&T^{a_1,\cdots,a_k}{}_{b_1,\cdots,b_l}(\varphi^1)_{a_1}\cdots(\varphi^k)_{a_k}(v_1)^{b_1}\cdots(v_l)^{b_l} \\
=&T^{a_1,\cdots,a_k}{}_{b_1,\cdots,b_l}g_{a_1a_1'}\cdots g_{a_ka_k'}g^{b_1b_k'}\cdots g_{b_lb_l'}(\varphi_1)^{a_1'}\cdots(\varphi_k)^{a_k'}(v^1)_{b_1'}\cdots(v^l)_{b_l'} \\
=&T_{a_1,\cdots,a_k}{}^{b_1,\cdots,b_l}(\varphi_1)^{a_1}\cdots(\varphi_k)^{a_k}(v^1)_{b_1}\cdots(v^l)_{b_l}
\end{aligned} \tag{1.185}$$

所以我们能发现凡是加了个 † 就是用度规升降一遍所有的指标, 对于 (1,0) 型张量 v^b 是这样的, 对于 (0,1) 型张量 φ_a 是这样的, 对于一般的张量 $T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}$ 也是如此, 所以我们称

$$\begin{aligned}
\sigma: \quad \bigcup_{k,l=0}^{\infty} \mathscr{T}_V(k,l) &\longrightarrow \bigcup_{k,l=0}^{\infty} \mathscr{T}_V(k,l) \\
T &\longmapsto T^\dagger
\end{aligned} \tag{1.186}$$

这样子的映射为伴随映射.

我们现在来考虑一个 (1,1) 型的张量 $M^a{}_b$, 它的对偶空间的伴随对象还是 (1,1) 型张量, 这样我们就可以定义自伴随/反自伴随的概念:

$$M^a{}_b = \pm M_b{}^a \tag{1.187}$$

若取 + 号则为自伴, 若取 − 号则是反自伴的.

注 1.1.13

我们在之前试图证明 $M^a{}_b = M_b{}^a$ 并且给出了一个看似合理的结果, 但是指的叙述的是:

1. 如果视 $M^a{}_b$ 是一个 $V^* \times V \to F$ 的映射而视 $M_b{}^a$ 是一个 $V \times V^* \to F$ 的映射, 那么它们显然不同.

2. 如果视 $M^a{}_b, M_b{}^a$ 一个输入一个 $v \in V, \varphi \in V^*$(不强调 v 和 φ 的顺序) 输出一个 $f \in F$ 的映射的话, 那么它们相同.

3. 如果视 $M^a{}_b$ 一个 $V \to V^*(V^* \to V)$ 的映射, 视 $M_b{}^a$ 一个 $V \to V^*(V^* \to V)$ 的话, 那么它们相同.

所以说按照最严格定义的话, 那么 $M^a{}_b$ 和 $M_a{}^b$ 一定不同! 度规的升降是 "最严格的", 所以可以通过度规的升降再来表述一下 $M^a{}_b$ 和 $M_a{}^b$ 的不同:

$$M_b{}^a = g_{bc} g^{ad} M^c{}_d \neq M^a{}_b \tag{1.188}$$

注 1.1.14

至此, 可以再谈一下对于张量积和作用的理解. 张量积, 以 $v \in V$ 和 $\varphi \in V^*$ 的张量积 $v \otimes \varphi$ 为例, 可以发现取张量积实际上就是将两个映射 "黏" 在了一起, 而黏的方法是分别作用之后再乘在一起, 而这里的乘是传统的数之间的乘法自然也就有着交换律, 所以唯一不能交换的是输入给 $v \otimes \varphi$ 的有序对 (A, B) 之中 a, b 的顺序, 所以我们发现抽象指标就是强制给这两个元素一个序号, 也就是 $(A, B) = A, a, B, b$ (惊奇的发现这就是集合论里面构造有序对的方式!) 所以采用了抽象指标之后

$$v \otimes \varphi = v^a \varphi_b = \varphi_b v^a \tag{1.189}$$

是没有一点奇异的! 而考虑到张量积的本质是一个多重线性映射, 从而域 F 中的元素 (姑且称为 "数", 虽然 F 不一定是一个数域) 自然是按如下方式交换位置的:

$$f(v^a \varphi_b) = (f v^a)\varphi_b = v^a f \varphi_b \tag{1.190}$$

所以我们只要采用了抽象指标不管是干什么都是可以交换的啦!
当然运用抽象指标的话我们可以发现张量之间的张量积也就变为了直接的乘法, 当然要注意输入槽的顺序, 如果仅仅告诉你一个张量 T 为

$$T^{(\cdot,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,\cdot)} \tag{1.191}$$

的话, 那么是没有指定输入的顺序的, 而当你将上述张量展开为

$$T = T^{(\cdot,\cdots,\cdot)}_{(\cdot,\cdots,\cdot)} = T^{a_1 \cdots a_k}{}_{b_1 \cdots b_l} \tag{1.192}$$

之后, 就可以明确地知道输入的顺序了 (严格来说还需要知道 $\{a_i\}$ 到槽 $(\cdot, \cdots, \cdot)$ 中具体位置的一个映射, 但是习惯上我们默认就是顺序), 输入的东西应该是形如 $(a_1, \cdots, a_k, b_1, \cdots, b_l)$(这里的 a_1 强调的不是输入的东西是 a_1, 而是这个地方输入的东

西对应到 a_1 去), 当然这里的 $T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}$ 就表明这个张量 T 是通过 $V^*\times\cdots\times V^*\times V\times\cdots\times V\to F$ 定义出来的.
那么现在就有一个问题了, 对于 $T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}\otimes T^{c_1\cdots c_k}{}_{d_1\cdots d_l}$ 输入的东西到底是形如

$$(a_1,\cdots,a_k,b_1,\cdots,b_l,c_1,\cdots,c_k,d_1,\cdots,d_l) \tag{1.193}$$

还是形如

$$(c_1,\cdots,c_k,d_1,\cdots,d_l,a_1,\cdots,a_k,b_1,\cdots,b_l) \tag{1.194}$$

答案就是继承原来的顺序. 原来 $T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}$ 在左, 所以输入的 $a_1,\cdots,a_k,b_1,b_2,\cdots,b_l$ 就在左. 实际上这样的观点通过基展开的方式最好解释了:

$$T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}=T^{\mu_1\cdots\mu_k}{}_{\nu_1\cdots\nu_l}e_{\mu_1}\otimes\cdots\otimes e_{\mu_k}\otimes e^{\nu_1}\otimes\cdots\otimes e^{\nu_l} \tag{1.195}$$

而

$$T^{c_1\cdots c_k}{}_{d_1\cdots d_l}=T^{\rho_1\cdots\rho_k}{}_{\sigma_1\cdots\sigma_l}e_{\rho_1}\otimes\cdots\otimes e_{\rho_k}\otimes e^{\sigma_1}\otimes\cdots\otimes e^{\sigma_l} \tag{1.196}$$

所以

$$T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}\otimes T^{c_1\cdots c_k}{}_{d_1\cdots d_l}=T^{\mu_1\cdots\mu_k}{}_{\nu_1\cdots\nu_l}T^{\rho_1\cdots\rho_k}{}_{\sigma_1\cdots\sigma_l}e_{\mu_1}\otimes\cdots\otimes e_{\mu_k}\otimes e^{\nu_1}\otimes\cdots\otimes e^{\nu_l}\otimes e_{\rho_1}\otimes\cdots\otimes e_{\rho_k}\otimes e^{\sigma_1}\otimes\cdots\otimes e^{\sigma_l} \tag{1.197}$$

从而通过上式就可以知道输入槽的顺序了.
我们再来理解一下缩并, 实际上任何作用能视为缩并的元素是:

$$\text{作用}=\text{张量积}+\text{缩并}$$

所以对于任何的缩并, 我们都能归结于

保持原来的顺序!

$$A\otimes e^\mu\otimes B\otimes C\otimes e_\nu\otimes D=(e^\mu e_\nu)\,A\otimes B\otimes C\otimes D \tag{1.198}$$

$\delta^\mu{}_\nu$ 一个 F 中的元素

这是缩并的另一定义, 其实质上是与之前给出的定义方式等价的. 但是这个定义方式更加的直观, 也更加的容易理解, 毕竟其是作用于基的. 至此能解释了为什么

$$g_{ab}g^{bc}=\delta_a{}^c \tag{1.199}$$

这实际上是因为 通过这个顺序能看出为什么 $\delta_a{}^c$ 中 a 在左 c 在右

$$g_{ab}g^{bc}=g_{\mu\nu}g^{\sigma\rho}e^\mu\otimes e^\nu\otimes e_\sigma\otimes e_\rho=g_{\mu\nu}g^{\sigma\rho}\delta^\nu{}_\sigma\, e^\mu\otimes e_\rho \tag{1.200}$$

这些都是 F 中的元素

如蓝色注释中所说的一样, $g_{\mu\nu},g^{\sigma\rho},\delta^\nu{}_\sigma$ 只是 F 中的元素, 所以可以按照上一 *Remark* 刚开始的时候中提到的 *1. 2. 3.* 观点理解 $M^a{}_b=M_a{}^b$ 中的 *2.* 观点来看待这个问题, 容易发现此处 $\delta^\nu{}_\sigma$ 实际没有必要错开 (因为其不表明 $V\times V^*\to F$ 或者 $V^*\times V\to F$), 此处错开只是为了好看!

对于一个 (2,0) 型的张量 M^{ab}, 如果其是一个对称张量, 那么就满足了

$$M^{ab} = M^{ba} \tag{1.201}$$

如果对上面的式子进行升降指标有:

$$g_{ca}M^{ab} = g_{ca}M^{ba} \Longrightarrow g_{ca}M^{ab} = M^{ba}g_{ac} \Longrightarrow M_c{}^b = M^b{}_c \tag{1.202}$$

从而可知: (2,0) 型对称张量升降指标所得到的 (1,1) 型张量是自伴的. (该结论对与反对称也成立)

1.1.13 矩阵语言下的伴随表述

矩阵语言下: 矢量 v 是列矩阵, 其对偶空间伴随式 $v^\dagger$ 是行矩阵, 对偶矢量 φ 是行矩阵, $\varphi^\dagger$ 是列矩阵, 并且有:

$$u^\dagger = v^\dagger u = g(u,v) \tag{1.203}$$

对于 (1,1) 型张量 M, 其对偶空间伴随式 $M^\dagger$ 的定义可以写为:

$$u^\dagger M^\dagger = (Mu)^\dagger \tag{1.204}$$

(这就是量子力学中的引入伴随的方法), 我们来验证这样子定义和我们之前给出的伴随映射的自洽性

这一步调整顺序是为了和矩阵运算对应

$$v^a = M^a{}_b u^b \Longrightarrow v^\dagger = v^\dagger_a = g_{ac}M^c{}_b u^b = g_{ac}M^c{}_d g^{de} g_{ef} u^f = M_a{}^b u_b = = u_b M_a{}^b = u^\dagger M^\dagger \tag{1.205}$$

由于度规作为一个 (0,2) 型张量, 其也可以对应到矩阵, $g_{ab} = g_{ba}$ 就可以表示为

这里 g 和 g^T 都是矩阵

$$g_{ab} = g_{ba} = g^T{}_{ab} \Longrightarrow g = g^T \tag{1.206}$$

此时矢量 u 和 v 的内积可以表示为:

$$u^\mu g_{\mu\nu} v^\nu = u^T g v \tag{1.207}$$

类似的, 一些对偶空间伴随式也可以通过矩阵的方式表出:

1. $v_\mu = g_{\mu\nu}v^\nu \Longleftrightarrow v^\dagger = (gv)^T = v^T g;$
2. $\varphi^\mu = \varphi_\nu g^{\mu\nu} \Longleftrightarrow \varphi^\dagger = (\varphi g^{-1})^T = g^{-1}\varphi^T;$
3. $(M^\dagger)^\mu{}_\nu \equiv M_\nu{}^\mu = g^{\mu\sigma}M^\rho{}_\sigma g_{\rho\nu} \Longleftrightarrow M^\dagger = g^{-1}M^T g.$

1.1.14 复内积空间, 以及内积诱导的伴随映射

定义 1.1.16: 内积空间

线性空间, 赋予满足下述条件的一个内积运算: $\forall u, v, w \in V; p \in P$

1. $< u, v + w >=< u, v > + < u, w >$;
2. $< u, v >= p < u, v >$;
3. $< u, v >=< v, u >^*$;
4. $< u, u >\geq 0$.

则称之为内积空间.

注意: 线性空间和度规空间之间没有包含关系, 度规空间没有 "共轭线性" 这一概念, 同时内积空间也无法表达非正定的度规.

在内积空间中, 内积可以诱导出一个 $V \to V^*$ 的自然同构映射 $v \mapsto v^\dagger \equiv< v, \cdot >$, 其中 $v^\dagger \in V^*$, 这个映射同样称之为伴随映射, 而且在复内积空间中还称为厄米共轭; 我们同样地简记 $(v^\dagger)_a$ 为 v_a, 从而有:

$$< v, u >= v_a u^a \tag{1.208}$$

考虑上述的伴随映射作为一个同构映射的逆映射, 其把 $\varphi_a \mapsto \varphi^a$, 上式中的 $(\varphi^\dagger)^a$ 简要记录为 φ^a, 在对偶空间上定义内积:

$$< \varphi, \omega >\equiv \varphi^a \omega_a =< \omega^\dagger, \varphi^\dagger > \tag{1.209}$$

上式中最右边的式子中的内积是 V 中的内积.

容易发现在上述的定义下有:

$$(e_\mu)_a = (e^\mu)_a, \quad (e^\mu)^a = (e_\mu)^a \tag{1.210}$$

矢量 v 的分量, 和对偶矢量 $v^\dagger$ 的分量 v_μ 之间的对应关系为:

$$v_\mu = v_a (e_\mu)^a =< v, e_\mu > \tag{1.211}$$

$$v^\mu = v^a (e^\mu)_a = (e_\mu)_a v^a =< e_\mu, v > \tag{1.212}$$

同时考虑到

$$< v, e_\mu >=< e_\mu, v >^* \tag{1.213}$$

从而在自然同构的意义下有

$$v_\mu = (v^\mu)^* \tag{1.214}$$

在矩阵表述下有

$$(v_\mu) = (e^\mu)^* \tag{1.215}$$

将内积空间中的伴随映射这一概念推广到一般的张量:

定义 1.1.17: 对偶空间伴随式 (内积空间情形)

对于内积空间 V 上的张量 $T \in \mathscr{T}_V(k,l)$, 定义其对偶空间伴随对象为 $T^\dagger \in \mathscr{T}_V(l,k)$ 满足

$$T^{\dagger(v^1,\cdots,v^l)}_{(\varphi_1,\cdots,\varphi_k)} \equiv \left(T^{(\varphi^1,\cdots,\varphi^k)}_{(v_1,\cdots,v_l)}\right)^* \tag{1.216}$$

从而对于 $T^\dagger$ 的分量 $T^{\dagger(e^{\nu_1},\cdots,e^{\nu_l})}_{(e_{\mu_1},\cdots,e_{\mu_k})}$ 有

$$T^{\dagger(e^{\nu_1},\cdots,e^{\nu_l})}_{(e_{\mu_1},\cdots,e_{\mu_k})} = \left(T^{(e^{\mu_1},\cdots,e^{\mu_k})}_{(e_{\nu_1},\cdots,e_{\nu_l})}\right)^* \tag{1.217}$$

特别的对于 (1,1) 型张量 $M^a{}_b$, 通过上述的观点可以发现, 依矩阵表述的话有:

$$M^\dagger = (M^T)^* \tag{1.218}$$

至此, 上述所有观点在量子力学中的运用就是: 通过矩阵表示有:

(1) $<u|v>= u^\dagger v = (v^\dagger u)^*$;

(2) $v \to |v>, v^\dagger \to |v>^\dagger =<v|$;

(3) $<u|M^\dagger = (M|u>)^\dagger$

§ 1.2 一些量子力学中常用的数学概念及语言

此节对应 Shankar 的 Mathematical Introduction 部分

1.2.1 Linear Vector Spaces: Basics

一些基础的代数概念不再过多叙述, 我只列出那些容易遗漏的, 或者说是相对重要的.

定义 1.2.1: 线性空间的维数

线性空间的维数是线性无关的向量组中向量个数的最大值. 线性相关性指的是: 对于 $\{|i\rangle\}$, 如果存在不全为零的一组数 a_i 使得 $a_i\,|i\rangle = 0$, 那么称它们线性相关.

定理 1.2.1

对于 n 维线性空间中的任意一个向量 $|V\rangle$, 其一定能表述为 n 个线性无关的向量的线性组合.

证明. 如若不能, 不妨取 V 的一组基 $\{|i\rangle\}_{1\le i\le n}$(无限维线性空间能找到基依赖于 Zorn 引理, 有限维则是自然的), 那么容易发现 $|V\rangle \cup \{|i\rangle\}_{1\le i\le n}$ 是 V 中的线性无关组, 矛盾. □

通过证明可以发现 $|V\rangle \in V$ 一定能表示为 $|V\rangle = v_i\,|i\rangle$, 我们称呼 v_i 为 $|V\rangle$ 的 components. 容易证明 $\{v_i\}$ 是唯一的.

我们定义 $V\otimes V \to F$ 的一个运算 σ, 将其表示为

$$\begin{aligned}\sigma: \quad V\otimes V &\longrightarrow F \\ (|V\rangle, |W\rangle) &\longmapsto \langle V|W\rangle\end{aligned} \tag{1.219}$$

如果其满足

- $\langle V|W\rangle = \langle W|V\rangle^*$;
- $\langle V|V\rangle \geq 0, \quad 0\, iff\, |V\rangle = |0\rangle$;
- $\langle V|\left(a\,|W\rangle + b\,|Z\rangle\right) \equiv \langle V|aW + bZ\rangle = a\langle V|W\rangle + b\langle V|Z\rangle$

那么称其为内积, 一个赋予内积的线性空间就称为内积空间.

当我们引入了内积, 就可以叙述正交的概念, 同时由于引入了内积, 那么也就自然诱导出了一个范数, 从而我们可以映入向量的模的概念, 从而就可以定义标准正交基这一概念。

定理 1.2.2: Gram-Schmidt

任意一个线性无关的向量组 $\{v_i\}$ 都可以通过线性组合将其正交归一化.

证明. 递推即证, 不多复述. □

首先值得说明的是, 按照我们之前的定义 $\langle V|W\rangle$ 只是一个记号, 表示的是 $(|V\rangle, |W\rangle)$, 但事实上容易发现 $\langle V|$ 本身就能作为一个对偶空间中的元素存在, 也就是:

$$\langle V| \equiv (|V\rangle, \cdot) \tag{1.220}$$

也就是说一个拥有内积的线性空间, 可以自然诱导出一个 V 到 V^* 的同构映射, 具体而言就是 $|V\rangle \mapsto \langle V|$.

有了标准正交基, 我们就能发现一个自然的 V 到 F^n 的同构映射, 或者说是 V 的一个表示, 具体而言 $|V\rangle \mapsto [v_1, \cdots, v_n]^T$, 其中 $\{v_i\}$ 是 $|V\rangle$ 在标准正交基下的 components, 这样表示的好处是, 我们可以进一步自然的表示 $\langle V| \in V^*$, 具体而言是 $\langle V| \mapsto [v_1^*, \cdots, v_n^*]$, 从而内积可以简单的表示为我们熟知的矩阵运算:

$$\langle V|W\rangle = [v_1^*, \cdots, v_n^*]\begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \tag{1.221}$$

可以发现对于一个线性空间: 以下三者等价

- 指定内积;
- 指定 $V \to V^*$ 的同构映射;
- 指定标准正交基.

一切都是那么自然!

之前提到过可以将任意的 $|V\rangle$ 表示为一个基的线性组合, 如若引入了标准正交基, 对于 $|V\rangle$ 的表示会更加自然, 这是因为运用内积 (有了标准正交基就有了内积) 有:

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\,\langle i|V\rangle \tag{1.222}$$

1.2.2 Adjoint Operation

之前我们提到过 $|V\rangle \mapsto \langle V|$ 是一个 $V \to V^*$ 的由内积诱导地自然地同构映射, 我们习惯上把这个映射还称为 adjoint operation, 我们之前只讨论了 $|V\rangle \in V$ 的伴随映射, 并且给出了一个表示

注 1.2.1

这里插入一下, 需要特别注意的是, 虽然将 $|V\rangle$ 表示为 V 的任意一个基下的 *components* 组成的列向量都是可以的, 但是只有将 $|V\rangle$ 表示为标准正交基下的 *components* 才是自然的, 这体现在这样子表示对于 *adjoint operation* 的自然兼容, 具体而言只有在标准正交基下的矩表示才可以简单的认为可以将 $\langle V|$ 表示为 $[v_1^*,\cdots,v_n^*]$, 即 $|V\rangle$ 的列向量表示的共轭转置, 至于我这样断言的理由: 我们不妨认为 $|V\rangle$ 在基下的表示是 $[1,0,\cdots,0]^T$, 那么就有了

$$\langle V|V\rangle=[1,0,\cdots,0]\begin{bmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix}=1 \tag{1.223}$$

但既然我们说的是基, 而不是标准正交基, 所以 $|V\rangle$ 的 *norm* 自然就不一定是 1.
所以为了兼容对偶空间的表示, 我们总是喜欢考虑 "标准正交基", 所以在量子力学中, 我们在 *Hilbert* 空间之中找基的时候往往找的就是 "标准正交基", 但这一点有时候是会被忽视掉, 或者许多时候我们都不强调这一点, 这是因为在量子力学中我们假定了

任意算符的本征函数组成了 "标准""正交""完备" 的一组基

而在量子力学中所考虑的基往往就是本征函数组成的基, 从而往往我们找到的基自然就是 "标准""正交""完备" 的!

表示方法已经蕴含在上面这个 Remark 中了. 但是伴随映射完全可以不局限于 $|V\rangle$ 上, 对于任意一个张量我们都可以定义其伴随映射, 这个时候我们引入记号 †, 我们称 something† 就是 something 在伴随映射下的像.

注 1.2.2

当我在想绕过一些有关 † 的细节, 而直接给出张量的伴随映射是什么样子的时候, 我还是遇到了一些困难, 毕竟伴随映射这个东西最好就是直接从 *Tensor* 的角度出发来讲, 矩阵只是其一个表示, 而且是因为刚好满足运算规律的表示, 其能表示是存在一些 "巧合" 的, 所以想要讲清楚 *adjoint operation* 就不可以通过矩阵来讲, 如果我直接说如果 Ω 是 $\Omega^a{}_b$ 的矩阵表示, 那么 $\Omega_a^{\dagger b}$ 的矩阵表示就是 $\Omega^\dagger$ 也就是 Ω 矩阵的共轭转置, 那么我感觉这是绝对不严谨的 *(*从布尔巴基的角度来说的 *hhhh*, 虽然物理人好像都不怎么布尔巴基*)*, 所以我还是打算在 *Remark* 中再讲一些 *Tensor.*
运用 *Tensor* 语言的话, $|v\rangle$ 就是一个 *(1,0)* 型张量 v^a, $\langle v|$ 就是一个 *(0,1)* 型张量 $v_a^\dagger$, V 上的内积就是

$$(|v\rangle,|w\rangle)=\langle v|w\rangle=v_a^\dagger w^a \tag{1.224}$$

同样的我们可以自然的定义一个对偶空间上的内积, 考虑的方式为: 我们已经有了 V 上的一个内积, 从而就有了 V 中的标准正交基 $\{i^a\}$, 从而就有了 V^* 的基 $\{i_a^\dagger\}$, 自然的想法就是认为 $\{i_a^\dagger\}$ 是标准正交基, 从而 V^* 有了标准正交基, 也就有了内积 *(*从而也就有了 $V^*\to V^{**}$ 的自然的同构映射, 不妨也即其为 †, 即 $\varphi\in V^*$ 在这个同构映射下的像为 $v^{\dagger\dagger}$*)*,

可以发现的是这样子的话, 就有了:

这里是 V 中的内积

$$v^{\dagger\dagger}w^{\dagger} = \boxed{(v^{\dagger}, w^{\dagger})} = (v_i^{*}i^{\dagger}, w_j^{*}j^{\dagger}) = v_i^{**}w_i^{*} = w_i^{*}v_i = \boxed{(w, v)} = w^{\dagger}v \tag{1.225}$$

这里的内积是 V^* 中的内积

至此可以发现: 还是那句话 "一切都是那么自然".
上面引入了 $\varphi \in V^*$ 的 $\dagger$ 的概念, 所以至此我们才能引入张量的 $\dagger$, 毕竟张量是作用于 V 和 V^* 中的元素上的, 所以自然需要先给出 V 和 V^* 中元素的 $\dagger$ 再诱导出 *Tensor* T 的 $\dagger$.
具体而言: 对于一个 *(k,l)* 型张量 $T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}$, 现在有一个 *(l,k)* 型张量 $T^{\dagger}{}_{a_1\cdots a_k}{}^{b_1\cdots b_l}$, 其满足

$$T^{\dagger}{}_{a_1\cdots a_k}{}^{b_1\cdots b_l}v^{a_1}\cdots v^{a_k}\varphi_{b_1}\cdots\varphi_{b_l} = \left(T^{a_1\cdots a_k}{}_{b_1\cdots b_l}v^{\dagger}_{a_1}\cdots v^{\dagger}_{a_k}\varphi^{\dagger b_1}\cdots\varphi^{\dagger b_l}\right)^{*} \tag{1.226}$$

这里为简单起见以不同的抽象指标来表示不同的元素, 即我们有 $v^{a_1} \neq v^{a_2}$.
有了上述的定义我们就能轻易的写出 $T^{\dagger}$ 和 T 的分量之间的关系, 我们以 $|v\rangle \equiv v^a$ 为例子来看, 有

$$\langle v| \text{ 的 } i \text{ 分量} = v^{\dagger}{}_a \text{ 的 } i \text{ 分量} = v_a^{\dagger}i^a = (v^a i_a^{\dagger})^{*} = |v\rangle \text{ 的 } i \text{ 分量的共轭} \tag{1.227}$$

当然上述的例子之中只蕴含了 $\dagger$ 所表明的共轭, 但是回忆 $|v\rangle$ 的矩阵表述之中 $\dagger$ 还蕴含了 ^{T}, 这里是不是省略了什么呢?
事实上并没有, 因为之前也提及过了的:"矩阵表示只是形式上的表示" 其是一种十分精致的 "巧合", $\dagger$ 所蕴涵的 ^{T} 只是为了 "凑" 这种形式上的工整性!
我们再来看 $\Omega^a{}_b$ 的 $\dagger$, 有

$$\Omega^{\dagger j}_{i} = \Omega^{\dagger b}_{a} i^a j^{\dagger}_b = \left(\Omega^a{}_b i^{\dagger}_a j^b\right)^{*} = \left(\Omega^i{}_j\right)^{*} \tag{1.228}$$

可以发现的是 $\Omega^{\dagger}$ 的对应元素就是 Ω 的对应元素取一个共轭, 如若我们类比之前的 $|v\rangle$ 的矩阵表示的 $\dagger$ 还需要蕴涵一个 ^{T}, 我们就有了 $\Omega^{\dagger}$ 的矩阵表示是 Ω 的矩阵表示的共轭转置, 这也是我们所熟知的结论!

回归正题, 通过上述的所有讨论, 可以知道的是任何一个 Tensor 都可以有其 adjoint. 当然 Tensor 之间存在加法、减法、张量积、缩并，而同时张量之间的这些运算所得到的结果都是一个张量, 而结果的这个张量是可以存在 $\dagger$ 的, 所以自然就要问对于一个 "张量之间运算的表达式", 如果想要取其 $\dagger$, 那么需要怎么取, 或者更自然一些的问题是: $\dagger$ 运算需要有什么性质.

容易发现的是 $\dagger$ 运算是一个线性运算, 即有:

$$(T + W)^{\dagger} = T^{\dagger} + W^{\dagger} \tag{1.229}$$

$$(kT)^{\dagger} = k^{*}T^{\dagger} \tag{1.230}$$

同时通过 † 的定义容易发现还有

$$(T \otimes W)^\dagger = T^\dagger \otimes W^\dagger \tag{1.231}$$

即 † 保 ⊗

额外的我们可以发现 † 是保缩并的, 也就是说先缩并再 adjoint 和先 adjoint 再缩并是一样的, 为了证明这点我们先依赖线性性可以发现命题归结于证明

$$(i^a j_a^\dagger)^\dagger = i_a^\dagger j^{\dagger\dagger a} \tag{1.232}$$

即证

$$(i^\mu j_\mu^\dagger)^\dagger = i_\mu^\dagger j^{\dagger\dagger\mu} \tag{1.233}$$

而考虑到 $(i^\mu)^\dagger = (i^\mu)^* = (i^\dagger)_\mu$, 从而有

$$LHS = i^{\mu *} j_\mu^{\dagger *} = i_\mu^\dagger j^{\dagger\dagger\mu} = RHS \tag{1.234}$$

至此我们发现 † 运算什么都 “保”! 再一次的, 一切都是那么自然!

再回忆对偶空间 V^*, 由于其同构于 V, 我们可以理解 V^* 是 V 的一个备份, 从而我们对于 V 中的一个表达式, 自然的就会想得到其再 V^* 中的备份, 考虑到自然的

$$LHS = RHS \Longleftrightarrow LHS^\dagger = RHS^\dagger \tag{1.235}$$

所以我们只需要通过 V 的等式两端作用 † 就可以不丢失任何信息地得到等式再 V^* 中的备份, 就比如在 V 中有

$$|V\rangle = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle \langle i|V\rangle \tag{1.236}$$

两端作用 † 就有

$$\langle V| = \left\{ \sum_{i=1}^{n} |i\rangle \langle i|V\rangle \right\}^\dagger = \sum_{i=1}^{n} \langle i| \{\langle i|V\rangle\}^\dagger = \sum_{i=1}^{n} \langle i| \{\langle i|V\rangle\}^* = \sum_{i=1}^{n} \langle V|i\rangle \langle i| \tag{1.237}$$

当然从张量的视角下我们可以直接写出

$$\langle V| = \left\{ \sum_{i=1}^{n} |i\rangle \langle i|V\rangle \right\}^\dagger = \sum_{i=1}^{n} \langle i| \, |i\rangle \langle V| \tag{1.238}$$

但是要注意我们所考虑的缩并是 $|i\rangle$ 与 $\langle V|$ 之间的缩并, 而不是 $\langle i|$ 与 $|i\rangle$ 之间的缩并所以有:

$$\sum_{i=1}^{n} \langle i| \, |i\rangle \langle V| = \sum_{i=1}^{n} \langle i| \langle V|i\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle V|i\rangle \langle i| \tag{1.239}$$

至此在张量视角下的 † 已经阐述完毕了!

物理人还是比较喜欢把张量写为矩阵, 之前也提到过把张量写为矩阵意义下的 † 还需要额外考虑其内蕴了 ^{T}, 由于对于矩阵有 $(AB)^T = B^T A^T$, 所以自然的, 物理人的 † 是需要考虑不同元素的先后顺序的, 我直接将结论表述如下:

定理 1.2.3

To take the adjoint of an equation involving bras and kets and linear operators and coefficients, reverse the order of all factors, dagger the linear operators, exchanging bras and kets and complex conjugating all coefficients.

值得注意的是等式不同元素之间的顺序在张量视角下是无用的, 所以对于任何只包含了 (0,0) 型张量即标量, (0,1) 型张量, (1,0) 型张量, (1,1) 型张量的等式的 adjoint 我们都不妨“换一个序”，毕竟这样的话就兼容矩阵表示了！当然这里还没有给出算符的矩阵表示, 以及算符的 adjoint 的矩阵表示是否真的满足 $\Omega^\dagger = \Omega^{*T}$, 这在之后会证的.

1.2.3 Linear Operators

事实上 Hilbert space 上的 Linear Operators 就是一个 (1,1) 型张量, 所以其部分性质已经蕴涵在之前的讨论之中了. 这里只论述一些新东西:

对于一个 Linear Operator Ω, 如果存在一个 Λ 使得

$$\Lambda\Omega = \Omega\Lambda = I \tag{1.240}$$

那么就称呼 Λ 为 Ω 的逆, 记其为 Ω^{-1}. 一个有趣的命题是

定理 1.2.4

如果我们考虑的 V 是一个有限维线性空间, 那么

$$\text{左逆} \iff \text{右逆} \tag{1.241}$$

即

$$\Lambda\Omega = I \iff \Omega\Lambda = I \tag{1.242}$$

这个定理在我们给出线性算符的矩阵表示之后就是显然的了, 所以我们来将线性算符的矩阵表示, 我们之前其实已经提到过了 Ω 作为一个张量, 固然有着分量的概念, 而 Ω 的矩阵表示就是把这些分量排成一个矩阵, 具体而言就是

$$\Omega \iff \begin{bmatrix} \langle 1|\,\Omega\,|1\rangle & \langle 1|\,\Omega\,|2\rangle & \cdots & \langle 1|\,\Omega\,|n\rangle \\ \langle 2|\,\Omega\,|1\rangle & \langle 2|\,\Omega\,|2\rangle & \cdots & \langle 2|\,\Omega\,|n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle n|\,\Omega\,|1\rangle & \langle n|\,\Omega\,|2\rangle & \cdots & \langle n|\,\Omega\,|n\rangle \end{bmatrix} \tag{1.243}$$

至于为什么要这样表示, 自然的原因就是这样表示兼容 $|V\rangle$ 的矩阵表示, 具体而言: 如果我已经给出了

$$|V\rangle \iff \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \tag{1.244}$$

那么我现在问 $|V'\rangle \equiv \Omega|V\rangle$ 在同样的基下的表示是什么? 我们考虑 $|V'\rangle$ 的 components(分量) v_i', 有

$$v_i' = \langle i|V'\rangle = \langle i|\Omega|V\rangle = \langle i|\Omega v_j|j\rangle = \langle i|\Omega|j\rangle v_j = \Omega_{ij}v_j \tag{1.245}$$

其中我将 $\langle i|\Omega|j\rangle$ 定义为 Ω_{ij}, 也就是矩阵的分量 (注意这里指的不是 (0,2) 型张量的分量, 强调的就是一个矩阵), 至于为什么是一个矩阵是因为此时有

$$\begin{bmatrix} v_1' \\ v_2' \\ \vdots \\ v_n' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \cdots & \Omega_{1n} \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & \cdots & \Omega_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Omega_{n1} & \Omega_{n2} & \cdots & \Omega_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \tag{1.246}$$

类似的有: 对于一个 $\langle V|$, 如有

$$\langle V| \Longleftrightarrow [v_1^*, v_2^*, \cdots, v_n^*] \tag{1.247}$$

由于 Ω 作为一个 (1,1) 型张量, 自然可以视为 V^* 上的一个线性变换, 从而我们可以将其作用到 $\langle V|$ 上, 原本我们理应写为 $\Omega\langle V|$ 但是出于习惯, 或者与矩阵表述的兼容, 我们喜欢写为 $\langle V|\Omega$ 表示 Ω 对于 $\langle V|$ 的作用, 我们现在来考察 $\langle V'| = \langle V|\Omega$ 的矩阵表示, 有

$$v_i'^* = \langle V'|i\rangle = \langle V|\Omega|i\rangle = v_j^*\langle j|\Omega|i\rangle = v_j^*\Omega_{ji} \tag{1.248}$$

从而可以知道 $\langle V'|$ 的矩阵表述满足

$$[v_1'^*, v_2'^*, \cdots, v_n'^*] = [v_1^*, v_2^*, \cdots, v_n^*] \begin{bmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{21} & \cdots & \Omega_{n1} \\ \Omega_{12} & \Omega_{22} & \cdots & \Omega_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Omega_{1n} & \Omega_{2n} & \cdots & \Omega_{nn} \end{bmatrix} \tag{1.249}$$

考虑到其中矩阵 Ω 在右, 这也就是为什么习惯上把 Ω 对于 $\langle V|$ 的作用写为 $\langle V|\Omega$.

我们还需要考虑的是算符 Ω 和算符 Λ 的复合, 对于我们之前给出的算符的矩阵表示是不是相容的, 考虑到

$$(\Omega\Lambda)_{ij} = \langle i|\Omega\Lambda|j\rangle = \langle i|\Omega I\Lambda|j\rangle = \langle i|\Omega|k\rangle\langle k|\Lambda|i\rangle = \Omega_{ik}\Lambda_{kj} \tag{1.250}$$

故, 诚然相容.

我们再来验证一下 $\Omega^\dagger$ 的分量, 有:

$$\Omega^\dagger{}_{ij} = \langle i|\Omega^\dagger|j\rangle = \{|j\rangle\Omega\langle i|\}^* = \Omega ji^* \tag{1.251}$$

故这也就验证了诚然有:

$$\Omega^\dagger = \Omega^{*T} \tag{1.252}$$

1.2.4 Hermitian, Anti-Hermitian, and Unitary Operators

定义 1.2.2: Hermitian Operators, Anti-Hermitian Operators

如果一个算符 Ω, 满足 $\Omega = \Omega^\dagger$, 那么我们就称 Ω 是一个厄密算符; 如果一个算符 Ω 满足 $\Omega = -\Omega^\dagger$, 那么我们就称其为反厄密算符.

定义 1.2.3: Unitary Operators

如果一个算符 U 满足 $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ 那么我们就称其为幺正算符.

1.2.5 Active and Passive Transformations

物理人很喜欢通过两者视角来看待 "变换", 在量子力学中海森堡绘景和薛定谔绘景就是一个体现, 在分析力学的正则变换中也会遇到对于变换的 Active 和 Passive 理解, 简单来说 Active 和 Passive 提供了看待同一个变换的两个视角. 以下就算符的变换为例来介绍这两种观点.

如果我们对于矢量空间 V 中的所有元素都作一个酉变换, 即我们考虑一个酉矩阵 (幺正矩阵) 作用到 V 中的所有元素上, $|V\rangle \mapsto U|V\rangle$, 那么 Ω 在新的基下的矩阵元素为

$$\langle i|\Omega|j\rangle = \langle Ui|\Omega|Uj\rangle = \langle i|U^\dagger \Omega U|j\rangle \tag{1.253}$$

- $\langle Ui|\Omega|Uj\rangle$ 的视角就是主动变换, 这种情况下算符 Ω 还是 Ω, 但是基 $|i\rangle$ 变换为了 $U|i\rangle$;
- $\langle i|U^\dagger \Omega U|j\rangle$ 的视角就是被动变换, 这种情况下基没有变换, 但是算符 Ω 变换为了 $U^\dagger \Omega U$.

1.2.6 Eigenvalues and Eigenvectors

本征值问题就是求方程

$$\Omega|V\rangle = \omega|V\rangle \tag{1.254}$$

的非平凡解 ($|V\rangle \neq |0\rangle$), 而非平凡就要求了必须有

$$\det(\Omega - \omega I) = 0 \tag{1.255}$$

这称为特征方程. 同时我们定义 $\det(\Omega - \omega I)$ 为算符 Ω 的特征多项式.

接下来我们给出一些有趣的代数结果:

定理 1.2.5

厄米算符的本征值是实数.

证明. 由于

$$\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle \tag{1.256}$$

所以有

$$\langle\omega|\Omega|\omega\rangle = \omega\langle\omega|\omega\rangle \tag{1.257}$$

又因为

$$\langle\omega|\Omega^\dagger = \langle\omega|\Omega = \omega^*\langle\omega| \tag{1.258}$$

从而有

$$\langle\omega|\,\Omega\,|\omega\rangle = \omega^*\langle\omega|\omega\rangle \tag{1.259}$$

故有:

$$0 = (\omega - \omega^*)\langle\omega|\omega\rangle \tag{1.260}$$

又因为 $|\omega\rangle$ 非平凡, 所以 $\omega = \omega^*$ 即 $\omega \in \mathbb{R}$. □

定理 1.2.6

幺正算符的本征值都是模长为 1 的复数.

证明. 由于

$$U\,|\omega\rangle = \omega\,|\omega\rangle \tag{1.261}$$

故有

$$\langle\omega|\,U^\dagger = \omega^*\,\langle\omega| \tag{1.262}$$

从而有:

$$\langle\omega|\,U^\dagger U\,|\omega\rangle = \omega\omega^*\langle\omega|\omega\rangle \tag{1.263}$$

从而可知

$$0 = (\omega\omega^* - 1)\langle\omega|\omega\rangle \tag{1.264}$$

由于 $|\omega\rangle$ 非平凡, 故也

$$\omega\omega^* = 1 \tag{1.265}$$

□

我们加下来想证明的是每一个 Hermitian, Anti Hermitian, Unitary 矩阵都可对角化, 但这只是谱定理的一个推论而已, 所以我们直接怎么谱定理好了:

通过内积可以简单的引出算符的伴随变换所得到的伴随算符的令一种定义, 容易发现其与之前给出的定义是相容的 (我们下面的算符指的就是线性算符, 也可以被理解为线性变换)

定义 1.2.4: 伴随算符

对于复 *(实)* 内积空间上的算符 Ω, 如果存在一个算符 Λ 使得成立

$$(\Omega\,|V\rangle\,, |W\rangle) = (|V\rangle\,, \Lambda\,|W\rangle), \quad \forall\,|V\rangle\,, |W\rangle \in V \tag{1.266}$$

那么就称 Λ 为 Ω 的伴随算符, 记作 $\Omega^\dagger$.

容易发现伴随算符满足 $\Omega^{\dagger\dagger} = \Omega$.

定义 1.2.5: 正规算符

对于复 *(实)* 内积空间上的算符 Ω, 如果有

$$\Omega^\dagger\Omega = \Omega\Omega^\dagger \tag{1.267}$$

那么就称其为正规算符.

引理 1.2.1

设 Ω 是复 *(实)* 内积空间 V 上的正规算符, 则对于任意向量 $|V\rangle \in V$, 有

$$|\Omega |V\rangle| = |\Omega^\dagger |V\rangle| \tag{1.268}$$

证明.

$$|\Omega |V\rangle|^2 = \langle V| \Omega^\dagger \Omega |V\rangle = \langle V| \Omega\Omega^\dagger |V\rangle = |\Omega^\dagger |V\rangle| \tag{1.269}$$

□

引理 1.2.2

设 Ω 是复 *(实)* 内积空间 V 上的一个正规算符, c 是任意一个复 *(实)*, 则 $cI - \Omega$ 也是 V 上的正规算符.

证明.

$$(cI - \Omega)^\dagger = c^* I - \Omega^\dagger \tag{1.270}$$

所以有

$$(cI - \Omega)(cI - \Omega)^\dagger = cc^* - c^*\Omega - c\Omega^\dagger + \Omega\Omega^\dagger \tag{1.271}$$

而

$$(cI - \Omega)^\dagger(cI - \Omega) = cc^* - c^*\Omega - c\Omega^\dagger + \Omega^\dagger\Omega \tag{1.272}$$

□

引理 1.2.3

设 Ω 是复 *(实)* 内积空间 V 上的一个正规算符, 则 λ_1 是 Ω 的一个特征值当且仅当 λ_1^* 是 $\Omega^\dagger$ 的一个特征值, $|V\rangle$ 是 Ω 的属于 λ_1 的特征向量, 当且仅当 $|V\rangle$ 是 $\Omega^\dagger$ 的属于特征值 λ_1^* 的一个特征向量。

证明. 只需要考虑到

$$|(\lambda_1 I - \Omega) |V\rangle| = |(\lambda_1^* I - \Omega^\dagger) |V\rangle| \tag{1.273}$$

即可. □

引理 1.2.4

设 Ω 是复 *(实)* 内积空间 V 上的一个线性算符, 且 Ω 有伴随算符 $\Omega^\dagger$, 如果 W 是 Ω 的不变子空间, 那么 $W^\perp$ 是 $\Omega^\dagger$ 的不变子空间.

证明. 任意的 $|V\rangle \in W^\perp$, 要证明 $\Omega^\dagger |V\rangle \in W^\perp$, 只需要证明对于任意的 $|U\rangle \in W$ 有

$$(\Omega^\dagger |V\rangle, |U\rangle) = \langle V| \Omega |U\rangle = 0 \tag{1.274}$$

而考虑到 $\Omega |U\rangle \in W$, 以及 $|V\rangle \in W^\perp$, 所以这是显然的. □

定理 1.2.7: Spectral Theorem

设 Ω 是有限维复内积空间 V 上的正规算符, 则 V 中存在一个标准正交基, 使得 Ω 在这个基下的矩阵式对角矩阵.

证明. 对空间的维数 n 作数学归纳法, 显然的是, $n=1$ 时命题成立. 下面不妨设命题对于 $n-1$ 维复内积空间成立.

由于 $\mathbb{C}$ 是一个代数闭域, 从而 Ω 的特征多项式一定有根, 即 Ω 一定存在一个特征值 λ, 以及一个对应的归一的特征向量 $|\lambda\rangle$, 显见 $|\lambda\rangle$ 还是 $\Omega^\dagger$ 的特征向量, 从而 $\{a\,|\lambda\rangle\,|a\in\mathbb{C}\}$ 是 Ω 和 $\Omega^\dagger$ 的不变子空间, 故 $\{a\,|\lambda\rangle\,|a\in\mathbb{C}\}^\perp$ 也是 $\Omega,\Omega^\dagger$ 的不变子空间.

我们简记 $\{a\,|\lambda\rangle\,|a\in\mathbb{C}\}^\perp$ 为 $\lambda^\perp$, 由于 $\lambda^\perp$ 是 Ω 和 $\Omega^\perp$ 的不变子空间, 从而我们可以考虑算符 $\Omega|\lambda^\perp$ 和 $\Omega^\dagger|\lambda^\perp$, 容易发现 $\Omega^\dagger|\lambda^\perp=(\Omega|\lambda^\perp)^\dagger$, 从而有

$$\begin{aligned}
&\Omega\Omega^\dagger=\Omega^\dagger\Omega\\
\Longrightarrow&(\Omega\Omega^\dagger)|\lambda^\perp=(\Omega^\dagger\Omega)|\lambda^\perp\\
\Longrightarrow&(\Omega|\lambda^\perp)(\Omega^\dagger|\lambda^\perp)=(\Omega^\dagger|\lambda^\perp)(\Omega|\lambda^\perp)\\
\Longrightarrow&(\Omega|\lambda^\perp)(\Omega|\lambda^\perp)^\dagger=(\Omega|\lambda^\perp)^\dagger\Omega|\lambda^\perp\\
\Longrightarrow&\Omega|\lambda^\perp\text{是 }\lambda^\perp\text{ 上的正规算符}
\end{aligned}\tag{1.275}$$

依据归纳假设可以知道存在 $\lambda^\perp$ 的一个标准正交基 $\{|i\rangle\}_{1\leq in-1}$ 使得 $\Omega|\lambda^\perp$ 对角化, 从而可以知道 $\{|\lambda\rangle\,,|1\rangle\,,|2\rangle\,,\cdots,|n-1\rangle\}$ 使得 Ω 对角化. □

有了上述定理, 可以简单的发现 Hermitian Operators, Anti Hermitian Operators, Unitary Operators 都是可以对角化的.

对于一个 Hermitian 矩阵 Ω, 运用 active 的观点可以说: *存在一个基使得 Ω 是对角矩阵*; 运用 passive 的观点可以说:*Ω 在任意一组标准正交基下的表示可以是非对角的, 但是存在一个 Unitary 矩阵 U 使得 $U^\dagger\Omega U$ 是对角的.*

具体而言为了对角化 Ω 我们先随便找个标准正交基把算符 Ω 表示为矩阵, 然后解本征方程, 得到本征值 $\{\lambda_i\}$ 和对应的正交归一的本征向量 $\{|\lambda_i\rangle\}$, 这里我们所解到的本征向量实际上已经就是本征向量在原先给定的标准正交基下的表示, 是一个个列向量, 把它们从左向右排成一个矩阵 (从左向右的顺序是 $|\lambda_1\rangle$, $|\lambda_2\rangle$, $\cdots$, $|\lambda_n\rangle$), 组成的矩阵我们就是 U, 容易发现其是一个 Unitary 矩阵, 此时我们有:

$$U^\dagger\Omega U=\mathrm{diag}\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}\tag{1.276}$$

接下来我们来研究同时对角化:

定理 1.2.8

如果 Ω_1,Ω_2 是正规算符, 且它们可交换, 即 $[\Omega_1,\Omega_2]=0$, 那么它们可以同时对角化.

证明. 我们这样考虑: 由于 Ω_1 可对角化, 从而任取其一个本征值 λ, 以及对应的本征向量 $|\lambda\rangle$, 有

$$\Omega_1\,|\lambda\rangle=\lambda\,|\lambda\rangle\tag{1.277}$$

从而有

$$\Omega_1\Omega_2\,|\lambda\rangle=\Omega_2\Omega_1\,|\lambda\rangle=\Omega_2\lambda\,|\lambda\rangle=\lambda\Omega_2\,|\lambda\rangle\tag{1.278}$$

从而若记 V_λ 为 Ω_1 的特征值 λ 的特征子空间, 可以发现的是 V_λ 也是 Ω_2 的不变子空间 (因为 $\Omega_2\,|\lambda\rangle$ 也是 Ω_1 的属于特征值 λ 的特征向量).

从而我们不妨假定 Ω_1 在基 $\{|\lambda_i\rangle\}_{1\leq i\leq n}$ 下对角化. 那么在基 $\{|\lambda_i\rangle\}_{1\leq i\leq n}$ 下 Ω_2 是分块对角矩阵, 第 i 个块对应的是 Ω_2 在 Ω_1 的特征子空间 V_{λ_i} 中的一个表示, 容易发现 $\Omega_2|V_{\lambda_i}$ 是 V_{λ_i} 上

的一个正规算符, 其固然可以对角化, 从而不妨在 V_{λ_i} 中取基 $\{|\lambda,\gamma\rangle\}_{1\le\gamma\le\dim V_{\lambda_i}}$ 使得 Ω_2 对角化. 那么容易发现在基 $\bigcup_\lambda\{|\lambda,\gamma\rangle\}_{1\le\gamma\le\dim V_{\lambda_i}}$ 下 Ω_1 和 Ω_2 同时对角化. 不失一般性的我们所筛选出来的基自然可以是标准正交基. □

事实上, 上述命题通过数学归纳法可以轻易推广为

定理 1.2.9

如果 $\{\Omega_i\}_{1\le i\le n}$ 是正规算符, 且它们两两可交换, 那么它们可以同时对角化.

在量子力学中比较令人头疼的事情是退化, 或者说简并, 对于一个算符而言, 这指的就是其存在维数不为 1 的特征子空间, 出现退化的算符的本征向量不是在相差一个常数缩放因子的意义下唯一的, 也就是说存在无穷多个相互线性无关的本征向量组, 出于一些测量的目的, 我们不希望这样的情况出现, 解决方法就是再找一个算符 Λ, 且这个算符和原先那个算符 Ω 可交换, 我们现在找的标准正交基是需要同时对角化 Ω 和 Λ, 我们试图通过这样的限制来使得所找到的标准正交基唯一 (在相差一个常数缩放因子的意义下), 然而光是两个算符 Ω,Λ 也并不一定能做到这一点, 但是我们直接假定:

• 完备性假设: 存在一族两两可交换的厄米算符 $\{\Omega,\Lambda,\Gamma,\cdots\}$ 使得同时对角化它们的标准正交基是唯一的

容易发现在这样的假定下我们对于每一个标准正交基可以赋予这样的 "编号": $|\omega,\lambda,\gamma,\cdots\rangle$, 其中 $\omega,\lambda,\gamma,\cdots$ 是对应算符的本征值, 对于标准正交基中任意两个不同的矢量, 它们的编号一定不同.

额外的, 我们直接认为上述的完备性假设对于无穷维 Hilbert 空间也成立.

Herimite 算符的对角化在量子力学中是十分有用的, 举个例子: 在解薛定谔方程

$$i\hbar\,|\dot{\Psi}\rangle = H\,|\Psi\rangle \tag{1.279}$$

的时候, 我们遵从以下三个步骤:

- 解 H 算符的本征值方程 (即将其对角化);
- 找到传播子 $U(t)$;
- 写出解 $|\Psi(t)\rangle = U(t)\,|\Psi(0)\rangle$.

1.2.7 算符函数, 算符导数

事实上初等函数 $\sin x,\cos x,e^x,\ln x,\cdots$, 都是可以作用于算符的, 我们只需要考虑 *Taylor* 展开即可, 我们考虑一个一般的泰勒级数, 并且以此定义一个算符的函数

$$f(\Omega) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n\Omega^n \tag{1.280}$$

当然上式是 well-defiened 的要求了右侧的级数是收敛的, 或者说是收敛到一个具体的算符上. 但此时的 "收敛" 的概念就显得扑朔迷离了, 毕竟收敛需要范数, 而算符的范数是什么我们现在还不知道. 但是我们可以绕过这点, 我们这样考虑: 既然算符可以表示为矩阵, 所以只要逐矩阵元收敛, 那么算符我们就认为收敛.

举个简单的例子, 我们来考虑:

$$e^{\Omega} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \Omega^n \tag{1.281}$$

此处额外的我们要求 Ω 是一个正规算符, 从而在一个标准正交基下可以将 Ω 表示为 $\mathrm{diag}\{\lambda_1, \cdots \lambda_m\}$ 形式的对角矩阵. 从而有

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \Omega^n &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_m \end{bmatrix}^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \begin{bmatrix} \lambda_1^n & & & \\ & \lambda_2^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_m^n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \lambda_1^n & & & \\ & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \lambda_2^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \lambda_m^n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} e^{\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda_m} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{1.282}$$

故按照之前的理解方式, 可以知道 e^{Ω} 在之前的同一个标准正交基下是 $\mathrm{diag}\{e^{\lambda_1}, e^{\lambda_2}, \cdots, e^{\lambda_m}\}$, 既然 e^{Ω} 的表示已经得到了, 那么 e^{Ω} 是什么也就研究透了.

如果算符 Ω 依赖于一个参数 λ, 不妨记作 $\Omega(\lambda)$, 我们定义其导数为

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda} := \lim_{\Delta\lambda \to 0} \frac{\Omega(\lambda + \Delta\lambda) - \Omega(\lambda)}{\Delta\lambda} \tag{1.283}$$

通过定义容易发现, 如果我们将 $\Omega(\lambda)$ 表示为一个矩阵的话, 那么 $d\Omega(\lambda)/d\lambda$ 在同样的一组标准正交基下的矩阵元素就是 $\Omega(\lambda)$ 的对应的矩阵元素的导数. 即如果有

$$\Omega(\lambda) = \begin{bmatrix} \Omega_{11}(\lambda) & \Omega_{12}(\lambda) & \cdots & \Omega_{1n}(\lambda) \\ \Omega_{21}(\lambda) & \Omega_{22}(\lambda) & \cdots & \Omega_{2n}(\lambda) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Omega_{n1}(\lambda) & \Omega_{n2}(\lambda) & \cdots & \Omega_{nn}(\lambda) \end{bmatrix} \tag{1.284}$$

那么就有

$$\frac{d\Omega(\lambda)}{d\lambda} = \begin{bmatrix} \frac{d\Omega_{11}(\lambda)}{d\lambda} & \frac{d\Omega_{12}(\lambda)}{d\lambda} & \cdots & \frac{d\Omega_{1n}(\lambda)}{d\lambda} \\ \frac{d\Omega_{21}(\lambda)}{d\lambda} & \frac{d\Omega_{22}(\lambda)}{d\lambda} & \cdots & \frac{d\Omega_{2n}(\lambda)}{d\lambda} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d\Omega_{n1}(\lambda)}{d\lambda} & \frac{d\Omega_{n2}(\lambda)}{d\lambda} & \cdots & \frac{d\Omega_{nn}(\lambda)}{d\lambda} \end{bmatrix} \tag{1.285}$$

现在来看个例子, 我们考虑算符 $\theta(\lambda)=e^{\lambda\Omega}$, 其中 Ω 是一个给定的厄密算符. 我们不妨选取一个标准正交基使得 Ω 对角化为 $\mathrm{diag}\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m\}$, 那么可以发现有

$$e^{\lambda\Omega}=\begin{bmatrix} e^{\lambda\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda\lambda_m} \end{bmatrix} \tag{1.286}$$

从而有

$$\frac{de^{\lambda\Omega}}{d\lambda}=\begin{bmatrix} \lambda_1 e^{\lambda\lambda_1} & & & \\ & \lambda_2 e^{\lambda\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_m e^{\lambda\lambda_m} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} e^{\lambda\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda\lambda_m} \end{bmatrix}=\Omega e^{\lambda\Omega} \tag{1.287}$$

类似的, 容易发现还有 $de^{\lambda\Omega}/d\lambda=e^{\lambda\Omega}\Omega$, 从而总结就是有:

$$\frac{de^{\lambda\Omega}}{d\lambda}=\Omega e^{\lambda\Omega}=e^{\lambda\Omega}\Omega \tag{1.288}$$

上述结论可以推广, 事实上如果我们默认了 “逐项求导” 的话, 对于任意算符 Ω, 都有

$$\frac{d}{d\lambda}e^{\lambda\Omega}=\frac{d}{d\lambda}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\lambda^n\Omega^n\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{d}{d\lambda}\frac{1}{n!}\lambda^n\Omega^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\lambda^{n-1}\Omega^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\lambda^n\Omega^{n+1} \tag{1.289}$$

从而分别左提出一个 Ω, 或者右提出一个 Ω 就可以得到:

$$\frac{de^{\lambda\Omega}}{d\lambda}=\Omega e^{\lambda\Omega}=e^{\lambda\Omega}\Omega \tag{1.290}$$

从而对于方程

$$\frac{d\theta(\lambda)}{d\lambda}=\theta(\lambda)\Omega \tag{1.291}$$

我们能直接得到它的解为

$$\theta(\lambda)=\Lambda e^{\lambda\Omega} \tag{1.292}$$

其中 Λ 是一个给定的算符或者是一个常数 (常数其实也能被视为一个算符).

一个值得注意的点是:

$$e^{\alpha\Omega}e^{\beta\Omega}=e^{(\alpha+\beta)\Omega} \tag{1.293}$$

但是

$$e^{\Omega}e^{\Lambda}\stackrel{?}{=}e^{\Omega+\Lambda} \tag{1.294}$$

事实上上式不一定成立, 但是如果 $[\Omega,\Lambda]=0$, 那么上式的确成立, 这是容易验证的.

1.2.8 Generalization to Infinite Dimensions

我们之前所做的讨论基本上都是局限在有限维线性空间上的, 如果我们需要推广到无线维线性空间, 许多事物的构造会变得有些困难, 这体现在 “无限” 这个东西本身就比较难以研究.

我们现在不妨考虑定义域为 $\mathbb{R}$ 的函数所构成的无线维线性空间, 其中的元素 f, 我们对应到 $|f\rangle$. 直接给出这个线性空间上的内积为

$$\langle f|g\rangle = \int f^*(x)g(x)dx \tag{1.295}$$

同时直接给出这个无限维线性空间的一组标准正交基 $\{|x\rangle\}$, 其需要满足:

- $\langle x|f\rangle = f(x)$;
- $\int |x'\rangle \langle x'| dx' = I$.

根据已有条件, 我们能进一步研究 $\{|x\rangle\}$, 做如下考虑:

$$\langle x|f\rangle = \langle x| I |f\rangle = \langle x| \left\{ \int |x'\rangle \langle x'| dx' \right\} |f\rangle = \int \langle x|x'\rangle\langle x'|f\rangle dx' = \int \langle x|x'\rangle f(x')dx' \tag{1.296}$$

从而我们能断言

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \tag{1.297}$$

这就是无限维线性空间标准正交基所需要满足的正交归一条件. 对比有限维线性空间中的正交归一: $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ 可以发现它们之间诚然有着区别.

命题 1.2.1

$\delta(x - x') = \delta(x' - x)$

证明. 首先 δ 函数我们认为是一个实值函数, 从而有

$$\delta(x - x') = \langle x|x'\rangle = \langle x'|x\rangle^* = \delta(x' - x)^* = \delta(x' - x) \tag{1.298}$$

□

我们接下来来考虑 δ 函数的导数 δ', 有

$$\delta'(x - x') = \frac{d}{d(x - x')}\delta(x - x') = \frac{d}{dx}\delta(x - x') = -\frac{d}{dx'}\delta(x - x') \tag{1.299}$$

从而有

$$\int \delta'(x - x')f(x')dx' = \int \frac{d}{dx}\delta(x - x')f(x')dx' = \frac{d}{dx}\int \delta(x - x')f(x')dx' = \frac{d}{dx}f(x) = f'(x) \tag{1.300}$$

从而观察上式, 可以发现我们可以 “在结果意义上的” 把 $\delta'(x - x')$ 写为:

$$\delta'(x - x') = \delta(x - x')\frac{d}{dx'} \tag{1.301}$$

更为一般的我们有:

$$\delta^{(n)}(x-x') \equiv \frac{d^n}{d(x-x')^n}\delta(x-x') = \frac{d^n}{dx^n}\delta(x-x') = \delta(x-x')\frac{d^n}{dx'^n} \tag{1.302}$$

通过傅里叶变换

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-ikx} f(x)dx \tag{1.303}$$

和傅里叶逆变换

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx} f(k)dk \tag{1.304}$$

可以得到

$$f(x) = \int \left\{\frac{1}{2\pi}\int dk e^{ik(x-x')}\right\} f(x')dx' \tag{1.305}$$

所以可以有

$$\frac{1}{2\pi}\int dk e^{ik(x-x')} = \delta(x-x') \tag{1.306}$$

注意我们没写积分上下限的就是默认在全定义域积分, 所以这里就是在 $\mathbb{R}$ 上积分.

一些额外的讨论, 通过完备性等式

$$\int |x\rangle \langle x| \, dx' = I \tag{1.307}$$

可以发现可以将 $|f\rangle$ 展开为

$$|f\rangle = \int dx f(x) \, |x\rangle \tag{1.308}$$

1.2.9 Operators in Infinite Dimensions

我们来研究求导算符:

$$D\,|f\rangle = |df/dx\rangle \tag{1.309}$$

两端作用一个 $\langle x|$ 可以得到:

$$\langle x| \, D \, |f\rangle = \frac{df(x)}{dx} \tag{1.310}$$

在其中插入一个完备性等式有:

$$\int \langle x| \, D \, |x'\rangle \langle x'|f\rangle dx' = \frac{df(x)}{dx} \tag{1.311}$$

也即

$$\int \langle x| \, D \, |x'\rangle \, f(x')dx' = \frac{df(x)}{dx} \tag{1.312}$$

观察发现有

$$\langle x| \, D \, |x'\rangle = \delta'(x-x') \tag{1.313}$$

注意到

$$D_{xx'} = \delta'(x-x') = -\delta'(x'-x) = -D_{x'x} \tag{1.314}$$

所以算符 D 一定不是厄米的. 但是我们能定义 $K := -ikD$ 使得成立

$$K_{xx'} = K^*_{x'x} \tag{1.315}$$

然而对于无限维线性空间一个十分重要的性质是: 如果算符 Ω 满足 $\Omega_{xx'} = \Omega^*_{x'x}$, 那么$\Omega$ 不一定是厄米算符! 首先严格来说

$$\begin{aligned}
\Omega\text{ 是厄米算符 } &\Longleftrightarrow \Omega^\dagger = \Omega \\
&\Longleftrightarrow \langle g|\,\Omega\,|f\rangle = \{\langle f|\,\Omega\,|g\rangle\}^* \\
&\Longleftrightarrow \int\int \langle g|x\rangle\,\langle x|\,\Omega\,|x'\rangle\,\langle x'|f\rangle dxdx' = \left(\int\int \langle f|x\rangle\,\langle x|\,\Omega\,|x'\rangle\,\langle x'|g\rangle dxdx'\right)^*
\end{aligned} \tag{1.316}$$

在最后一个式子我们代入 K 来看有, 注意这里上下限不妨设置为 a,b, 即我们考虑的函数是定义在区间 $[a,b]$ 上的, 有:

$$LHS = \int_a^b g^*(x)\left[-i\frac{df(x)}{dx}\right]dx; \quad RHS = \left(\int_a^b f^*(x)\left[-i\frac{dg(x)}{dx}\right]dx\right)^* \tag{1.317}$$

分布积分得到

$$LHS = -ig^*(x)f(x)|_a^b + i\int_a^b \frac{dg^*(x)}{dx}f(x)dx \tag{1.318}$$

所以可以总结出: K 是厄米算符, 当且仅当成立

$$g^*(x)f(x)|_a^b = 0 \tag{1.319}$$

所以算符 K 是否是厄米的还依赖于算符的作用域的性质, 即所考虑的 Hilbert 空间的性质, 容易发现以下两种情况是自然使得 K 是厄米的:

- 满足周期性条件, 例如我们所考虑的 a,b 是 $0,2\pi$, 其物理内涵是一个方位角 φ.
- 满足齐次的 Dirichlet 条件, 即对于任意 f 有 $f(a) = f(b) = 0$.

值得注意的是在量子力学中, 我们往往有 $a = -\infty, b = \infty$. 且量子力学中所设计的函数往往都满足以下两条之一:

- 在 $x \to \infty$ 的时候 $f(x) \to 0$.
- 函数类似于 e^{ikx}.

对于由这两类函数构成的 Hilbert 空间, 容易发现我们只需要说明

$$e^{ikx}e^{-ik'x}\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0, \quad k \neq k' \tag{1.320}$$

那么就能说明其上的 K 是一个 Hermitian 算符. 然而值得注意的是上式的确成立, 只不过是在类似于 Cesàro 意义下成立, 即我们考虑有

$$\lim_{x\to\infty} e^{ikx}e^{-ik'x} \equiv \lim_{L\to\infty,\Delta\to\infty} \frac{1}{\Delta}\int_L^{L+\Delta} e^{ikx}e^{-ik'x}dx = 0 \tag{1.321}$$

实际上这里对于“极限”的延拓所反映出的是用于描述物理的数学语言的不完备.

综上我们可以知道量子力学所考虑的 Hilbert 空间之中, 算符 K 是厄米的.

我们现在来解决厄密算符 K 的本征值问题, 即求解方程

$$K|k\rangle = k|k\rangle \tag{1.322}$$

在上述式子都左作用一个 $\langle x|$, 可以得到

$$\langle x|K|k\rangle = k\langle x|k\rangle \tag{1.323}$$

插入一个完备性方程, 得到

$$\int \langle x|K|x'\rangle \langle x'|k\rangle dx' = k\langle x|k\rangle \tag{1.324}$$

若我们记 $\langle x|k\rangle = \Psi_k(x)$, 那么有:

$$\int -i\delta'(x-x')\Psi_k(x')dx' = k\Psi_k(x) \tag{1.325}$$

即

$$-i\frac{d}{dx}\Psi_k(x) = k\Psi_k(x) \tag{1.326}$$

从而容易解得:

$$\Psi_k(x) = A_k e^{ikx} \tag{1.327}$$

由于我们总是默认所有本征函数构成一个正交完备基, 我们现在考虑将上述所得到的本征函数 Ae^{ikx} 归一, 从而得到一组正交归一完备基. 具体而言我们要求

$$\langle k'|k\rangle = \delta(k-k') \tag{1.328}$$

即有

$$A_{k'}^* A_k \int e^{i(k-k')x'}dx' = \delta(k-k') \tag{1.329}$$

考虑到我们已知

$$\delta(k-k') = \frac{1}{2\pi}\int e^{i(k-k')x'}dx' \tag{1.330}$$

所以我们不妨令

$$A_{k'} = A_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{1.331}$$

即我们找到的正交归一完备的本征函数系为

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}\right\} \tag{1.332}$$

然而至此有一个十分有意义的事情值得讨论: k 的取值范围是什么?

从纯粹数学的角度来看, 由于我们所考虑的线性空间是在数域 $\mathbb{C}$ 上的, 所以对应的本征方程的本征值自然就限制在 $\mathbb{C}$ 上, 从证明的过程也可以看出对于任意的 $k \in \mathbb{C}$, 其都是 K 的本征值.

然而物理人却不这样认为, 因为物理人所处理的数学都是建立在物理图景上的, 如果我们考虑的 k 是一个复数, 那么 e^{ikx} 的模在全空间将会是无界的! 而物理图景告诉我们这样就 blow up 了! 这样是不可行的! 所以物理人认为本征值的取值范围应该是 $\mathbb{R}$, 容易发现 $\mathbb{R}$ 中的每一个实数都是 K 的本征值.

从此例可以看出我们所考虑的 Hilbert 空间并不是数学意义上真正的 Hilbert 空间, 这体现在

- 本征函数 $e^{ikx}/\sqrt{2\pi}$ 根本不可以归一 (只可以归为 δ 函数).
- 我们所求出来的本征值只筛选了其中有物理意义的那一部分.

所以物理人自居自己所处在的 Hilbert 空间为 Physical Hilbert Space.

我们之前提到过 $|f\rangle$ 在 X basis ($\{|x\rangle\}$) 下的 components 是 $f(x) = \langle x|f\rangle$. 现在我们来研究 $|f\rangle$ 在 K basis ($\{|k\rangle\}$) 下的 components 是什么:

直接计算有:

$$f(k) = \langle k|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k|x\rangle\langle x|f\rangle dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} f(x)dx \tag{1.333}$$

这就是 Fourier 正变换. 为了导出 Fourier 逆变换, 类似的有:

$$f(x) = \langle x|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|k\rangle\langle k|f\rangle dk = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} f(k)dk \tag{1.334}$$

我们再来研究 K 在 K basis 下的表示, 具体而言有

$$\langle k'| K |k\rangle = \langle k'| k |k\rangle = k\delta(k-k') \tag{1.335}$$

我们之前一直在使用的 $|x\rangle$ 我们自始至终都没有说过它的由来. 现在我直接给出: $|x\rangle$ 是算符 X 对应于本征值 x 的本质函数, 即成立

$$X|x\rangle = x|x\rangle \tag{1.336}$$

算符 X 在 X Basis 下的表示为:

$$\langle x'| X |x\rangle = \langle x'| x |x\rangle = x\delta(x-x') \tag{1.337}$$

现在我们来研究算符 X 对于 $|f\rangle$ 的作用是什么. 即我们想研究

$$X|f\rangle = |g\rangle \tag{1.338}$$

中的 g 是什么. 我们上式左作用一个 $\langle x|$, 然后插入一个完备性方程可以得到:

$$\int \langle x| X |x'\rangle \langle x'|f\rangle dx' = \langle x|g\rangle \tag{1.339}$$

从而有:

$$\int x\delta(x-x')f(x')dx' = g(x) \tag{1.340}$$

故

$$g(x) = xf(x) \tag{1.341}$$

从而可以发现的是算符 X 的作用效果在 X Basis 下就是简简单单乘一个 x 上去.

我们现在来将算符 X 表示在 K Basis 中, 具体而言有

$$\begin{aligned}
\langle k'| X |k\rangle =& \int dx \int dx' \langle k'|x'\rangle \langle x'| X |x\rangle \langle x|k\rangle \\
=&\frac{1}{2\pi} \int dx \int dx' e^{-ik'x'} x\delta(x-x')e^{ikx} \\
=&\frac{1}{2\pi} \int e^{-ik'x} x e^{ikx} dx \\
=&-i\frac{d}{dk}\left\{\frac{1}{2\pi}\int e^{i(k-k')x}dx\right\} \\
=&-i\frac{d}{dk}\delta(k-k') \\
=&-i\delta'(k-k')
\end{aligned} \tag{1.342}$$

从而立马知道 $\langle k| X |k'\rangle = i\delta'(k-k')$

如果 $|g\rangle$ 在 K Basis 下的表示是 $g(k)$, 那么可以发现

$$\langle k| X |g\rangle = \int \langle k| X |k'\rangle \langle k'|g\rangle dk' = \int -i\delta'(k'-k)g(k')dk' = \int i\delta'(k-k')g(k')dk' = i\frac{dg(k)}{dk} \tag{1.343}$$

从而可知

$$X|g(k)\rangle = \left| i\frac{dg(k)}{dk} \right\rangle \tag{1.344}$$

至此我们能总结一下为下述定理:

定理 1.2.10

在 X Basis 中

$$X \Longleftrightarrow x, \quad K \Longleftrightarrow -i\frac{d}{dx} \tag{1.345}$$

在 K Basis 中

$$X \Longleftrightarrow i\frac{d}{dk}, \quad K \Longleftrightarrow k \tag{1.346}$$

我们现在来研究算符 $[X, K]$, 不妨在 X Basis 中进行研究, 有

$$XK|f\rangle = \left| -ix\frac{df}{dx} \right\rangle \tag{1.347}$$

$$KX|f\rangle = \left| -i\frac{d(xf)}{dx} \right\rangle \tag{1.348}$$

所以有

$$[X,K]|f\rangle = \left| -ix\frac{df}{dx} \right\rangle - \left| -i\frac{d(xf)}{dx} \right\rangle = \left| -ix\frac{df}{dx} + i\frac{d(xf)}{dx} \right\rangle = i|f\rangle \tag{1.349}$$

从而可知

$$[X, K] = iI \tag{1.350}$$

Chapter 2

Classical Mechanics

此部分参考了 Shankar 的第二章和 Arnold 的部分 (部分数学上的定义) 还有 Goldstein(矩阵形式的 Classical Mechanics).

§ 2.1 拉格朗日体系

2.1.1 变分原理

泛函指的是以函数构成的向量空间为定义域, $\mathbb{R}$ 为值域的一类特殊的函数, 其往往被称为函数的函数.

定义 2.1.1

一个泛函 Φ 如果有 $\Phi(\gamma+h)-\Phi(\gamma)=F+R$, 其中 F 线性依赖于 h[a], 而 $R(h,\gamma)=O(h^2)$, 即当

$$|h|<\varepsilon, \quad \left|\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t}\right|<\varepsilon \tag{2.1}$$

时, 有

$$|R|<C\varepsilon^2 \tag{2.2}$$

我们称 Φ 是可微的, 增量的线性部分 $F(h)$ 称为其微分.

[a] 即对固定的 γ, $F(h_1+h_2)=F(h_1)+F(h_2)$, 且 $F(ch)=cF(h)$

可以证明, 若 Φ 是可微的, 则其微分是唯一的. 泛函的微分又称为其变分, h 则称为曲线的变分.

定理 2.1.1

泛函 $\Phi(\gamma)=\int_{t_0}^{t_1} L(x,\dot{x},t)\mathrm{d}t$ 是可微的, 其微分是

$$F(h)=\int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right]h dt+\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}h\right)\Bigg|_{t_0}^{t_1} \tag{2.3}$$

证明.

$$
\begin{aligned}
\Phi(\gamma+h)-\Phi(\gamma) &= \int_{t_0}^{t_1}[L(x+h,\dot{x}+\dot{h},t)-L(x,\dot{x},t)]dt \\
&= \int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{\partial L}{\partial x}h+\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{h}\right]dt+O\left(h^2\right)=F(h)+R,
\end{aligned}
\tag{2.4}
$$

这里

$$
F(h)=\int_{t_0}^{t_1}\left(\frac{\partial L}{\partial x}h+\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{h}\right)dt, R=O\left(h^2\right) \tag{2.5}
$$

分布积分得到

$$
\int_{t_0}^{t_1}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{h}dt=-\int_{t_0}^{t_1}h\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)dt+h\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\bigg|_{t_0}^{t_1} \tag{2.6}
$$

回代入 $F(h)$ 即得到了

$$
F(h)=\int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right]hdt+\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}h\right)\bigg|_{t_0}^{t_1} \tag{2.7}
$$

□

2.1.2 驻定曲线

定义 2.1.2

可微泛函 $\Phi(\gamma)$ 的驻定曲线 γ 即使得对一切 h 均有 $F(h,\gamma)=0$ 的曲线.

为了方便叙述, 此处给出一个引理, 其证明只需要考虑连续函数的性质故不多赘述.

引理 2.1.1

若连续函数 $f(t), t_0 \leqslant t \leqslant t_1$ 对一切适合 $h\left(t_0\right)=h\left(t_1\right)=0$ 的连续函数 $h(t)$ 均有 $\int_{t_0}^{t_1} f(t)h(t)dt=0$, 则 $f(t)\equiv 0$.

定理 2.1.2

曲线 $\gamma: x=x(t)$ 是泛函 $\Phi(\gamma)=\int_{t_0}^{t_1} L(x,\dot{x},t)dt$ 在过 $x\left(t_0\right)=x_0$ 与 $x\left(t_1\right)=x_1$ 两点的曲线之空间的驻定曲线, 当且仅当沿曲线 $x(t)$ 满足 $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0$.

证明. 由于

$$
F(h)=\int_{t_0}^{t_1}\left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}\right]hdt+\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}h\right)\bigg|_{t_0}^{t_1}. \tag{2.8}
$$

又因为 $h\left(t_0\right)=h\left(t_1\right)=0$, 所以后面一项为零. 若 γ 是一驻定曲线, 则对适合 $h\left(t_0\right)=h\left(t_1\right)=0$ 的一切连续可微的 $h, F(h)=0$. 因此对一切如上的 $h(t)$,

$$
\int_{t_0}^{t_1} f(t)h(t)dt=0 \tag{2.9}
$$

此处

$$
f(t)=\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x} \tag{2.10}
$$

故依引理可知 $f(t)\equiv 0$. 反之, 若 $f(t)\equiv 0$. 显然有 $F(h)\equiv 0$. □

2.1.3 欧拉-拉格朗日方程

定义 2.1.3

方程

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial L}{\partial x}=0 \tag{2.11}$$

称为泛函 $\Phi=\int_{t_0}^{t_1}L(x,\dot{x},t)dt$ 的欧拉-拉格朗日方程.

由于我们所考虑的问题肯定不仅仅是一维的问题 (算上时间的话是两维度), 所以需要对之前所得到的结论维数进行推广:

今设 $\boldsymbol{x}$ 是 n 维坐标空间 $\mathbb{R}^n$ 的一矢量, $\gamma=\{(t,\boldsymbol{x});\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}(t),t_0\leqslant t\leqslant t_1\}$ 是 $n+1$ 维空间 $\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n$ 中的一条曲线, $L:\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 是一个 $2n+1$ 个变量的函数. 我们将和前面一样证明

定理 2.1.3

曲线 γ 是泛函 $\Phi(\gamma)=\int_{t_0}^{t_1}L(\boldsymbol{x},\dot{\boldsymbol{x}},t)dt$ 在连结点 $(t_0,\boldsymbol{x}_0)$ 与 $(t_1,\boldsymbol{x}_1)$ 的曲线之空间中的驻定曲线当且仅当 γ 能满足欧拉-拉格朗日方程.

2.1.4 哈密顿作用量原理

我们从最简单的牛顿动力学方程

$$\frac{d}{dt}(m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i)+\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i}=0 \tag{2.12}$$

入手, 将其与欧拉拉格朗日方程

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{x}}}-\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{x}}=0 \tag{2.13}$$

相比较. 可以发现是十分类似的, 从而不妨引入

定理 2.1.4: 哈密顿作用量原理

力学系统

$$\frac{d}{dt}(m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i)+\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i}=0 \tag{2.14}$$

的运动即为以下泛函的驻定曲线

$$\Phi(\gamma)=\int_{t_0}^{t_1}Ldt \tag{2.15}$$

其中 $L=T-U$ 是动能与位能的差, 称之为拉格朗日量.

证明. 因 $U=U(\boldsymbol{r}),T=\Sigma m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i^2/2$, 有

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}=\frac{\partial T}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}=m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i,\quad \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_i}=-\frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{r}_i} \tag{2.16}$$

□

当然既然其能被称之为原理, 那么就是因为其可以被广泛的应用, 事实上这里的 U 不必要仅仅是 $\boldsymbol{r}$ 的函数, 其为 $\dot{\boldsymbol{r}}$ 的函数也是同样成立的, 只不过此时所考虑的就是广义势了, 不管怎么样此处的这个简单的例子只是一个引入, 用于引出哈密顿作用量原理来方便我们之后的讨论, 哈密顿作用量原理的应用范围远不止此处的这个例子。

一般而言拉格朗日函数 L 依赖于 q 以及 $\dot{q}$ 和 t, 其中 q 意指一系列变量 $q_1, q_2, \cdots, q_n$ 称它们为广义坐标, 而 $\dot{q}$ 即为 $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_n$ 为广义坐标对于时间的导数.

§ 2.2 哈密顿体系

哈密顿体系的不少东西都是从拉格朗日体系中所定义出来的, 就比如我们需要定义广义动量:

$$p_i := \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \tag{2.17}$$

哈密顿体系说简单点就是把作用量

$$S = \int_{init}^{fina} L dt \tag{2.18}$$

中 L 对于 $q, \dot{q}, t$ 的依赖变换为, q, p, t 的依赖. 可以证明的是只要我做了这样子替换, 那么变分极值就可以推导出正则方程 (参见 Goldstein).

2.2.1 Legendre 变换

此部分在 Arnold 上有较为数学的阐述, 我在此使用的是 Shankar 的表述:

如果存在一个函数 $f(x)$, 同时记其导数为

$$u(x) = \frac{df}{dx} \tag{2.19}$$

我们令 $x(u)$ 为 $u(x)$ 的反函数, 那么现在定义如下的函数:

$$g(u) = x(u)u - f(x(u)) \tag{2.20}$$

那么有:

$$\frac{dg}{du} = \frac{dx}{du}u + x - u\frac{dx}{du} = x \tag{2.21}$$

从而考虑到一阶微分的形式不变性, 就有了:

$$dg = x(u)du \tag{2.22}$$

从而我们可以直接认为 g 实际上就是一个 u 的函数. 这样的从 $f(x)$ 到 $g(u)$ 的变换就称为 Legendre 变换.

2.2.2 哈密顿量

首先需要声明的是: 我们所考虑的体系往往都是不含时间的, 因为如果含时间的话理论的构建会麻烦许多!!!!! 可以参看 Goldstein 中的含时正则变换的部分, 很麻烦, 而且有些地方的

证明挺直觉主义的. 但不管怎么样在量子力学中我们常常研究的也正是不含时的体系, 这很好, 所以我们定义如下的哈密顿量:

$$\mathscr{H}(q,p) = p_i\dot{q}_i - \mathscr{L}(q,\dot{q}) \tag{2.23}$$

通过简单的计算发现:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial p_i} =& \frac{\partial}{\partial p_i}\left(p_j\dot{q}_j - \mathscr{L}(q,\dot{q})\right)\\ =&\dot{q}_i + p_j\frac{\partial\dot{q}_j}{\partial p_i} - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{q}_j}\frac{\partial\dot{q}_j}{\partial p_i}\\ =&\dot{q}_i\end{aligned} \tag{2.24}$$

类似的有:

$$\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial q_i} = p_j\frac{\partial\dot{q}_j}{\partial q_i} - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial q_i} - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{q}_j}\frac{\partial\dot{q}_j}{\partial q_i} = -\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \tag{2.25}$$

从而综上我们就得到了哈密顿正则方程:

$$\begin{aligned}\dot{q}_i =& \frac{\partial\mathscr{H}}{\partial p_i}\\ \dot{p}_i =& -\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial q_i}\end{aligned} \tag{2.26}$$

但是我更喜欢把上述方程表示为矩阵形式, 首先我们定义

$$\boldsymbol{J} = \begin{bmatrix}\mathbf{0} & \boldsymbol{I}\\ -\boldsymbol{I} & \mathbf{0}\end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\eta} = \begin{bmatrix}q_1\\ q_2\\ \vdots\\ q_n\\ p_1\\ p_2\\ \vdots\\ p_n\end{bmatrix} \tag{2.27}$$

那么哈密顿正则方程可以写为:

$$\frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial t} = \boldsymbol{J}\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\boldsymbol{\eta}} \tag{2.28}$$

当然这里还需要明确下符号体系:

- 对于 $\boldsymbol{\eta}$, 我们认为其是一个列向量;
- 对于 $\dfrac{\partial\mathscr{H}}{\partial\boldsymbol{\eta}}$, 我们认为其是一个列向量, 行指标对应的就是 $\boldsymbol{\eta}$ 的行指标;
- 对于 $\dfrac{\partial\boldsymbol{\eta}'}{\partial\boldsymbol{\eta}}$, 我们认为其是一个矩阵, 行指标对应 $\boldsymbol{\eta}'$ 的行指标, 列指标对应 $\boldsymbol{\eta}$ 的行指标.

这样的符号语言虽然直接看上去会比较奇怪毕竟 $\dfrac{\partial\omega}{\partial\boldsymbol{\eta}}$ 的时候 $\boldsymbol{\eta}$ 表示行指标, 但是在 $\dfrac{\partial\boldsymbol{\eta}'}{\partial\boldsymbol{\eta}}$ 之中 $\boldsymbol{\eta}$ 却表示的是列指标. 但这没关系, 在后续的理论构建过程中我们会逐步发现这样的符号语言的好处. 我们举个 (比较偏数学) 例子, 即我们来表述一下隐函数定理:

定理 2.2.1: 隐函数定理

设 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ 以及 $D \subseteq \mathbb{R}^m$ 为区域 (联通的非空开集), $\boldsymbol{F}: \Omega \times D \to \mathbb{R}^m$ 是连续可微函数, 满足 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\eta}_0, \boldsymbol{\xi}_0) = \mathbf{0}$, 且 $\det \dfrac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\eta}_0, \boldsymbol{\xi}_0) \neq 0$, 其中 $\boldsymbol{\eta}_0 \in \Omega, \boldsymbol{\xi}_0 \in D$. 则存在 $\delta > 0$ 以及 $\zeta > 0$, 使得对于任何 $\boldsymbol{\eta} \in B_\delta(\boldsymbol{\eta}_0)$, 存在唯一的 $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta}) \in B_\eta(\boldsymbol{\xi}_0)$ 使得 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta})) = \mathbf{0}$. 进一步, $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{\eta})$ 在 $B_\delta(\boldsymbol{\eta}_0)$ 内连续可微, 且

$$\frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial \boldsymbol{\eta}} = -\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{\xi}}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \boldsymbol{\eta}}, \quad \forall \boldsymbol{\eta} \in B_\delta(\boldsymbol{\eta}_0) \tag{2.29}$$

2.2.3 循环坐标

其实严格来说循环坐标这个东西没有什么非常多的东西需要说明, 其只是一个直接的计算结论而已. 而且循环坐标只是 Noether 原理的一个体现而已, 我们来证明一下 Noether 原理, 等待补充 (参考 Arnold, 这部分我之前写过, 但是有段时间没使用就有些遗忘, 之后再补全下)

2.2.4 泊松括号

我们现在来考虑一个力学量: $\omega(p, q)$ 注意其 explicit independent of t, 从而有:

$$\frac{d\omega}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt} + \frac{\partial \omega}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial p_i} = \frac{\partial \omega}{\partial q_i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial \omega}{\partial p_i}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_i} = \{\omega, \mathscr{H}\} \tag{2.30}$$

通过矩阵语言泊松括号可以简单写为:

- 对于两个标量的 Poisson Brackets:

$$\{\omega, \lambda\} = \frac{\partial \omega}{\partial \boldsymbol{\eta}}^T \boldsymbol{J} \frac{\partial \lambda}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{2.31}$$

- 对于两个矢量的 Poisson Brackets:

$$\{\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}\} = \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{J} \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial \boldsymbol{\eta}}^T \tag{2.32}$$

  注意对于 $\{\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}\}$ 我们认为 $\boldsymbol{A}$ 对应的是行指标, $\boldsymbol{B}$ 对应的是列指标.

- 左边是矢量, 右边是标量:

$$\{\boldsymbol{A}, \lambda\} = \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{\eta}} \boldsymbol{J} \frac{\partial \lambda}{\partial \boldsymbol{\eta}} \tag{2.33}$$

- 左边是标量, 右边是矢量:

$$\{\omega, \boldsymbol{B}\} = \frac{\partial \omega}{\partial \boldsymbol{\eta}}^T \boldsymbol{J} \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial \boldsymbol{\eta}}^T \tag{2.34}$$

从而运用 Poisson 括号容易发现哈密顿正则方程还能写为:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \{\boldsymbol{\eta}, \mathscr{H}\} \tag{2.35}$$

2.2.5 Canonical Transformation

众所周知 Canonical Transformation 有两种引入的方式, 第一种就是生成函数, 第二种就是辛条件的观点, 两者是等价的 (Goldstein), 由于辛条件的引入比较好看, 所以我们就考虑用辛条件来引入.

我们考虑广义坐标的变换:

$$\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q}'(\boldsymbol{q}) \tag{2.36}$$

容易发现对应的广义速度的变换为

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}'}{\partial t} = \frac{\partial \boldsymbol{q}'}{\partial \boldsymbol{q}} \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} \tag{2.37}$$

广义动量的变换为:(注意此时我们是以 Passive 的观点来看待变换的, 从而在数值上有 $\mathscr{L}(q,p) = \mathscr{L}(q',p')$, 这里的等式左侧右侧的 $\mathscr{L}$ 实际上对于 (q,p) 和 (q',p') 是不同的函数依赖关系的, 但是为简洁起见, 我们仍记为同一个函数)

$$\boldsymbol{p}' = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'}^T \boldsymbol{p} \tag{2.38}$$

上式不是显然的, 我们分一下三步骤说明:

- 首先我们对于 $\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q}'(\boldsymbol{q})$ 写出其逆映射 $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}(\boldsymbol{q}')$, 从而有:

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'} \frac{\partial \boldsymbol{q}'}{\partial t} \tag{2.39}$$

即

$$\dot{\boldsymbol{q}} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'} \dot{\boldsymbol{q}}' \tag{2.40}$$

- 两端同时作用一个 $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}'}$, 注意在作用的时候我们认为等式的左右侧都是 $\boldsymbol{q}', \dot{\boldsymbol{q}}'$ 的函数, 得到:

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{q}}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}'} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'} \frac{\partial \dot{\boldsymbol{q}}'}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}'} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'} \boldsymbol{I} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'} \tag{2.41}$$

- 计算

$$\boldsymbol{p}' = \frac{\partial \mathscr{L}(\boldsymbol{q}', \dot{\boldsymbol{q}}')}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}'} = \frac{\partial \mathscr{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}})}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}'} = \frac{\partial \dot{\boldsymbol{q}}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}'}^T \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'}^T \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}} = \frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial \boldsymbol{q}'}^T \boldsymbol{p} \tag{2.42}$$

现在有一个值得考虑的事情是: *$\boldsymbol{q}'$ 和 $\boldsymbol{p}'$ 满不满足哈密顿正则方程?*

答案是肯定的, 有两个角度给出证明:

第一个角度是: 当我们在变换 $\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{q}', \dot{\boldsymbol{q}} \to \dot{\boldsymbol{q}}'$ 来使得 $\mathscr{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) \to \mathscr{L}(\boldsymbol{q}', \dot{\boldsymbol{q}}')$ 的时候, 我们干的事情实际上只是用不同的变量来表述同一个东西 $\mathscr{L} = T - V$, 注意无论是 T 还是 V 都是一个客观实在, 也就是说其大小是不依赖于我们变量的选择的. 所以自然的, 不管是什么变量来描述 $\mathscr{L}$, 最后其都应该满足欧拉拉格朗日方程, 而我们考虑到欧拉拉格朗日方程实际上适合哈密顿正则方程等价的, 从而我们最后得到的 $\boldsymbol{q}', \boldsymbol{p}'$, 一定满足哈密顿正则方程.

第二个角度是: 直接进行暴力计算, 当然具体的计算方法这里还没给出, 其需要考虑的是正则变换的辛条件, 我们留到之后再作说明.

当然我们从第一个角度的表述之中可以发现, $\boldsymbol{q}',\boldsymbol{p}'$ 所需要满足的哈密顿正则方程中的哈密顿量 $\mathscr{H}(\boldsymbol{q}',\boldsymbol{p}')$, 实际上是和变换前在数值上相同 (都等于 $T+V$), 即我们有 $\mathscr{H}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) = \mathscr{H}(\boldsymbol{q}',\boldsymbol{p}')$ (正如前面提及过的, 这里左右两式中的 $\mathscr{H}$ 对于变量的依赖关系可能不同). 正是由于上述这类变换的性质 (变换前, 变换后都满足哈密顿正则方程, 变换后的 $\boldsymbol{q}'$ 仅是 $\boldsymbol{q}$ 的函数, 同时变换后的 $\boldsymbol{p}'$ 仅是 $\boldsymbol{p}$ 的函数), 我们把上述的这种变换称为 point transformation.

然而上述讨论的变换实际上是由局限性的, 毕竟在哈密顿力学系统之中我们视 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 是在同等地位的, 自然所考虑的变换可以是

$$\boldsymbol{q}' = \boldsymbol{q}'(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \tag{2.43}$$

$$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p}'(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}) \tag{2.44}$$

的形式, 我们可以合并在一起写为

$$\boldsymbol{\eta}' = \boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta}) \tag{2.45}$$

然而不像 point transformation, 所有的 point transformation 总能使得变换后的 $\boldsymbol{q}',\boldsymbol{p}'$ 满足哈密顿正则方程, 不是所有的 $\boldsymbol{\eta}' = \boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})$ 使得变换后的变量 $\boldsymbol{\eta}'$ 还满足正则方程, 我们称那些使得变换后的变量 $\boldsymbol{\eta}'$ 满足哈密顿正则方程的那些变换为正则变换, 而满足哈密顿正则方程的变量就称之为正则变量. 通过之前 point transformation 的例子, 实际上可以看出的是对于任意一组广义坐标 $\boldsymbol{q}$, 以及通过 $\dfrac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}}$ 所得到的广义动量 $\boldsymbol{p}$ 都是一组正则变量.

首先我们所考虑的变换的视角是 Passive 的, 所以这表明的是对于任意变换 $\boldsymbol{\eta}' = \boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})$, 在变换前和变换后的哈密顿量都应该在数值上相同, 也就是说

$$\mathscr{H}(\boldsymbol{\eta}') = \mathscr{H}(\boldsymbol{\eta}) \tag{2.46}$$

注意上式左右两边的 $\mathscr{H}$ 分别对于变量 $\boldsymbol{\eta}$ 和 $\boldsymbol{\eta}'$ 的函数依赖关系是不同的, 但是它们的数值相同 (这一点我们已经强调许多次了). 从而如果变换后的变量 $\boldsymbol{\eta}'$ 需要满足哈密顿正则方程的话, 那么这等价于说成立

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}' = \{\boldsymbol{\eta}', \mathscr{H}(\boldsymbol{\eta}')\}_{\boldsymbol{\eta}'} = \frac{\partial \boldsymbol{\eta}'}{\partial \boldsymbol{\eta}'}\boldsymbol{J}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \boldsymbol{\eta}'} = \boldsymbol{J}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \boldsymbol{\eta}'} \tag{2.47}$$

然而如果我们视 $\boldsymbol{\eta}'$ 为一个 $\boldsymbol{\eta}$ 的函数的话, 即考虑 $\boldsymbol{\eta}' = \boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})$ 的话, 那么有:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}' = \{\boldsymbol{\eta}', \mathscr{H}(\boldsymbol{\eta})\}_{\boldsymbol{\eta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\eta}'}{\partial \boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \frac{\partial \boldsymbol{\eta}'}{\partial \boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}\frac{\partial \boldsymbol{\eta}'}{\partial \boldsymbol{\eta}}^T\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \boldsymbol{\eta}'} \tag{2.48}$$

这里我们还有一点需要补充, 那就是: *纵使给定了 $\boldsymbol{\eta}$ 是什么, 体系所对应的 $\mathscr{H}$ 还是不确定的, 然而体系是什么样子不应该影响一组变量是不是正则的, 从而我们希望的是正则变量总是对于任何的 $\mathscr{H}$ 都是满足正则方程的.* 以此视角来看我们就可以得到变换 $\boldsymbol{\eta}' = \boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})$ 是正则变换的充要条件:

$$\frac{\partial \boldsymbol{\eta}'}{\partial \boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}\frac{\partial \boldsymbol{\eta}'}{\partial \boldsymbol{\eta}}^T = \boldsymbol{J} \Longleftrightarrow \{\boldsymbol{\eta}', \boldsymbol{\eta}'\}_{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{J} \tag{2.49}$$

这就是正则变换的辛 (symplectic) 条件.

一个正则变量间的性质是: 任何正则变量的泊松括号相同, 即:

$$\{\omega, \sigma\}_{\boldsymbol{\eta}} = \{\omega, \sigma\}_{\boldsymbol{\eta}'} \tag{2.50}$$

证明.

$$\{\omega,\sigma\}_{\boldsymbol{\eta}'}=\frac{\partial\omega}{\partial\boldsymbol{\eta}'}^T\boldsymbol{J}\frac{\partial\sigma}{\partial\boldsymbol{\eta}'}=\frac{\partial\omega}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T\frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial\boldsymbol{\eta}'}\boldsymbol{J}\frac{\partial\boldsymbol{\eta}}{\partial\boldsymbol{\eta}'}^T\frac{\partial\sigma}{\partial\boldsymbol{\eta}}=\frac{\partial\omega}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T\boldsymbol{J}\frac{\partial\sigma}{\partial\boldsymbol{\eta}}=\{\omega,\sigma\}_{\boldsymbol{\eta}} \tag{2.51}$$

□

2.2.6 Active Transformation

我们之前所讨论的变换 $\boldsymbol{\eta}'=\boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})$ 都是基于 Passive 视角来研究的, 也就是说: 物理量的值没变, 变得只是我的表示方法, 这就类似于对于线性空间中的一个矢量, 矢量本身不转动, 但是我旋转坐标系, 从而给出矢量的另一种表示.

现在我们来研究的是 Active 的观点, 这种观点所阐述的是物理量的值变了, 但是物理量的函数依赖关系没有变, 同时这种观点类似于矢量本身在转动, 但是坐标系没有发生变化.

纵使如此, 不是所有的变换我们都以 Active 的观点来看的, 具体而言我们以 Active 视角来看的变换往往是 *regular transformation*, 这种从 $\boldsymbol{\eta}\to\boldsymbol{\eta}'$ 的变换, 需要保证始末变量的定义域相同, 举个例子 $(x,y,z)\to(r,\theta,\varphi)$ 就不是一个 regular transformation.

从而我们可以给出物理量, 在某种变换 $\boldsymbol{\eta}'=\boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})$ 下不变的定义, 其指的就是

$$\omega(\boldsymbol{\eta})=\omega(\boldsymbol{\eta}') \tag{2.52}$$

注意这里上式左右两端的 ω 是同一个函数! 所以 $\omega(\boldsymbol{\eta})$ 和 $\omega(\boldsymbol{\eta}')$ 是有可能不同的.

补充一点的是: 不管我们视变换是 Passive 的还是 Active 的, 只要其满足辛条件, 我们就称之为正则变换.

还要补充的就是: 物理中我们感兴趣的变换往往是 regular 的正则变换.

2.2.7 Symmetries and Their Consequences

本节我们主要证明两个定理, 第一个定理是:

定理 2.2.2

If $\mathscr{H}$ is invariant under the following I.C.T

$$q_i\to q_i'=q_i+\epsilon\frac{\partial g}{\partial p_i}\equiv q_i+\delta q_i \tag{2.53}$$

$$p_i\to p_i'=p_i-\epsilon\frac{\partial g}{\partial q_i}\equiv p_i+\delta p_i \tag{2.54}$$

where $g(\boldsymbol{\eta})$ is any dynamical variable, then g is conserved.

既然这个定理中出现了 I.C.T, 那么我们来讲下什么是 I.C.T: I.C.T 全称 infinitesimal canoncial transformation 就是形如上定理中的变换. 值得注意的是 I.C.T 是个十分重要的概念, 首先这体现在 *I.C.T* 实际上同时正则变换的两者表述, 即生成元的表述, 和辛条件的表述. 我们动力学量 $g(\boldsymbol{\eta})$ 就是上述正则变换的生成元, 因为这个变换本身就是这个动力学量所诱导出来的, 这

体现的就是生成元视角下的正则变换, 当然我们还可以从辛条件的角度来验证上述的 I.C.T 诚然是 canonical 的, 通过矩阵的形式表示上述的变换如下:

$$\delta\boldsymbol{\eta}=\epsilon\boldsymbol{J}\frac{\partial g}{\partial\boldsymbol{\eta}}=\epsilon\{\boldsymbol{\eta},g\} \tag{2.55}$$

所以可以知道

$$\begin{aligned}\frac{\partial\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta}}{\partial\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}\frac{\partial\boldsymbol{\eta}+\delta\boldsymbol{\eta}}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T&=\left(\boldsymbol{I}+\epsilon\boldsymbol{J}\frac{\partial^2 g}{\partial\boldsymbol{\eta}\partial\boldsymbol{\eta}}\right)\boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{I}+\epsilon\boldsymbol{J}\frac{\partial^2 g}{\partial\boldsymbol{\eta}\partial\boldsymbol{\eta}}\right)^T\\&=\left(\boldsymbol{I}+\epsilon\boldsymbol{J}\frac{\partial^2 g}{\partial\boldsymbol{\eta}\partial\boldsymbol{\eta}}\right)\boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{I}-\epsilon\frac{\partial^2 g}{\partial\boldsymbol{\eta}\partial\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}\right)\\&=\boldsymbol{J}+\epsilon\boldsymbol{J}\frac{\partial^2 g}{\partial\boldsymbol{\eta}\partial\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}-\epsilon\boldsymbol{J}\frac{\partial^2 g}{\partial\boldsymbol{\eta}\partial\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}+O(\epsilon^2)\\&\overset{\mathscr{A}}{=}\boldsymbol{J}\end{aligned} \tag{2.56}$$

注意: $\mathscr{A}$ 处舍弃了高阶小量. 从而诚然 I.C.T 是正则变换.

一个有趣的事情是以此视角我们能非常非常非常简单的证明 Liouville 定理:

定理 2.2.3: Liouville Theorem

The phase flow preserves volume: for any region D we have

$$\text{volume of } g^t D=\text{volume of } D$$

<u>**证明.**</u> 我们考虑令生成元为 $g=\mathscr{H}$, 同时无穷小参量为 $\epsilon=dt$ 的 I.C.T, 有

$$\delta\boldsymbol{\eta}=dt\{\boldsymbol{\eta},\mathscr{H}\}=d\boldsymbol{\eta} \tag{2.57}$$

从而这样子的 I.C.T 反应的就是相流, 同时考虑到辛条件:

$$\frac{\partial\boldsymbol{\eta}'}{\partial\boldsymbol{\eta}}\boldsymbol{J}\frac{\partial\boldsymbol{\eta}'}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T=\boldsymbol{J} \tag{2.58}$$

者表明变换的 Jacobi 矩阵是一个辛矩阵, 结合代数知识可以知道辛矩阵的行列式为 1, 即其蕴含了保体积. □

额外的还可以快速的来证明下著名的庞加莱回归定理:

定理 2.2.4: Poincaré's Resurrence Theorem

Let g be a volume-preserving continuous one-to-one mapping which maps a bounded region D of euclidean space onto itself: $gD\subset D$.
Then in any neighborhood U of any point of D there is a point $x\in U$ which returns to U, i.e., $g^n x\in U$ for some $n>0$.

<u>**证明.**</u> 考虑任意一个 $\{g^t\}$ 中的非零元素 g^{t_0} 简记其为 g, 那么考虑下面一列区域

$$U,gU,g^2U,g^3U,\cdots \tag{2.59}$$

易知这一列区域中一定存在两个区域相交, 不妨令它们为 g^nU 与 g^mU (其中 $n>m$), 从而有 $g^nU\cap g^mU\neq\varnothing$ 考虑到 $\{g^t\}$ 作为一个群其中每一个元素都是可逆的, 从而可知 $g^{n-m}U\cap U\neq\varnothing$. □

还有一个值得注意的是, 通过 I.C.T 的定义就可以知道 I.C.T 实际上是 regular 的变换.

我们现在来证明本小节的第一个定理

证明. 由于 $\mathscr{H}$ 在变换下不变, 从而可知 (注意这里的 $\delta\mathscr{H}$ 是在 Active 观点下来计算的!)

$$\delta\mathscr{H} = \frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T\delta\boldsymbol{\eta} = \frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T\epsilon\{\boldsymbol{\eta}, g\} = \epsilon\{\mathscr{H}, g\} = 0 \tag{2.60}$$

从而可知

$$\{g, \mathscr{H}\} = 0 \Longrightarrow g \text{ is conserved} \tag{2.61}$$

注意这里利用了 g 是 explicit independent of t. □

上述证明中的

$$\delta\mathscr{H} = \frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T\delta\boldsymbol{\eta} = \frac{\partial\mathscr{H}}{\partial\boldsymbol{\eta}}^T\epsilon\{\boldsymbol{\eta}, g\} = \epsilon\{\mathscr{H}, g\} = 0 \tag{2.62}$$

实际上可以推广为

$$\delta\omega = \epsilon\{\omega, g\} \tag{2.63}$$

从而这也直接能印证

$$\delta\boldsymbol{\eta} = \epsilon\{\boldsymbol{\eta}, g\} \tag{2.64}$$

至此我们阐述一个研究 I.C.T 的好处, 那就是通过 "积分" 可以把 I.C.T 拼接为一般的 Canonical Transformation, 这一用法在证明一般的含时间的 Canonical Transformation 的适合可以用到 (Goldstein).

接下来我们来证明下一个定理:

定理 2.2.5

If $\mathscr{H}$ is invariant under the regular, canonical, but not necessarily infinitesimal, transformation $\boldsymbol{\eta} \to \boldsymbol{\eta}'$, and if $\boldsymbol{\eta}(t)$ is a solution to the equations of motion, so is the transformed trajectory, $\boldsymbol{\eta}'(t)$.

证明. 由于这里存在正则变换, 我们记变化前的哈密顿量为 $\mathscr{H}^{init}$, 变换后的哈密顿量为 $\mathscr{H}^{fina}$. 所以问题等价于证明:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}' = \{\boldsymbol{\eta}', \mathscr{H}^{init}(\boldsymbol{\eta}')\}_{\eta} \tag{2.65}$$

同时如果我们视 $\boldsymbol{\eta}'$ 作为一个 $\boldsymbol{\eta}$ 的动力学导出量, 有:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}' = \{\boldsymbol{\eta}', \mathscr{H}^{init}(\boldsymbol{\eta})\}_{\eta} \tag{2.66}$$

考虑到题目条件有:

$$\mathscr{H}^{init}(\boldsymbol{\eta}) = \mathscr{H}^{init}(\boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta})) \tag{2.67}$$

从而有

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}' = \{\boldsymbol{\eta}', \mathscr{H}^{init}(\boldsymbol{\eta}'(\boldsymbol{\eta}))\}_{\eta} \tag{2.68}$$

考虑到 Possion 括号的正则不变性有

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}' = \{\boldsymbol{\eta}', \mathscr{H}^{init}(\boldsymbol{\eta}')\}_{\boldsymbol{\eta}'} \tag{2.69}$$

再运用 Possion 括号的正则不变性即证. □

Chapter 3

Scattering Theory

§ 3.1 散射理论的引入

3.1.1 散射实验

散射所考虑的装置为

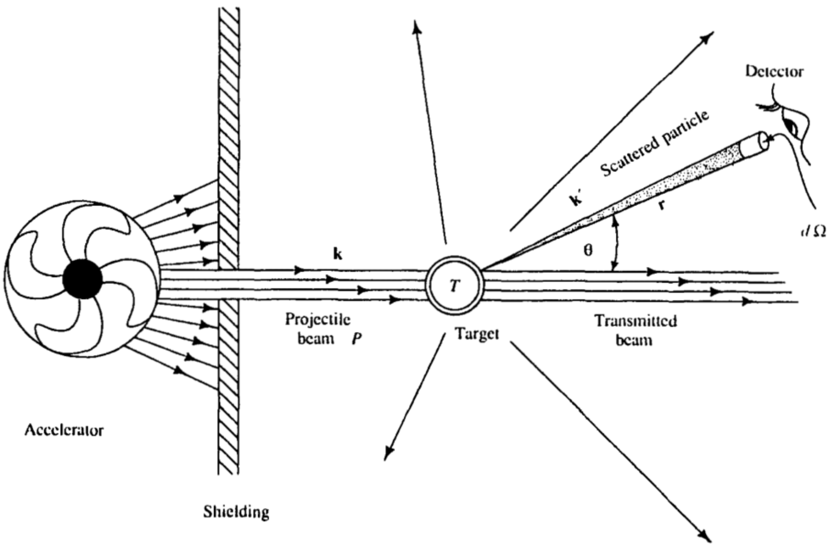

图 3.1

其主要作用之一就是可以通过散射截面的测量来得到 projectile 和 target 之间的作用力, 考虑到这两者的作用力往往是 bounded 的, 即力的作用范围是束缚在 target 的邻域的, 然而散射截面的测量是一个非 bounded 的过程, 从而散射实验实质上可以看成是一种精巧的放大装置, 其反映出的是

$$\text{很小邻域内的作用力} \Longleftrightarrow \text{便于测量的物理量}$$

定义 3.1.1: 散射

纵使我们考虑上述图像中的散射实验, 我们所研究的散射往往也是相当局限的, 其反应在存在以下要求:

- 不存在 “重排碰撞”, 即不同的相较于 *projectile* 和 *target* 更为基本的粒子在这两者之间重现排布,
- 不存在 “能量的物质化”.

满足上述条件的反应就称之为散射 *(scattering)*, 额外的如果没有能量损失, 则称之为弹性散射 *(elastic scattering)*.
事实上为了便于研究, 在构建理论的同时往往还对散射加以以下条件的约束:

- *projectile* 和 *target* 都没有自旋;
- 不考虑 “粒子的内部结构”, 即不考虑非弹性散射;
- 不考虑 “多重散射”, 这要求靶足够的薄;
- 忽略靶中的各个粒子所产生的散射波之间的干涉, 这要求与 *projectile* 相联系的波包的延展度小于 *target* 之间的平均间距 (即干涉的空间相干性足够差), 在这种假设下探测到的粒子通量为靶内 N 个粒子每一个所引起的粒子通量的直接相加;
- 假设 *projectile* 和 *target* 之间的相互作用势形如 $V(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2})$, 从而仅需要将 *projectile* 的质量认为是
$$\mu = \frac{1}{m_{projectile}} + \frac{1}{m_{target}} \tag{3.1}$$
即可放置到质心系中考虑散射.
- 认为相互作用势是定域 *(bounded)* 的.

3.1.2 散射的有效截面的定义

令质量为 μ 的粒子沿着 Oz 方向入射, 如下图所示

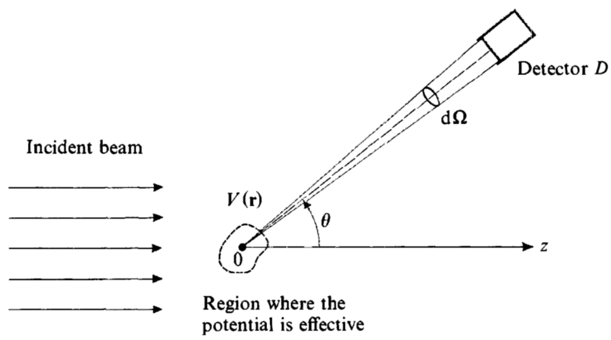

图 3.2

期中坐标原点为 projectile 和 target 的质心, 令 F_i 表示 $z \to -\infty$ 时 projectile 的入射粒子通量, 在以 (θ, φ) 为方位角且 $r \to \infty$ 处的对于原点张角为 $\mathrm{d}\Omega$ 的探测器处可以测量到, 单位时间内通过的粒子数 $\mathrm{d}n$, 容易发现有

$$\mathrm{d}n \propto \mathrm{d}\Omega; \quad \mathrm{d}n \propto F_i \tag{3.2}$$

故

定义 3.1.2: 有效微分散射截面

有效微分散射截面为

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{\mathrm{d}n}{F_i \mathrm{d}\Omega} \tag{3.3}$$

其具有面积量纲. 额外的称

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) \mathrm{d}\Omega \tag{3.4}$$

为总的有效散射截面.

在考虑到类似 “透射” 的现象影响下可以发现

命题 3.1.1

$\sigma(\theta, \varphi)$ 对于 $\theta \to 0$ 的时候是不能直接通过实验测量到的, 此时可通过 “外插法” 求得理论上的有效微分散射截面.

§ 3.2
# 散射定态

3.2.1 哈密顿算符的本征值方程

对于一个粒子的描述, 往往采用的是利用一个波包来描述, 对于波包的处理往往是通过平面波的叠加来构造, 即

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int \mathrm{d}\boldsymbol{k} g(\boldsymbol{k}) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} e^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar} \tag{3.5}$$

然而对于 Scattering Theory 这并不是最方便的, 因为平面波显然不是对应薛定谔方程的解, 所以此处所考虑的关键是利用哈密顿算符的本征函数展开, 不妨记这些本征函数为 $v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r})$, 由于我们所考虑的本征函数个数为 $\aleph$ 所以利用本征函数展开所得到的就是一个积分 (如果本征函数的个数为 $\aleph_0$, 那么得到的就是一个级数求和), 所以散射的波函数可以写为:

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int_0^\infty \mathrm{d}k g(k) v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}) e^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar};\quad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \tag{3.6}$$

注 3.2.1

此处展开中的 k 为标量, 而之前利用波包展开的 $\boldsymbol{k}$ 是矢量, 标量的原因是其归结于本征值 E 的选取, $E=\hbar^2k^2/2\mu$ 之中 k 被理解为一个标量, 换个角度来看在平面波展开之中如果给定波包是确定沿着 z 轴传播的, 那么一个自然的发现就是 $\boldsymbol{k}$ 也是沿着 z 轴的, 从而 $\boldsymbol{k}$ 也就退化为了 k.

现在来研究哈密顿算符的本征值方程, 由于我们所考虑的问题是定态, 所以

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\varphi(\boldsymbol{r})e^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{3.7}$$

其中 $\varphi(\boldsymbol{r})$, 是本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{3.8}$$

的解. 令

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \tag{3.9}$$

即令 E 为 $t\to-\infty$ 的时候 projectile 的能量, 同时令

$$V(\boldsymbol{r})=\frac{\hbar^2}{2\mu}U(\boldsymbol{r}) \tag{3.10}$$

那么可以将方程化简为

$$\left[\nabla^2+k^2-U(\boldsymbol{r})\right]\varphi(\boldsymbol{r})=0 \tag{3.11}$$

接下来的工作就是适当的决定本征函数, 不同于数理方法之中我们往往是通过严格的边界条件诸如: 有限性条件, 单值条件 (周期条件), 渐进条件, 衔接条件可以严格的选取出所需要的本征函数, 对于哈密顿方程的本征方程而言, 选取本征函数的过程往往存在一些更为抽象的定解条件, 例如在粒子沿着 z 正方向经过一个势垒的粒子之中, 一个抽象的定解条件是波函数中不存在从 $z=\infty$ 而来的沿着 z 负方向的波, 在散射理论之中也有相当抽象的定解条件.

定义 3.2.1: 散射定态

满足上述抽象的定解条件的本征函数 (态), 就称为散射的定态, 用符号 $v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r})$ 来表示.

命题 3.2.1

不加以证明的默认散射定态是完备的.

事实上, S-L 理论在很大方面上已经证明了数理方程的解在 $L^2(E)$ 空间中是完备的, 然而 S-L 理论所涉及的边界条件局限于 Dirichlet 条件, Neumann 条件等等, 其不包含上述所说的抽象的定解条件, 然而作为一个物理实在, 不妨认为其诚然是完备的.

3.2.2 散射定态的渐进形式

此部分即研究上述所说的抽象的定解条件, 考虑到当 $t\to-\infty$ 或者 $t\to+\infty$ 的时候有

$$\left[\nabla^2+k^2-U\right]\varphi=0\to\left[\nabla^2+k^2\right]\varphi=0 \tag{3.12}$$

而显然当 $t\to-\infty$ 的时候, 波函数应该趋向于一个自由空间中的波包, 从而其所对应散射定态在 $t\to-\infty$ 的时候, 应该为一个沿着 z 轴正方向传播的平面波, 即散射定态中包含了 $e^{\mathrm{i}kz}$; 同样的当 $t\to+\infty$ 的时候, 波函数应该趋向于一个 "透射" 波包, 和一个散射波包, 而透射波包因为是仍然是沿着 z 轴正方向运动的, 所以散射定态中对应的部分仍然为 $e^{\mathrm{i}kz}$, 而散射波包, 正如 "散射" 二字所蕴涵的意义, 其所对应的自然不是沿着 z 轴传播的波包, 其是沿着 $\hat{r}$ 方传播的, 所以自然的就应该通过 "球面波" 的角度来理解对应的散射波包在散射定态中的贡献, 考虑到描述一个球面波往往利用的是

$$e^{-\mathrm{i}kr}r \tag{3.13}$$

(通过简单的运算可以发现这个解的确为方程 $(\nabla^2+k^2)\varphi=0$ 的解), 从而可以知道

$$v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r})\underset{t\to-\infty}{\to}e^{\mathrm{i}kz};\quad v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r})\underset{t\to\infty}{\to}e^{\mathrm{i}kz}+f_k(\theta,\varphi)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.14}$$

其中 $f_k(\theta,\varphi)$ 项是由于不同方向的散射强度不同故加入的修正项, 称其为散射振幅, 其依赖于 $V(\boldsymbol{r})$. 然而上述的讨论中还存在一些问题, 即我们考虑的 $v_k^{(diff)}$ 实际上是不含 t 的所以此时说 $\lim_{t\to+\infty},\lim_{t\to-\infty}$ 显然显得有些含糊了, 然而请循其本, 不同的 t 强调的实质上是不同的 $\boldsymbol{r}(t)$, 从而有

$$\lim_{t\to-\infty}\iff\lim_{\substack{r\to+\infty\\ \theta\to\pi}};\quad\lim_{t\to+\infty}\iff\lim_{\substack{r\to+\infty\\ \theta\nrightarrow\pi}} \tag{3.15}$$

从而有

命题 3.2.2

散射定态的抽象的定解条件为

$$v_k^{(diff)}\underset{r\to+\infty}{\to}e^{\mathrm{i}kz}+f_k(\theta,\varphi)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.16}$$

3.2.3 一些额外的讨论

定理 3.2.1: 自稳恒相位条件

考虑一个动量为 k_0 波包:

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int_0^\infty \mathrm{d}k g(k,\boldsymbol{r})e^{\mathrm{i}\alpha(k,\boldsymbol{r},t)} \tag{3.17}$$

且 $g(k,\boldsymbol{r})$ 满足

- $g(k,\boldsymbol{r})>0$ 恒成立;
- $g(k,\boldsymbol{r})$ 仅在 $k=k_0$ 附近有值 (指当 $|k-k_0|$ 变大的时候, $g(k,\boldsymbol{r})$ 衰减的很快)

此时可以认为波包振幅极大的位置满足

$$\left.\frac{\partial\alpha(k,\boldsymbol{r},t)}{\partial k}\right|_{k=k_0} \tag{3.18}$$

由此就可以得到波包的群速度 v_G

证明. 这只需要考虑到

$$\left.\frac{\partial\alpha(k,\boldsymbol{r},t)}{\partial k}\right|_{k=k_0} \tag{3.19}$$

表示的相干相长即可. □

总结一下上一节所说, 散射定态可以表示为

$$\psi_{\boldsymbol{r},t}=\int_0^\infty \mathrm{d}k g(k)v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r})e^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar};\quad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \tag{3.20}$$

并且

$$v_k^{(diff)}\underset{r\to+\infty}{\to}e^{\mathrm{i}kz}+f_k(\theta,\varphi)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.21}$$

额外的我们不防令 $g(k)$ 在 $k=k_0$ 处有一个极大的高峰 (这体现的是波函数所代表的粒子的动量确定). 同时将波函数表示为平面波包和散射波包之和

$$\psi_{\boldsymbol{r},t}\underset{r\to+\infty}{\to}\underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}k g(k)e^{\mathrm{i}kz}e^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar}}_{\text{平面波包}}+\underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}k g(k)f(\theta,\varphi)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r}e^{-\mathrm{i}E_k t/\hbar}}_{\text{散射波包}} \tag{3.22}$$

利用自稳恒相位条件可以得到对于平面波有

$$\boldsymbol{v}_{G\text{平面}}=\frac{\hbar k_0}{\mu}\hat{\boldsymbol{z}} \tag{3.23}$$

对于散射波有

$$\boldsymbol{v}_{G\text{散射}}=\frac{\hbar k_0}{\mu}\hat{\boldsymbol{r}} \tag{3.24}$$

注意上两式仅在 $r\to+\infty$ 的时候成立.

3.2.4 浸渐接通

对于一个波包而言考虑其空间展延度 Δz 和动量的弥散程度 Δk, 满足

$$\Delta z \approx \frac{1}{\Delta k} \tag{3.25}$$

从而 $\Delta k \to 0$ 有 $\Delta z > l$ 其中 l 为势场作用范围的特征长度, 从而波包通过势场的时间为

$$\Delta t \approx \frac{\Delta z}{v_G} \approx \frac{1}{v_G \Delta k} \tag{3.26}$$

过去我们认为势场是一直存在的, 而现在我们认为势场是在时间间隔 Δt 的时间内缓缓接通的, 可以发现的是当 $\Delta k \to 0$ 的时候, $\Delta t \to +\infty$, 即接通的时间趋于无穷, 所以称此时为浸渐接通, 而同时由于 $\Delta k \to 0$, 所以 $g(k) \to \delta(k-k_0)$, 所以 $\psi(\boldsymbol{r}, t) \to e^{\mathrm{i}k_0 z} e^{-\mathrm{i}E_{k_0}t/\hbar} + f_{k_0}(\theta, \varphi)\frac{e^{\mathrm{i}k_0 r}}{r} e^{-\mathrm{i}E_{k_0}t/\hbar}$, 即波函数趋于一个散射定态, 从而此时提供了一种对于散射定态的理解方法:

$$\text{散射定态} \Longleftrightarrow \text{浸渐接通势场中的波函数}$$

§ 3.3
# 用概率流来计算有效截面

3.3.1 概率流密度

薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial}\psi \tag{3.27}$$

两端左乘 ψ^* 得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi+V\psi^*\psi=\mathrm{i}\hbar\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi \tag{3.28}$$

上式取共轭得到 (注意 $V=V^*$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^*+V\psi\psi^*=-\mathrm{i}\hbar\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^* \tag{3.29}$$

两式相减有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*\right)=\mathrm{i}\hbar\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi+\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right) \tag{3.30}$$

即

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right)=0 \tag{3.31}$$

从而有

$$\nabla\cdot\left(\underbrace{-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)}_{=\boldsymbol{J}}\right)+\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\psi\right)=0 \tag{3.32}$$

注意到

$$J=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)=\frac{1}{m}\Re\left(\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi\right)=\Re\left(\psi^*\hat{\boldsymbol{v}}\psi\right) \tag{3.33}$$

故我们定义

定义 3.3.1: 概率流密度

称

$$\boldsymbol{J}:=\Re\left(\psi^*\hat{\boldsymbol{v}}\psi\right) \tag{3.34}$$

为概率流密度

其满足概率守恒方程

命题 3.3.1: 概率守恒方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{J}+\frac{\partial}{\partial t}\rho=0 \tag{3.35}$$

其中 $\rho=\psi^*\psi$ 为概率密度.

如果我们将概率视为一种流体, 那么容易发现

命题 3.3.2: 概率流密度的意义

$\boldsymbol{J}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 表示粒子单位时间内通过 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 的概率.

3.3.2 入射流和散射流

在

$$\boldsymbol{J}=\Re\left(\psi^{*}\hat{\boldsymbol{v}}\psi\right) \tag{3.36}$$

中代以 $\psi=e^{\mathrm{i}kz}$ 就可以得到

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{i}}=\frac{\hbar k}{\mu}\hat{\boldsymbol{z}} \tag{3.37}$$

代以 $\psi=f_k(\theta,\varphi)e^{\mathrm{i}kr}/r$ 得到

$$\begin{cases}(\boldsymbol{J}_d)_r=\dfrac{\hbar k}{\mu}\dfrac{1}{r^2}\left|f_k\right|^2\\(\boldsymbol{J}_d)_\theta=\dfrac{\hbar}{\mu}\dfrac{1}{r^3}\Re\left[\dfrac{1}{\mathrm{i}}f_k^{*}\dfrac{\partial}{\partial\theta}f_k\right]\\(\boldsymbol{J}_d)_\varphi=\dfrac{\hbar}{\mu}\dfrac{1}{r^3\sin\theta}\Re\left[\dfrac{1}{\mathrm{i}}f_k^{*}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}f_k\right]\end{cases} \tag{3.38}$$

从而可知当 $r\to+\infty$ 的时候, $\boldsymbol{J}_d$ 的主导向仅为 $(\boldsymbol{J}_d)_r$, 不妨忽略 $(\boldsymbol{J}_d)_\theta$、$(\boldsymbol{J}_d)_\varphi$, 而认为散射流仅是沿着径向的.

3.3.3 有效截面的表示

引用前面的符号, 对于散射定态, 容易发现有

$$F_i=N|\boldsymbol{J}_i|=N\frac{\hbar k}{\mu} \tag{3.39}$$

同时在范围角 (θ,φ) 方向上的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中通过的粒子数 $\mathrm{d}n$ 满足

$$\mathrm{d}n=N\boldsymbol{J}_d\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=N\left(\boldsymbol{J}_d\right)_r r^2\mathrm{d}\Omega=N\frac{\hbar k}{\mu}\left|f_k(\theta,\varphi)\right|^2\mathrm{d}\Omega \tag{3.40}$$

从而有

命题 3.3.3

当 r 足够的大, 有 $\mathrm{d}n$ 与 r 无关.

这显然符合我们的物理直觉, 此外考虑到有效微分散射截面为

$$\sigma(\theta,\varphi)=\frac{\mathrm{d}n}{F_i\mathrm{d}\Omega} \tag{3.41}$$

可以得到

$$\sigma(\theta,\varphi)=\left|f_k(\theta,\varphi)\right|^2 \tag{3.42}$$

即

命题 3.3.4: 散射定态的有效微分散射截面
散射定态的有效微分散射截面可以简单的表示为散射振幅的模方.

3.3.4 入射波与散射波的干涉

事实上考虑到波包存在横向展宽, 考虑下图

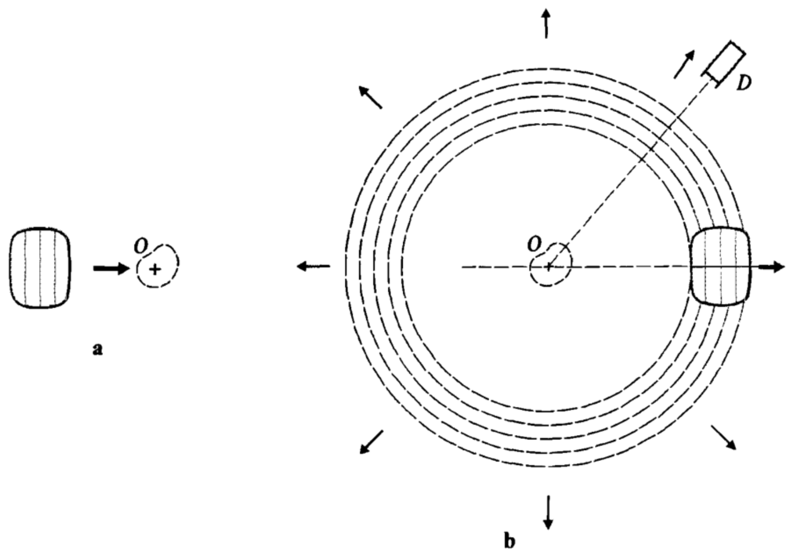

图 3.3

就可以发现在 $\theta \to 0$ 的区域, 实际上存在入射波与散射波的干涉, 在这种情况下就需要在概率流密度

$$\boldsymbol{J} = \Re\left(\psi^* \hat{\boldsymbol{v}} \psi\right) \tag{3.43}$$

中严格地代入

$$\psi = e^{\mathrm{i}kz} + f_k(\theta, \varphi)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.44}$$

来计算.

§ 3.4

散射的积分方程, Lippmann-Schwinger 方程

3.4.1 Fourier 变换

在 L1 空间上可以利用 Real analysis 的相关结论构建最为基础的 Fourier 变换, 下面只阐述最为重要的结论

定理 3.4.1

若 $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$ 对于

$$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\mathbb{R}^d} f(\boldsymbol{x}) e^{-2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{3.45}$$

有 $\hat{f}(\boldsymbol{\xi})$ 在 $\mathbb{R}^d$ 上连续且有界.

定理 3.4.2: 乘积定理

若 $f, g \in L^1(\mathbb{R}^d)$, 那么

$$\int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) g(\boldsymbol{\xi}) \mathrm{d}\boldsymbol{\xi} = \int_{\mathbb{R}^d} f(\boldsymbol{y}) \hat{g}(\boldsymbol{y}) \mathrm{d}\boldsymbol{y} \tag{3.46}$$

定理 3.4.3

若 $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$, 且有 $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$, 那么有

$$f(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) e^{2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}\boldsymbol{\xi} \quad a.e. \tag{3.47}$$

推论 3.4.1

若 $\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = 0$, 那么 $f(\boldsymbol{x}) = 0$ $a.e.$

推论 3.4.2

当 $f, \hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ 时所成立的关系式

$$\begin{aligned} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) &= \int_{\mathbb{R}^d} f(\boldsymbol{x}) e^{-2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ f(\boldsymbol{x}) &= \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) e^{2\pi \mathrm{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}\boldsymbol{\xi} \quad a.e. \end{aligned} \tag{3.48}$$

还可以写为

$$\begin{aligned} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(\boldsymbol{x}) e^{-\mathrm{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ f(\boldsymbol{x}) &= \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\boldsymbol{\xi}) e^{\mathrm{i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}\boldsymbol{\xi} \quad a.e. \end{aligned} \tag{3.49}$$

3.4.2 留数定理

引理 3.4.1: Jordan 引理

若

$$\lim_{z\to\infty} f(z) = 0 \quad (0 \leq \arg z \leq \pi) \tag{3.50}$$

那么有

$$\lim_{R\to+\infty} \int_{C_R} f(z)e^{\mathrm{i}kz}\mathrm{d}z = 0, \quad k > 0 \tag{3.51}$$

若

$$\lim_{z\to\infty} f(z) = 0 \quad (\pi \leq \arg z \leq 2\pi) \tag{3.52}$$

那么有

$$\lim_{R\to+\infty} \int_{C_R} f(z)e^{\mathrm{i}kz}\mathrm{d}z = 0, \quad k < 0 \tag{3.53}$$

证明. 仅证明第一种情况, 此时有

$$\begin{aligned}
&\left|\int_{C_R} f(z)\exp(\mathrm{i}k(\cos\theta + \mathrm{i}\sin\theta))\mathrm{d}z\right| = \left|\int_{C_R} f(z)e^{\mathrm{i}kR\cos\theta}e^{-kR\sin\theta}\mathrm{d}z\right| \\
=&\left|\int_0^{\pi} f(Re^{\mathrm{i}\theta})e^{\mathrm{i}kR\cos\theta}e^{-kR\sin\theta}\mathrm{i}z\mathrm{d}\theta\right| \leq \int_0^{\pi}\left|f(Re^{\mathrm{i}\theta})\right| e^{-kR\sin\theta}R\mathrm{d}\theta \\
\leq& \int_0^{\pi}\left|f(Re^{i\theta})\right| e^{-kR\frac{2}{\pi}\theta}R\mathrm{d}\theta \overset{\mathscr{A}}{\leq} \epsilon \underbrace{\int_0^{\pi} e^{-R\theta}R\mathrm{d}\theta}_{\leq 1} \leq \epsilon
\end{aligned} \tag{3.54}$$

$\mathscr{A}$ 表示的是 R 足够大, 得证. □

3.4.3 格林函数

事实上格林函数最早是一个用于解决 PDE 的方法, 以方程

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\varphi(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r}) \tag{3.55}$$

为例, 若能解出

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)G(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r}) \tag{3.56}$$

那么有

命题 3.4.1

$(\nabla^2 + k^2)\varphi(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r})$ 的解 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 可以表示为

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \varphi_0(\boldsymbol{r}) + (\rho * G)(\boldsymbol{r}) \tag{3.57}$$

其中 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 为对应齐次 *PDE* 的通解.

证明. 我们只需要证明 $(\rho * G)(\boldsymbol{r})$ 为方程

$$(\nabla^2 + k^2)\varphi(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r}) \tag{3.58}$$

的解即可, 直接代入可以得到

$$\begin{aligned}&\int(\nabla^2+k^2)\left\{G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\rho(\boldsymbol{r}')\right\}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\=&\int\rho(\boldsymbol{r}')(\nabla^2+k^2)G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\=&\int\rho(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=\rho(\boldsymbol{r})\end{aligned}\tag{3.59}$$

□

例 3.4.1

利用格林函数推导推迟势.

证明. 题目事实上就是要解决形如

$$\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\varphi(\boldsymbol{r},t)=\rho(\boldsymbol{r},t)\tag{3.60}$$

方程的解. 考虑

$$\varphi(\boldsymbol{r},t)=\int\hat{\varphi}(\boldsymbol{r},\omega)e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega\tag{3.61}$$

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=\int\hat{\rho}(\boldsymbol{r},\omega)e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega\tag{3.62}$$

代入可得

$$\int\left\{\left(\nabla^2+\frac{\omega^2}{c^2}\right)\hat{\varphi}(\boldsymbol{r},\omega)-\hat{\rho}(\boldsymbol{r},\omega)\right\}e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega=0\tag{3.63}$$

从而有

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\hat{\varphi}(\boldsymbol{r},\omega)=\hat{\rho}(\boldsymbol{r},\omega);\quad k=\frac{\omega}{c}\tag{3.64}$$

为了求解这个方程, 考虑对应格林函数 (视 ω 为参数):

$$\left(\nabla^2+k^2\right)G(\boldsymbol{r})=\delta(\boldsymbol{r})\tag{3.65}$$

考虑到完备性方程:

$$\delta(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}\tag{3.66}$$

有

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r})&=\int G(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\&=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\int G(\boldsymbol{r}')e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\mathrm{d}\boldsymbol{k}\\&=\int\underbrace{\left\{\frac{1}{(2\pi)^3}\int G(\boldsymbol{r}')e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right\}}_{\hat{G}(\boldsymbol{k})}e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}\\&=\int\hat{G}(\boldsymbol{k})e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}\end{aligned}\tag{3.67}$$

将上式, 和完备性方程同时代入之前的格林函数所满足的方程之中可以得到

$$\int \left\{(k^2-k'^2)\hat{G}(\boldsymbol{k}') - \frac{1}{(2\pi)^3}\right\} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}' = 0 \tag{3.68}$$

从而有

$$\hat{G}(\boldsymbol{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{k^2-k'^2} \tag{3.69}$$

从而

$$\begin{aligned}
G(\boldsymbol{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}}{k^2-k'^2}\mathrm{d}\boldsymbol{k}' = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty \mathrm{d}k' \frac{k'^2}{k^2-k'^2}\left\{\int_0^\pi e^{\mathrm{i}k'r\cos\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta\right\} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{\mathrm{i}r}\int_0^\infty \frac{k'}{k^2-k'^2}\left\{e^{\mathrm{i}k'r}-e^{-\mathrm{i}k'r}\right\}\mathrm{d}k' \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\Im\int_{-\infty}^\infty \frac{k'}{k^2-k'^2}e^{\mathrm{i}k'r}\mathrm{d}k' \\
&\overset{\mathscr{A}}{=} \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\Im\begin{cases} \pi\mathrm{i}\,\mathrm{Res}\left[\frac{k'}{k^2-k'^2}e^{\mathrm{i}k'r}, k'=k\right] + \pi\mathrm{i}\,\mathrm{Res}\left[\frac{k'}{k^2-k'^2}e^{\mathrm{i}k'r}, k'=-k\right] & \text{if } r>0 \\ -\pi\mathrm{i}\,\mathrm{Res}\left[\frac{k'}{k^2-k'^2}e^{\mathrm{i}k'r}, k'=k\right] - \pi\mathrm{i}\,\mathrm{Res}\left[\frac{k'}{k^2-k'^2}e^{\mathrm{i}k'r}, k'=-k\right] & \text{if } r<0 \end{cases} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{r}\Im\begin{cases} \pi\mathrm{i}\left\{-\frac{1}{2}e^{\mathrm{i}kr}-\frac{1}{2}e^{-\mathrm{i}kr}\right\} & \text{if } r>0 \\ -\pi\mathrm{i}\left\{-\frac{1}{2}e^{\mathrm{i}kr}-\frac{1}{2}e^{-\mathrm{i}kr}\right\} & \text{if } r<0 \end{cases} \\
&= \frac{1}{4\pi}\frac{1}{r}\begin{cases} -\cos(kr) & \text{if } r>0 \\ \cos(kr) & \text{if } r<0 \end{cases}
\end{aligned} \tag{3.70}$$

$\mathscr{A}$ 处用了 $\int_{-\infty}^{\infty} f(z)e^{\mathrm{i}kz}\mathrm{d}z$ 形的留数定理. 由于我们所考虑的问题有 $r>0$, 所以

$$G(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\cos(kr)}{r} \tag{3.71}$$

通过类似的方法可以发现

$$(\nabla^2+k^2)G(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{3.72}$$

的解为

$$G(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\sin(kr)}{r} \tag{3.73}$$

从而 $(\nabla^2+k^2)G(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r})$, 的解 (即对应的格林函数) 可以写为

$$G_\pm(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.74}$$

若令 $\rho(\boldsymbol{r},t) = \delta(\boldsymbol{r})\delta(t)$, 则

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r},\omega) = \frac{1}{2\pi}\delta(\boldsymbol{r}) \tag{3.75}$$

从而可知

$$\hat{\varphi}_\pm(\boldsymbol{r},\omega) = \frac{1}{2\pi}G_\pm(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{8\pi^2}\frac{e^{\pm\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.76}$$

故

$$\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)G(\boldsymbol{r},t)=\delta(\boldsymbol{r})\delta(t) \tag{3.77}$$

的解 (即所对应的格林函数) 为

$$G_\pm(\boldsymbol{r},t)=\int\hat{\varphi}_\pm(\boldsymbol{r},\omega)e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega=-\frac{1}{8\pi^2}\int\frac{e^{\mathrm{i}\omega(t\pm r/c)}}{r}\mathrm{d}\omega \tag{3.78}$$

考虑到

$$\delta(t)=\frac{1}{2\pi}\int e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega \tag{3.79}$$

从而

$$\delta(t\pm r/c)=\frac{1}{2\pi}\int e^{\mathrm{i}\omega(t\pm r/c)}\mathrm{d}\omega \tag{3.80}$$

故有

$$G_\pm(\boldsymbol{r},t)=-\frac{1}{4\pi}\frac{\delta(t\pm r/c)}{r} \tag{3.81}$$

□

定义 3.4.1: 推迟势

上式中 G_- 就是所谓的 *retarded Green function,* 而 G_+ 就是 *advanced Green function.* 这两者就是 *PDE*

$$\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\varphi(\boldsymbol{r},t)=\rho(\boldsymbol{r},t) \tag{3.82}$$

的格林函数.

注 3.4.1

从上述的证明过程中还可以发现

$$G_\pm(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.83}$$

就是 *PDE*

$$(\nabla^2+k^2)\varphi(\boldsymbol{r})=\rho(\boldsymbol{r}) \tag{3.84}$$

的格林函数.

3.4.4 散射的积分方程

此节中通过对哈密顿算符的本征方程进行一些处理, 以此来导出所谓的散射的积分方程, 抑或是称为 Lippmann-Schwinger 方程.

哈密顿算符的本征值方程为

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\varphi(\boldsymbol{r})=U(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r}) \tag{3.85}$$

利用对应 PDE 的格林函数, 可以发现上述本征方程的解应当满足

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\varphi_0(\boldsymbol{r})+\left(G_\pm*U\varphi\right)(\boldsymbol{r}) \tag{3.86}$$

其中 φ_0 是对应齐次偏微分方程的通解. 容易发现

命题 3.4.2

哈密顿算符的本征方程的解一定可以表示为积分方程的解, 同时积分方程的解也一定是哈密顿算符本征方程的解, 所以

$$\text{哈密顿算符的本征方程} \Longleftrightarrow \text{散射的积分方程}$$

故我们接下来就可以通过研究散射的积分方程来代替对于哈密顿算符的本征方程的研究. 事实上散射的积分方程诚然是存在不少的好处的, 这体现在

$$\text{哈密顿算符的本征方程的抽象定解条件} \Longleftrightarrow \text{散射的积分方程选择特殊的 } \varphi_0 \text{ 以及 } G_\pm$$

为了叙述这一点, 我们回顾之前所提到的抽象的定解条件, 即散射定态需要满足的条件, 由于之前没有严格给出定义, 此处重新叙述如下

定义 3.4.2: 抽象的定解条件

散射定态需要满足

$$v_k^{(diff)} \underset{r\to+\infty}{\to} e^{\mathrm{i}kz} + f_k(\theta,\varphi)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.87}$$

然而当我们设置

$$e^{\mathrm{i}kz} \to \varphi_0(\boldsymbol{r}), \quad \text{选取格林函数 } G_\pm \text{ 的角标为 } + \tag{3.88}$$

那么散射的积分方程可以写为

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}kz} + (G_+ * U\varphi)(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}kz} + \int G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r'})U(\boldsymbol{r'})\varphi(\boldsymbol{r'})\mathrm{d}\boldsymbol{r'} \tag{3.89}$$

考虑到势场是 bounded 的, 即其作用范围有限, 不妨令势场作用范围的特征长度为 L, 则有

$$r' << L << r \tag{3.90}$$

考虑到

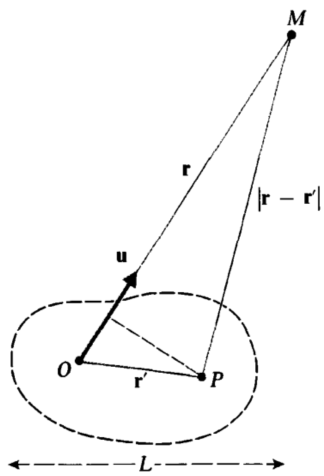

图 3.4

从而有

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \sim r-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}' \tag{3.91}$$

(注意此处 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 为图中 $\boldsymbol{u}$), 从而有

$$G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \sim -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\mathrm{i}k(r-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}')}}{r-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'} \sim -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r}e^{-\mathrm{i}k\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{3.92}$$

从而有

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}kz} + \underbrace{\left\{\int -\frac{1}{4\pi}e^{-\mathrm{i}k\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right\}}_{\text{不妨令其为 } f_k(\theta,\varphi)}\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{3.93}$$

综上, 可以发现在散射的积分方程中代入 $e^{\mathrm{i}kr}$ 和 G_+ 后得到的解是自然满足抽象的定解条件的, 这也就是为什么要引入散射的积分方程, 同时注意我们之前并不能断言散射定态的存在性, 然而通过上述论断可以发现

命题 3.4.3

若代入 $e^{\mathrm{i}kz}$ 和 G_+ 的散射的积分方程

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}kz} + \int G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{3.94}$$

有解, 那么其解就是散射定态, 从而可知散射定态的存在性.

§ 3.5
# Born Approximation

3.5.1 一些术语

定义 3.5.1: 入射波矢

入射波矢 $\boldsymbol{k}_i$ 的指向为 *projectile* 运动的方向, 其大小为 k

引入入射波矢量, 可以发现

$$e^{\mathrm{i}kz} = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}} \tag{3.95}$$

定义 3.5.2: 散射波矢

(θ,φ) 方向上的散射波矢是具有与入射波矢相同模 k 而方向角为 (θ,φ) 的矢量 $\boldsymbol{k}_d$.

定义 3.5.3: 转移波矢

定义 (θ,φ) 方向上的转移波矢 $\boldsymbol{K}$ 为

$$\boldsymbol{K} := \boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i \tag{3.96}$$

3.5.2 Born Approximation

内蕴抽象定解条件的散射积分方程为 (注意到其内蕴了抽象定解条件, 所以可以用散射定态的符号 $v_k^{(diff)}$ 替代 φ)

$$v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}} + \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}') \tag{3.97}$$

利用迭代的方法可以形式的给出上述方程的解, 不加证明地令对应的级数收敛.

命题 3.5.1

内蕴抽象定解条件的散射积分方程的解经过 n 次迭代得到:

$$v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}_0) = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0} + \sum_{m=1}^{n} \underbrace{\int\cdots\int}_{m\text{重积分}} \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_m \prod_{j=1}^{m} G_+(\boldsymbol{r}_{j-1}-\boldsymbol{r}_j)\prod_{j=1}^{m}U(\boldsymbol{r}_j)e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_m} + r_n \tag{3.98}$$

其中

$$r_n = \underbrace{\int\cdots\int}_{n+1\text{重积分}} \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n+1} \prod_{j=1}^{n+1} G_+(\boldsymbol{r}_{j-1}-\boldsymbol{r}_j)\prod_{j=1}^{n+1}U(\boldsymbol{r}_j)v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}_{n+1}) \tag{3.99}$$

额外的如果我们考虑到 r_n 的计算式中出现了

$$\prod_{j=1}^{n+1} U(\boldsymbol{r}_j) \tag{3.100}$$

由于我们认为 U 为 bounded 的, 从而 U 在积分中出现的次数越多, 可以认为积分的值越小, 形式上的可以理解为

$$r_n = O(U^{n+1}) \tag{3.101}$$

从而有

命题 3.5.2

级数

$$\sum_{m=1}^{\infty} \underbrace{\int \cdots \int}_{m\text{重积分}} \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_m \prod_{j=1}^{m} G_+(\boldsymbol{r}_{j-1} - \boldsymbol{r}_j) \prod_{j=1}^{m} U(\boldsymbol{r}_j) e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}_m} \tag{3.102}$$

收敛, 且

$$\lim_{n\to\infty} r_n = 0 \tag{3.103}$$

综上可以知道

定理 3.5.1: Born expansion

对于 U 为 *bounded* 的时候, 散射定态一定存在, 并且其可表示为

$$v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}_0) = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}_0} + \sum_{m=1}^{\infty} \underbrace{\int \cdots \int}_{m\text{重积分}} \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_m \prod_{j=1}^{m} G_+(\boldsymbol{r}_{j-1} - \boldsymbol{r}_j) \prod_{j=1}^{m} U(\boldsymbol{r}_j) e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}_m} \tag{3.104}$$

注意此处 $\boldsymbol{r}_0$ 就是 $\boldsymbol{r}$, 只是为了方便在求和中表示所以才引入了角标 0.

考虑到

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-\mathrm{i}k\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'} U(\boldsymbol{r}') v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}') \tag{3.105}$$

代入 $v_k^{(diff)}$ 的波恩展开式就可以得到散射截面的波恩展开式.

除此之外, 若不进行上述的迭代, 直接认为

$$r_0 = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' G_+(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') U(\boldsymbol{r}') v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}') = O(U) \to 0 \tag{3.106}$$

那么就得到了最为粗略的估计

$$v_k^{(diff),(B)} \sim e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}} \tag{3.107}$$

将该式代入散射截面的计算公式之中, 就得到了

$$\begin{aligned} f_k^{(B)}(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-\mathrm{i}k\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{r}'} U(\boldsymbol{r}') e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{r}} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_d - \boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r}} U(\boldsymbol{r}') \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'} U(\boldsymbol{r}') \end{aligned} \tag{3.108}$$

故

定理 3.5.2: 散射振幅的 Born Approximation

散射振幅的波恩近似为

$$f_k^{(B)}(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}') \tag{3.109}$$

可以发现该表达式即为一个 *Fourier* 变换.

额外的, 考虑到 V 才是散射问题中实际的势场, 而

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu}U(\boldsymbol{r}) \tag{3.110}$$

同时依据散射定态的有效微分散射截面可以表示为

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f_k(\theta,\varphi)|^2 \sim \left|f_k^{(B)}(\theta,\varphi)\right|^2 \tag{3.111}$$

推论 3.5.1: 有效微分散射截面的 Born Approximation

有效微分散射截面的波恩近似为

$$\sigma_k^{(B)}(\theta,\varphi) = \frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\right|^2 \tag{3.112}$$

该公式就是最为基础的通过有效微分散射截面求出势场的方法, 具体流程为

$$\text{测量 } \sigma_k(\theta,\varphi) \Longrightarrow \text{系数修正后开根} \Longrightarrow \text{傅里叶逆变换}$$

3.5.3 对于公式的理解

之前给出的 Born expansion

$$v_k^{(diff)}(\boldsymbol{r}_0) = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0} + \sum_{m=1}^{\infty}\underbrace{\int\cdots\int}_{m\text{重积分}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_m\prod_{j=1}^{m}G_+(\boldsymbol{r}_{j-1}-\boldsymbol{r}_j)\prod_{j=1}^{m}U(\boldsymbol{r}_j)e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_m} \tag{3.113}$$

可以赋予一个波动光学上的类比解释, 关键思路为

$$\text{势场作用范围} \Longleftrightarrow \text{散射介质, 且其密度与 } U(\boldsymbol{r}) \text{ 成正比}$$

$$G_+(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \Longleftrightarrow \text{位于 } \boldsymbol{r}' \text{ 处的源点向 } \boldsymbol{r} \text{ 处的场点辐射的波的振幅}$$

额外的, 考虑到散射介质中散射的强度正比于外界波的振幅, 且正比于密度 (即正比于 $U(\boldsymbol{r})$) 从而可知

$$e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_0} \Longleftrightarrow \text{入射波}$$

$$\text{求和中不同的 } m \text{ 所对应的项} \Longleftrightarrow \text{所有经过 } m \text{ 次诱生的子波源所产生的波的叠加}$$

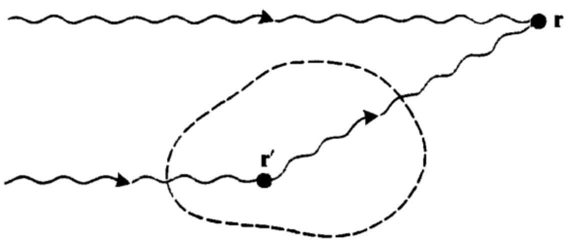

图 3.5. $m = 1$ 的项

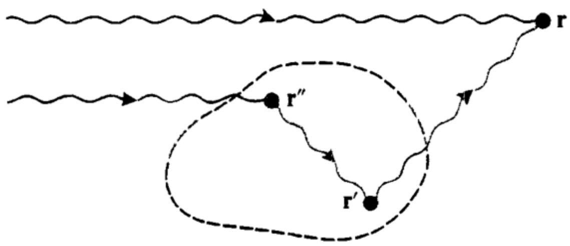

图 3.6. $m = 2$ 的项

注意上图之中 $\boldsymbol{r} \Leftrightarrow \boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}' \leftrightarrow \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}'' \leftrightarrow \boldsymbol{r}_2$.

注 3.5.1

上述的讨论之中没有讨论各子波源之间的干涉, 以及子波源和入射波之间的干涉, 事实上这些干涉项在散射介质十分稀疏 (即 $U(\boldsymbol{r})$ 十分小) 的时候是可以近似忽略的.