Modern Physics 现代物理, 2011, 1, 1-16
http://dx.doi.org/10.12677/mp.2011.11001 Published Online May 2011 (http://www.hanspub.org/journal/mp/)

The Properties of Microscopic Particles Described by Nonlinear Schrödinger Equation in Nonlinear Quantum Systems

Xiaofeng Pang
Institute of Life Science and Technology, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu
Email: pangxf2006@yahoo.com.cn
Received: Mar. 18th, 2011; revised: Apr. 20th, 2011; accepted: Apr. 28th, 2011.

Abstract: In original quantum mechanics the Schrödinger equation is, in essence, a wave equation, where the microscopic particles depicted have only a wave feature, and not a corpuscle nature. These descriptors do not agree with both the Broglie relation of wave-corpuscle duality, and with also experimental results and the traditional knowledge of particle concept. Meanwhile, the theory gives only some approximate solutions. Thus a series of contradictory representations and problems occur in quantum mechanics, which have resulted in durative disputations focused on the area of physics and have not led to any united conclusions until now. The only way to solve these problems and difficulties is to develop the quantum mechanics. We investigate in detail wave-corpuscle duality of microscopic particles described by a nonlinear Schrödinger equation in nonlinear quantum systems. Concretely speaking, we here study the properties of the solution of the nonlinear Schrödinger equation, the stability of microscopic particles, invariance and conservation laws of motion of particles, the Hamiltonian principle of particle motion and corresponding Lagrangian and Hamilton equations, the classical rule of microscopic particle motion, and so on. Studied results show that the solution of the nonlinear Schrödinger equation depicting microscopic particles is a soliton and have a wave-corpuscle duality, microscopic particles have always a mass center and possess determinant positions, sizes, mass, momentum, energy and form, their mass, momentum and energy satisfy corresponding conservation laws, their dynamic states can be described by both nonlinear Schrödinger equation and classical Lagrangian and Hamilton equations, their motions obey the classical Newton-type law of motion. These properties indicate that the microscopic particles described by a nonlinear Schrödinger equation have a corpuscle nature. However, the solutions of dynamic equation are some solitary waves which are accompanied by a carrier wave to propagate in space-time, and possess certain frequency and wave speed. Thus microscopic particles described by nonlinear quantum mechanics have also wave feature. Then we can affirm that the microscopic particles depicted by a nonlinear Schrödinger equation have a perfect wave-corpuscle duality, which are in essence different from those in linear quantum mechanics. Based on these results we can establish a new nonlinear quantum mechanics, which can solve these difficulties and problems disputed for about a century in linear quantum mechanics.

Keywords: Quantum Mechanics; Nonlinear Schrödinger Equation; Wave-Corpuscle Duality; Localization

非线性量子系统中由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子的特性

庞小峰
电子科技大学生命科学与技术学院，成都
Email: pangxf2006@yahoo.com.cn
收稿日期：2011 年 3 月 18 日；修回日期：2011 年 4 月 20 日；录用日期：2011 年 4 月 28 日

摘　要：原有量子力学中的 Schrödinger 方程不能很好地描述微观粒子的局域特性和波－粒二象性，因此，量子力学必须改进和发展。在非线性系统中我们考虑了粒子之间或它与背景场之间的非线性相互作用，于是必须用非线性 Schrödinger 方程去描述的微观粒子的状态。至此，微观粒子的状态和特征相对于线性系统发生了根本性的变化。在这种情况下不论外势场如何变化，但非线性 Schrödinger 方程都能给出具有波－粒二象特性的解，它由包络孤子和一个载波组成，有一个具有确定的位置的质心；同时，微观粒子此时也具有一个确定的质量，能量和动量，它们遵守的质量，能量和动量守恒定律，在外场作用时粒子是稳定的，并满足经典运动方程和遵守哈密顿方程和拉格朗日方程。于是用非线性 Schrödinger 方程去描述的微观粒子具有一个明显的的局域特性和波－粒二象性，从而彻底消除了原有量子力学存在近一个世纪的困难和问题。基于这些新的结果我们可建立起完整和系统的非线性量子力学理论体系，推动量子力学的发展。因此这一研究具有重要意义。

关键词：量子力学；非线性 Schrödinger 方程；波－粒二象性；局域特性

1. 前言，量子力学的困难和问题

在 19 世纪末期人们用成熟的经典物理理论来研究微观粒子引起的物理现象时遇到了不可克服的困难，即是我们常说的四大困难。这些困难迫使我们对组成宏观物体的微观粒子本性的再认识。由于微观粒子的质量太小(大约为 10^{-23} g～10^{-25} g)，运动速度又快，不能把它与宏观粒子完全等同起来。普朗克和德布罗意等人突破传统的粒子概念，大胆地提出微观粒子具有波－粒二象性的特性，革新了我们对粒子的认识。在 20 世纪初期，玻尔、海森堡和薛定谔等人[1-13]在这新的思想基础上，提出了 8 条基本假设，建立起了描述具有量子特征的微观粒子在线性场中运动规律和特征的量子力学理论。这个理论的一个基本点是微观粒子的状态用一个波函数来描述，它在非相对论情况下满足 Schrödinger 方程，在相对论情况下满足 Klein-Gordon 方程。由于这两类方程都是粒子状态的线性函数，它本身又满足线性的迭加原理，理论所采用的都是厄米的线性算符，于是我们在这里称它为线性量子力学。通过几十年的运用与实践，线性量子力学取得了很大成就，在一些简单体系中得到了与实验较一致的结果。但是，当它应用于复杂系统时，不得不采取各种不同的近似方法去求解 Schrödinger 方程，于是我们仅能得到一些近似的，而不是真实解。因此量子力学本质上是一个近似理论。这是因为该理论是线性的，没有考虑粒子之间或它与背景场之间真实存在的非线性相互作用，再加上该理论的动力学方程，即线性 Schrödinger 方程[1-13]

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\left(x,t\right)\psi \tag{1}$$

($\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)$ 是微观粒子的波函数)仅是一个波动方程，仅有一个波动解，不能表现微观粒子的粒子性。例如当 $V\left(\boldsymbol{r},t\right)=0$ 时，它为一个平面波

$$\psi\left(\boldsymbol{r},t\right)=A\exp\left[i\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et\right)/t_1\right] \tag{2}$$

其本征能量 E 为：

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right),\quad \left(-\infty<p_x<\infty,-\infty<p_y<\infty,-\infty<p_z<\infty,\right) \tag{3}$$

是一个连续谱。此时微观粒子弥散于整个空间。显然，这是由于在此种情况下粒子的状态仅由动能决定造成的。如现把这一粒子限制在一个长、宽、高分别为 a、b、c 的小盒子中时，在 $V(\boldsymbol{r},t)=0$ 时，(1)式的解是一个驻波。即

$$\psi\left(x,y,z\right)=A\sin\left(\frac{n_1\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi y}{b}\right)\sin\left(\frac{n_3\pi z}{c}\right)e^{iEt/\hbar}$$

其本征能量是量子化的，即

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right) \tag{4}$$

相应的动量也是量子化的。但此时粒子仍充满整个盒子，即使盒子非常小，也不可能局域。

如果让粒子处在与一个时间无关的保守力场中

(即$V(\boldsymbol{r})\neq 0$)，则在一维时，微观粒子满足定态薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x)\psi=E\psi$$

这里

$$\psi(x,t)=\psi(x)e^{iEt/\hbar}$$

对于外势场$V(x)=ax$，例如带电粒子处在电场及重力场中的运动情况，这里a是与坐标x无关的常数。在一维均匀电场中，$V(x)=-eE'x$，则上式的解为

$$\psi=A\xi^{\frac{1}{2}}H_{1/3}^{(1)}(\frac{2}{3}\xi^{3/2})\quad(\xi=\frac{x}{l}+\lambda)$$

这里$H^{(1)}(x)$是第一类汉克尔函数，A是归一化常数，$\xi=\frac{x}{l}+\lambda$，l是特征长度，λ是无量纲量。在$\xi\to\infty$时，仍有一波动存在，$\psi(\xi)=A\xi^{-\frac{1}{4}}e^{-2\xi^{2/3}}\Big/3$。这表明此时粒子仍不能被局域。

如果$V(x)=ax^2$(即谐振子情况)，在一维情况下的定态动力学方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi=E\psi(x)$$

其解

$$\psi_n(x)=N_ne^{-\frac{1}{2}a^2x^2}H_n(ax),\quad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\qquad(5)$$

$$(n=0,1,2,\cdots)$$

此时粒子也不是局域的，因为在$x\to\infty$时，其波函数仍不能为零。这些研究表明，无论外势场$V(r)$采取什么形式，由式(1)决定的解都不是局域的。于是，在线性量子力学中微观粒子仅具有波动性，而无粒子特性可言。其根本原因是：(1)式是仅存在色散效应的线性方程，因此粒子的特征仅由这个色散效应决定，而外加势场$V(x)$由于与粒子的状态无关，所以不可能改变粒子的本质特性仅能改变粒子的外貌。于是由(1)式描述的粒子总是弥散于所在空间，不论你采取什么迭加手段和方法，也得不到一个不弥散的稳定波解来，永远得不到一个在时－空中稳定的粒子解，而不可能局域。至此造成了测不准关系的出现，给线性量子力学带来一系列困难。因此该理论仅能对包含有较少粒子的氢原子、氢分子和氦原子能给出了较精确的解，遇到复杂原子，分子和凝聚态物质就困难重重。这与由单缝和双缝衍射等实验得到的微观粒子具有波－粒二象性不符合。至此波恩引入了对波函数的统计解释，以此来弥补它不能表示微观粒子的颗粒特性的这一缺陷。但这却带来线性量子力学的许多矛盾和问题，再加之原有的线性量子力学的诸多基本问题，如波函数的意义，波－粒二象性和测不准关系等长期争论不休。量子力学的奠基人玻尔为首的哥本哈根学派与相对论之父爱因斯坦等人论战了半个多世纪，一直到死，都未得出一个明确结论[14-19]。最后德布罗意等人在长期研究后得出：“如果今日波动力学不能清楚地解释粒子与波动的关系，那就是由于它事先限制了自己在线性理论的框架之中”的结论[20]。详细地考查式(1)的物理含义时，不难发现它缺少一个反映粒子与另一个粒子或该粒子与一背景场等相互作用项，实际上，这些相互作用对任何微观粒子都是存在的，但在线性量子力学中经常是把它当成外势场，并进一步把它当作一个平均场或周期外势场来处理，于是一个复杂系统便简化到了能用线性 Schrödinger 方程求解的简单方程。对于十分复杂的多体多粒子系统的处理也是如此。这样做，虽然简化了研究的这种复杂系统，但却抹杀掉了对粒子本质有影响诸多因素。这是不应当的。

如果认真考虑粒子与粒子、或粒子与背景场等之间相互作用的非线性相互作用特性后。庞小峰通过在(1)式中加一项与粒子的状态波函数相关的非线性项$b|\varphi|^2\phi$，用下面的非线性 Schrödinger 方程去描述微观粒子的运动状态[21-30]，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi-b|\phi|^2\phi+V(\boldsymbol{r},t)\phi\qquad(6)$$

此处的$\phi(\boldsymbol{r},t)$是在非线性量子系统中的微观粒子的波函数。在这种情况下，由它描述的粒子具有什么的特点和遵守什么样的运动规律等等问题，显然是十分关切的，现来考察它。

2. 非线性 Schrödinger 方程解具有波－粒二象特性的和粒子局域性

如前所述，由于外加势场$V(\boldsymbol{r},t)$与粒子的状态无关，它不可能改变粒子的本质特性仅能改变粒子的外貌，于是我们现仅研究当$V(\boldsymbol{r},t)=0$和$b=$常数时非线

性相互作用（$b|\varphi|^2\phi$）对粒子的特性和运动状态的影响。在一维情况下此时(6)式应为：

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi+b|\phi|^2\phi=0 \tag{7}$$

显然，上式可变成为

$$i\phi_{t'}+\phi_{x'x'}+b|\phi|^2\phi=0 \tag{8}$$

这里 $x'=x\big/\sqrt{\hbar^2/2m}$， $t'=t/\hbar$。现在假设方程(8)式具有以下形式的解

$$\phi(x',t')=\phi(x',t')e^{i\theta(x',t')} \tag{9}$$

代上式进入(8)式，可得

$$\varphi_{x'x'}-\varphi\theta_{t'}-\varphi\theta_{x'}^2-b\varphi^2\varphi=0 \qquad (b>0)$$
$$\varphi\theta_{x'x'}+2\varphi_{x'}\theta_{x'}+\varphi_{t'}=0$$

现让 $\theta=\theta(x'-v_ct'),\phi=\phi(x'-v_et')$，则上面两个方程变成：

$$\varphi_{x'x'}-v_c\varphi\theta_{t'}-\varphi\theta_{x'}^2-b\varphi^3=0$$
$$\varphi\theta_{x'x'}+2\varphi_{x'}\theta_{x'}-v_e\varphi_t=0$$

对于某一较小时刻 t'，可对以上两个式子中的后式积分。其后，可得

$$\varphi^2(2\theta_{x'}-v_e)=A(t')$$

现让积分常数 $A(t')=0$，则可得 $\theta_{x'}=v_e/2$，再代它进入上面两式的前式，又积分，可得

$$\int_{\varphi_0}^{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{Q(\varphi)}}=x'-v_et'$$

这里 $Q(\varphi)=-b\varphi^4\big/2+\left(v_e^2-2v_cv_e\right)\varphi^2+c'$。

当选 $c'=0$， $v_e^2-2v_cv_e>0$，时则有 $\varphi=\pm\varphi$，除有 $\varphi_0=0$ 存在外，还有 $\varphi_0=\left[2\left(\mathrm{v}_e^2-2v_cv_e\right)\big/b\right]^{1/2}$ 的解，后者是 $Q(\phi)=0$ 的根。利用以上关系，可得方程(8)式的解具有如下形式[31-32]

$$\varphi(x',t')=\varphi_0\mathrm{sech}\left[\sqrt{\frac{b}{2}}\varphi_0\left(x'-v_et'\right)\right]$$

最后可以把(8)式的解写成：

$$\phi(x,t)=A_0\mathrm{sech}\left\{\frac{A_0\sqrt{b}}{\sqrt{2}\hbar}\left[\sqrt{2m}\left(x-x_0\right)-v_et\right]\right\}\cdot e^{iv_e\left[\sqrt{2m}(x-x_0)-v_ct\right]/2\hbar} \tag{10}$$

这里 $A_0=\sqrt{\dfrac{(v_c^2-2v_cv_e)m}{2b}}$。Zakharov 等人[33-34]曾用反散射法求出过此方程的孤子解，但他们解的形式不同于上式。

此解与(2)式迥然不同，它是一种波包型的孤立波。其包络波为：

$$A\mathrm{sech}\left\{\frac{A_0\sqrt{bm}}{\hbar}\left[\left(x-x_0\right)-v_et\right]\right\}$$

式中， v_e 为包络波的群速度，载波为谐和波 $\exp\left\{imv_e\left[\left(x-x_0\right)-v_et\right]\right\}$，其相速度为 v_c (如图 1 所示)。此种孤立波在空间传播时，在所有时间内，波形和速度都不会改变，也不会弥散。这就是说，非线性相互作用项使式(2)的线性平面波发生畸变为一个“前无古人，后无来者”的孤单单的稳定孤立波－孤子，显示出能量的聚集和粒子的局域性，其局域在 x_0 处。从而表现出明显的粒子性。这种性质是不随外势场的改变而变化的。

现来讨论在 $V(x,t)=0$ 和 $A(\phi)=0$ 时，示在图 1 中的(10)式孤子的波－粒二象性。如前所述，此时微观粒子的状态用一个波包型包络波和载波来表示。其包络孤立波的宽度为 $2\pi\hbar\big/\left(\sqrt{mb}A_0\right)$，其振幅为 A_0。于是，这个孤子的大小为 $A_0W=2\pi\hbar\big/\sqrt{mb}$，它是一个常数，与粒子的速度等无关，这表明这孤子在时空中传播时，它的大小是不变的。从而显示出粒子的特性。由于粒子被局域，其大小又限制在 $2\pi\hbar\big/\left(\sqrt{mb}A_0\right)$ 的范围内，于是，它的能量也被聚集，则微观粒子变成为一个具有确定的能量、动量和质量的粒子。可求出它们分别为 $E=E_0+\frac{1}{2}M_{sol}V_e^2$， $P=2mVeNs$， $Ns=2\pi\hbar\big/\sqrt{mb}$，即它们都是一些常数，完全由粒子的性质决定。

从图 1 可看出，这个微观粒子有确定位置，是被局域在 $x=x_0$ 的地方。所以 x_0 就是孤子的质心位置。因此在用 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 或 $\phi(x,t)$ 来表示微观粒子时，其中的位矢 $\boldsymbol{r}$ 或位置 x 有确切的物理含义。真实的表示了微观粒子在时空中的位置。因此，这些正是粒子的特性。

另一方面，(6)式的解是一个孤子波，同时它由

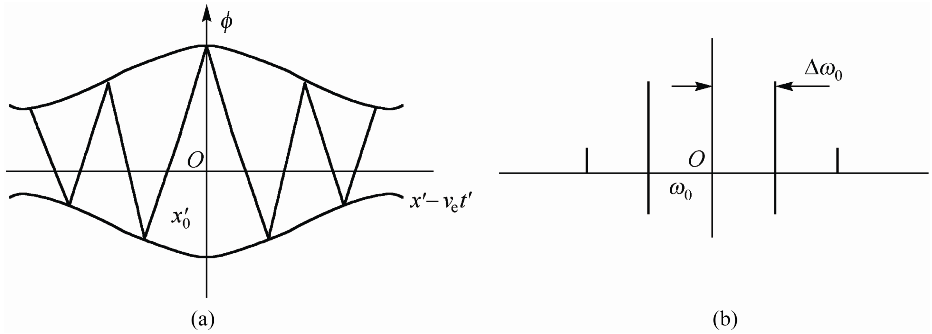

Figure 1. The solution of solitary wave of the nonlinear Schrödinger Equation (7)
图 1. 非线性 Schrödinger 方程(7)的孤立波

载波“携带”在时空中传播，从而具有波动性。同时，粒子的包络波的频谱总是围绕载波频率 ω_0 分布，呈现出一个局域结构，展现出一个频宽 $\Delta\omega_0$。在图 1 中示出了包络波的 $\varphi(x,t)$ 频谱宽度。由于频率是波动的一个特征。因此，由非线性的 Schrödinger 方程式(6)描述的微观粒子既具有波动性，又具有粒子性，即具有波－粒二象性。由(7)～(10)式可知，这种性质是不随外势场的变化而改变的，是微观粒子的固有特性。这些特征也与革末和载维孙等的单缝和双缝衍射的实验结果相吻合。从而彻底避开量子力学的困难。

例如，在 $V(x)=C=$ 常数时，式(6)的解也是一个孤立波：

$$\phi=\sqrt{\frac{2\beta}{b}}\operatorname{sech}\left\{\sqrt{\beta}\left[\left(x'-x'_0\right)-v_e\left(t-t_0\right)\right]\right\}\cdot\exp i\left\{\frac{v_e}{2\hbar}\left[\left(x'-x'_0\right)-\left(\beta-\frac{v_e^2}{4}-C\right)\right]t\right\} \tag{11}$$

它与式(10)的孤子解类似，仍是一个波包型的孤立波，即一个包络孤波被一个载波载着一起运动。在它们相互作用，如碰撞时，仅是孤立波的相位发生了变化。因此它具有明显的粒子性。

如果再改变外势场的形式为 $V=ax'$ 时，(6)式在一维系统中变成

$$i\frac{\partial}{\partial t'}\phi+\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\phi+b|\phi|^2\phi=ax'\phi \tag{12}$$

这里 $t'=t/\hbar$，$x'=(2m)^{1/2}x/\hbar$。如果 ϕ 仍用式(9)来表示，这时 $\theta=\theta(x',t')$ 是 x' 和 t' 的函数。代式(8)进入式(12)，可得到

$$-\varphi\frac{\partial\theta}{\partial t'}+\varphi\left(\frac{\partial\theta}{\partial x'}\right)^2+\frac{\partial^2\varphi}{\partial x'^2}+b\varphi^3=ax'\varphi \tag{13}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t'}+2\frac{\partial\varphi}{\partial x'}\frac{\partial\theta}{\partial x'}+\varphi\frac{\partial^2\theta}{\partial x'^2}=0 \tag{14}$$

现在让

$$\varphi(x',t')=\varphi(\xi),\quad \xi=x'-u(t'),\quad u(t')=a(t')^2+vt'+d \tag{15}$$

这里 $u(t')$ 描述了 $\varphi(x',t')$ 的加速运动特性。在 $\xi\to\infty$ 时的边界条件要求 $\varphi(\xi)$ 迅速趋近于 0。在这种情况下，式(14)应写成

$$-\dot{u}\frac{\partial\varphi}{\partial\xi}+2\frac{\partial\varphi}{\partial\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi}+\varphi\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2}=0 \tag{16}$$

此处 $\dot{u}=\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t'}$。如果 $2\partial\theta/\partial\xi-\dot{u}\neq0$，则方程式(16)可写成

$$\varphi^2=\frac{g(t')}{(\partial\theta/\partial\xi-\dot{u}/2)}\quad 或\quad \frac{\partial\theta}{\partial x'}=\frac{g(t')}{\varphi^2}+\frac{\dot{u}}{2} \tag{17}$$

对式(17)积分可得

$$\theta(x',t')=g(t')\int_0^{x'}\frac{\mathrm{d}x''}{\varphi^2}+\frac{\dot{u}}{2}x'+h(t') \tag{18}$$

这里 $h(t')$ 是一个未确定的积分常数。从方程式(18)可得

$$\frac{\partial\theta}{\partial t'}=\dot{g}(t')\int_0^{x'}\frac{\mathrm{d}x'}{\varphi^2}-\frac{g\dot{u}}{\varphi^2}+\frac{g\dot{u}}{\varphi^2}\Big|_{x'=0}+\frac{\ddot{u}}{2}x'+\dot{h}(t') \tag{19}$$

代式(18)和式(19)进入式(13)可得

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial(x')^2}=\left[a+\frac{\ddot{u}}{2}x'+\dot{h}(t')+\frac{\dot{u}^2}{4}+\dot{g}\int_0^{x'}\frac{\mathrm{d}x}{\varphi^2}+\frac{g\dot{u}}{\varphi^2}\Big|_{x'=0}\right]\varphi-b\varphi^3+\frac{g^2}{\varphi^3} \tag{20}$$

由于 $\frac{\partial^2\varphi}{\partial(x')^2}=\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}\xi^2}$，则它本身仅是 ξ 的函数。为了让式(20)的右边也仅是 ξ 的函数，则必须使 $g(t')=g_0=\text{constant}$。

$$a+\frac{\ddot{u}}{2}x'+\dot{h}(t')+\frac{\dot{u}^2}{4}+\frac{g\dot{u}}{\varphi^2}\Big|_{x'=0}=\bar{V}(\xi) \tag{21}$$

可以假设 $V_0(\xi)=\bar{V}(\xi)-\beta$，这里 β 是一个任意常数，于是有

$$a=V_0(\xi)-\frac{\ddot{u}}{2}x'+\left[\beta-\frac{g\dot{u}}{\varphi^2}\Big|_{x'=0}-\dot{h}(t')-\frac{\dot{u}^2}{4}\right] \tag{22}$$

显然，在这里讨论的问题中 $V_0(\xi)=0$，于是式(19)中方括号内的函数仅是 t' 的函数，代式(21)进入式(19)可得

$$\frac{\partial^2\tilde{\varphi}}{\partial\xi^2}=\beta\tilde{\varphi}-b\tilde{\varphi}^3+\frac{g_0^2}{\tilde{\varphi}^3} \tag{23}$$

此式表明当 β 和 g 是常数时，$\tilde{\varphi}=\varphi(\xi)$ 是式(23)的解。对于较大的 $|\xi|$，可以假设 $|\tilde{\varphi}|\le\beta/|\xi|^{1+\Delta}$，此处 Δ 是一个小常数。为了保证 $\mathrm{d}^2\tilde{\varphi}/\mathrm{d}\xi^2$ 和 $\tilde{\varphi}$ 在 $|\xi|\to\infty$ 时是接近于零的，唯有的方法是使在式(23)中相应于 $g_0=0$ 的解是稳定的。于是应选择 $g_0=0$，则可得到

$$\frac{\partial\theta}{\partial x'}=\frac{\dot{u}}{2} \tag{24}$$

于是从式(21)可得到

$$ax'=-\frac{\ddot{u}}{2}x'+\beta-\dot{h}(t')-\frac{\dot{u}^2}{4},$$
$$h(t')=\left(\beta-\frac{1}{4}\upsilon^2\right)t'-\frac{4}{3}a^2(t')^3+\upsilon a(t')^2 \tag{25}$$

代式(26)进入式(18)和式(19)，可得到

$$\theta=\left(at'+\frac{1}{2}\upsilon\right)x'+\left(\beta-\frac{1}{4}\upsilon^2\right)t'-\frac{4}{3}a^2(t')^3+\upsilon a(t')^2 \tag{26}$$

利用以上结果，从式(23)可得到

$$\frac{\partial^2\tilde{\varphi}}{\partial\xi^2}-\beta\tilde{\varphi}+b\tilde{\varphi}^3=0 \tag{27}$$

当 $\beta>0$ 时，方程式(27)的解具有如下形式

$$\tilde{\varphi}=\sqrt{\frac{2\beta}{b}}\operatorname{sech}\left(\sqrt{\beta}\xi\right) \tag{28}$$

于是可以求出它们的解为

$$\phi(x,t)=\left(\frac{2\beta}{b}\right)^{\frac{1}{2}}\operatorname{sech}\left\{\left[\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}x+\frac{2at^2-vt-d'}{\hbar}\right]\right\}\cdot\exp\left\{i\left[\left(\frac{at}{\hbar}+\frac{1}{2}v\right)\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}x+\left(\beta-\frac{v^2}{4}\right)\frac{t}{\hbar}-\frac{4a^2t^3}{3\hbar^3}-\frac{vat^2}{\hbar}\right]\right\} \tag{29}$$

其中，

$$\theta=\left(at'+\frac{1}{2}v\right)x'+\left(\beta-\frac{v^2}{4}\right)t'-\frac{4}{3}a^2(t'^3)+vat'^2 \tag{30}$$

这里 a，d 和 β 都是一些常数，解式(29)是一个孤子解，但它的振幅、速度和频率与前面的孤子相比都发生了变化。可证明微观粒子是十分稳定的。其运动速度为 $v_g=2v-2at/\hbar$，即做匀加速运动，其加速度为 $-2a/\hbar$。应用这个孤子解可解释微观粒子的一些非平衡态特征。

而这孤子都具有确定的能量。因此它们都是具有颗粒特性的粒子。其粒子局域的原因是由于系统的哈密顿算符或动力学方程中存在的非线性相互作用项 $\lambda|\phi|^2\phi$ 抑制了其色散动能项的缘故。如果对(12)式作变换：

$$\phi(x',t')=\phi'(\hat{x},\hat{t})\mathrm{e}^{-i\alpha\hat{x}\hat{t}-i\alpha^2\hat{t}^3/3}$$

$x'=\hat{x}-a\hat{t}^2=\sqrt{2m}(x/\hbar)$，$t'=\tilde{t}=t/\hbar$，$a$ 为一常数，则(12)式变成了 $i\phi'_{\hat{t}}+\phi'_{\hat{x}\hat{x}}+b|\phi'|^2\phi'=0$，当选择 $b=2$ 时，Chen 和 Liu 等人[35-36]求得其孤子解为

$$\phi=2\eta\operatorname{sech}\left\{2\eta\left(x'+2\alpha t'^2-4\xi t'-x'_0\right)\right\}\cdot\exp\left\{i(4at'+r)\frac{x'}{\hbar}+\frac{A}{\hbar}t'-\frac{B}{\hbar}t'^2-\frac{C}{\hbar}t'^3\right\}\cdot\left\{i\left[2\xi x'\cos2\alpha(t'-t'_0)-\frac{\xi^2}{\alpha}\sin\sqrt{4\alpha}(t'-t'_0)\right]+4\eta^2(t'-t'_0)+\theta'_0\right\} \tag{31}$$

这也是与式(10)或式(30)有基本相同性质的波包型孤子，只是其相位和振幅有所不同，并与粒子的速度和位置及时间相关。此解与式(4)完全不同。

如果再改变外势场，使 $V(x)=kx^2+A(t)x+B(t)$ 时，庞小峰求出了(6)式的解，可写成：

$$\phi=\varphi(x-u(x))\mathrm{e}^{i\theta(x,t)} \tag{32}$$

其中，

$$\varphi(x-u(x))=\sqrt{\frac{2B}{b}}\operatorname{sech}(ax-u(t))$$

$$u(t)\equiv 2\cos\left(2\sqrt{k}t+\beta\right)+u_0(t)$$

$$\begin{aligned}\theta(x,t)=&\left[-2\sqrt{k}\sin(2\sqrt{k}t+\beta)+\frac{u_0}{2}\right]x+\lambda_0 t\\&-\int_0^t\left\{\left[-k\left(2\cos 2\sqrt{k}t'+\beta+u_0(t')\right)\right]^2+B(t')\right.\\&\left.+B(t')+\left[-2\sqrt{k}\sin\left(2\sqrt{k}t'+\beta\right)+\frac{u_0}{2}\right]\right\}\mathrm{d}t'+\theta_0\end{aligned}$$

如果 $A(t)=B(t)=0$，并设 $V(x')=\alpha^2x'^2$，则 Chen 和 Liu 等人[35-36]求得其孤子解为(见式(33))

它们仍是一个波包型孤子解。但此孤子以一个正比于 k 的频率振荡。显然，它是不同于在线性量子力学中的上述色散波解。在其他外势场下，方程(6)式也有孤子解。这些结果告诉我们一个事实，如果计算粒子之间或粒子与背景场的非线性相互作用，则粒子始终是一个孤子，即它是局域的，不论外势场如何变化，微观粒子的局域性不会改变，外势场仅引起了孤子的状态变化。于是微观粒子现出我们所希望的局域特性，其原因是，能使波发生畸变的非线性作用抑制或阻止了由动能项引起的色散效应。如果它们能相互平衡，则局域的微观粒子是十分稳定的。

从线性量子力学中微观粒子运动的基础上，我们考虑了粒子之间的非线性作用，用非线性 Schrödinger 方程研究了微观粒子的特点，发现在此情况下，微观粒子被局域，具有波－粒二象性，明显不同于在线性量子力学中微观粒子的特性。由于非线性相互作用广泛存在于物理系统中，则用非线性 Schrödinger 方程描写微观粒子是正确的。

3. 局域的粒子处于能量最低态

现来考查原来线性薛定谔方程中计入非线性相互作用后为什么粒子就能局域？局域了的粒子是否处于一个稳定的状态上等问题，以此来论证理论的正确性。

显然，在一维系统时如果设(8)式的解用下式的定态波函数表示

$$\varphi(x,t)=\phi(x)\exp[iEt] \tag{34}$$

其中 $\varphi(x)$ 满足式(6)，在一维时的(6)式可写成

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}U_{\mathrm{eff}}(\varphi) \tag{35}$$

这里

$$U_{\mathrm{eff}}(\varphi)=\frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{b}{2}|\varphi|^4-(V-E)|\varphi|^2\right)$$

其中，$U_{\mathrm{eff}}(\varphi)$ 与 φ 关系类似于如图 2，即 $V>E$ 及 $V>0$ 和 $b<0$ 时是一个双阱势，有两个极小值，即此有效势场提供了两个基态，分别为 $\phi_0=\pm\left((V-E)/2b\right)^{1/2}$。使粒子能量不再弥散于整个空间，而是自陷成了一个孤子，局域在质心位置 x_0 处。粒子处在这两个基态的能量为 $-(V-E)^2/2b<0$。但是如果不考虑非线性相互作用，即 $b=0$，则又回到线性量子力学。此时，$\varphi(x)$ 的基态 $\varphi_0'=0$，其粒子的基态能量也为零。显然，在这两种状态之间存在一个能隙，它使非线性系统中的微观粒子能量降低，所减少的能量使

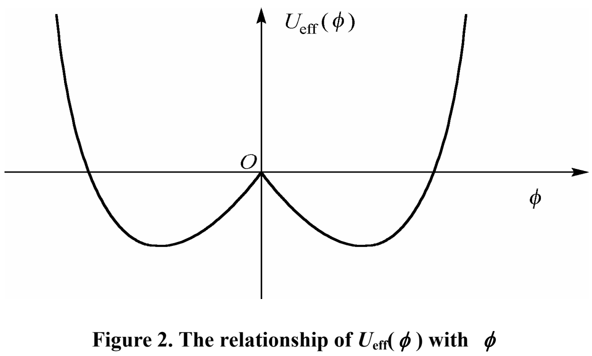

Figure 2. The relationship of $U_{\mathrm{eff}}(\phi)$ with ϕ
图 2. $U_{\mathrm{eff}}(\phi)$ 与 ϕ 的关系曲线

$$\phi=2\eta\operatorname{sech}\left\{2\eta x'-\frac{4\xi\eta}{\alpha}\sin\left[2\sqrt{\alpha}(t'-t_0')\right]\right\}\exp\left\{i\left[2\xi x'\cos 2\alpha(t'-t_0')-\frac{\xi^2}{\alpha}\sin\sqrt{4\alpha}(t'-t_0')+4\eta^2(t'-t_0')+\theta_0'\right]\right\} \tag{33}$$

微观粒子束缚为局域的孤子，即为孤子的束缚能或结合能。这完全是由于粒子受到了非线性相互作用的缘故。这就是说微观粒子受到的非线性相互作用能完全被用来使自己束缚为一孤子。这意味着，没有这个非线性吸引相互作用能，孤子是绝对不能形成的，粒子也不能局域。因此可以认为非线性相互作用是微观粒子局域的必要条件。而处于局域状态的粒子的能量降低，从而处于一个稳定状态之中。这表明该理论是正确的。当$V>0$，$|V|<E$，时，就不大可能形成这类孤子。若$V<0$时，在$V>E$时也不大可能形成稳定的孤子,只有在$|V|<|E|$时,才有可能形成一个稳定孤子,因为这时也可以提供两个不同的基态。由此得到，对于势垒情况，仅当$V<E$时，才有可能由非线性作用与色散作用提供两个不同基态，去阻止能量的弥散，形成上述性质的稳态孤子。

但对排斥型非线性自相互作用(即$b<0$)，式(6)变为

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi-|b||\phi|^2\phi=V(x,t)\phi \qquad (36)$$

一般来讲，此方程虽然不能形成与上述的孤子性质相同的孤子，但如果适当选择$V(x,t)=V(x)$或常数，也可以得到 kink 孤子解。若将定态解式(34)代入上式可得

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi-|b|\varphi^3+\left(E-V(x)\right)\varphi=0 \qquad (37)$$

当V与x无关，且$0<V<E$时，式(37)的解为

$$f=\frac{\sqrt{2(E-V)}}{|b|}th\left[\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}\left(x-x_0\right)\right] \qquad (38)$$

这是 kink 孤子，而不是上述的波包型孤子解。因此孤子的性质发生了变化。

但当$|V|>E$而$V<0$时，式(37)也有式(38)形式的解。同时还可能出现形状刚好与波包型孤子形状反倒的暗孤子解。这种孤子在光纤中发现过。

4. 微观粒子的能量、动量和质量及所具有的守恒定律

(1) 微观粒子的质量、能量和动量

如上所述，用非线性 Schrödinger 方程描写微观粒子时，微观粒子具有波－粒二象性，或者它具有一个粒子的特性。于是它有确定就的质量，能量和动量等属性。现在来决定由非线性 Schrödinger 方程描写的微观粒子的能量、动量和质量及它们的守恒定律。对应于微观粒子的动力学方程式(6)的系统的哈密顿量和拉格朗日密度函数可分别用

$$H'(\phi)=+\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\phi|^2-\frac{b}{2}|\phi|^2\left|\phi^*\right|^2+V(\boldsymbol{r},t)|\phi|^2 \qquad (39)$$

相应的系统的拉格朗日刻度函数为

$$\begin{aligned}L'(\phi)=&\frac{i\hbar}{2}\left(\phi^*\phi_t-\phi\phi_t^*\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\phi\cdot\nabla\phi^*\right)\\&-V(\boldsymbol{r},t)\phi^*\phi+\frac{1}{2}b\left(\phi^*\phi\right)^2\end{aligned} \qquad (40)$$

其中系统的哈密顿量和拉格朗函数分别为

$$H=\int H'(\phi)\mathrm{d}z \qquad 和 \qquad L=\int L'(\phi)\mathrm{d}z$$

这里$H'=\mathcal{H}$，$L'=\mathcal{L}$。因此，不论哈密顿算符或哈密顿量还是拉格朗日函数都是粒子状态波函数ϕ的非线性函数，从而突破了原有量子力学中哈密顿算符与粒子状态波函数无关的基本假设。这是非线性 Schrödinger 方程描写微观粒子不同于线性量子力学的最根本点。

于是可以将系统的粒子数密度定义为

$$\rho=|\phi|^2 \qquad (41)$$

微观粒子的动量密度定义为

$$p=-i\left[\phi^*\frac{\partial\phi}{\partial x'}-\phi\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\right] \qquad (42)$$

粒子流密度定义为

$$J=i\left[\phi^*\frac{\partial\phi}{\partial x'}-\phi\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\right] \qquad (43)$$

粒子所具有的能量密度$\in$为

$$\in=+\left|\frac{\partial\phi}{\partial x'}\right|^2-\frac{b}{2}|\phi|^4+V|\phi|^2 \qquad (44)$$

非线性 Schrödinger 方程式(6)在$V(x,t)=0$时的解(10)式是一个非拓扑型波包孤子, 这微观粒子具有一个质心，并局域于x_0，它有确定的能量、动量和质量。

从以上粒子数或质量密度，动量密度和能量密度的定义，从式(10)能求出此微观粒子的能量、动量和质量分别为：

$$M_{so1}=N_s=\int|\phi|^2\,\mathrm{d}x=\frac{2A_0\hbar}{\sqrt{mb}}$$

$$P=i\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\phi^*\phi_x-\phi\phi_x^*\right)\mathrm{d}x=2mv_eN_\zeta$$

$$E=\int\left[\left|\phi_x\right|^2-\frac{b}{2}|\phi|^4\right]\mathrm{d}x=E_0+\frac{1}{2}\hat{M}_{sol}v_e^2$$

这里，$M_{so1}=N_s=2\sqrt{2}A_0\hbar\big/\sqrt{mb}$ 是微观粒子的有效质量密度。由此看来，这些微观粒子都具有确定的能量、动量和质量值。同时，在未受外势场作用时，其动量和能量都由粒子的群速度 *Ve* 决定。在以此群速度的运动中，粒子能量、动量和质量始终不改变，其大小完全由粒子的基本属性决定，并是与时间无关的常数。这意味着粒子的大小或体积不随时间而变化，这正好表现了微观粒子的颗粒特性。这和线性量子力学微观粒子迥然不同，并很类似于宏观粒子。因此，微观粒子在这种情况下不再弥散于整个空间，而具有明显的粒子特性。

(2) 微观粒子具有的能量、动量和质量守恒定律

对于式(6)，从(41)～(44)式可求得

$$\frac{\partial\rho}{\partial t'}=\frac{\partial j}{\partial x'} \tag{45}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial x'}\Bigg[&2\left(\frac{\partial\phi}{\partial x'}\right)b|\phi|^4+2V|\phi|^2-\left(\phi^*\frac{\partial^2\phi}{\partial x'^2}+\phi\frac{\partial^2\phi^*}{\partial x'^2}\right)\\&+2iV\left(\phi^*\frac{\partial\phi}{\partial x'}-\phi\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\right)\Bigg]\end{aligned} \tag{46}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial x'}\Bigg[&p\rho+i\left(\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\frac{\partial^2\phi}{\partial x'^2}-\frac{\partial\phi}{\partial x'}\frac{\partial^2\phi^*}{\partial x'^2}\right)\\&-i\left(\phi^*\frac{\partial\phi}{\partial x'}-\phi\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\right)\Bigg]\end{aligned} \tag{47}$$

利用式(6)可立即得到

$$\begin{cases}\dfrac{\partial M}{\partial t'}=\dfrac{\partial}{\partial t'}\displaystyle\int\rho\,\mathrm{d}x'=0 & M=\mathrm{const}\\[2ex] \dfrac{\partial P}{\partial t'}=\dfrac{\partial}{\partial t'}\displaystyle\int p\,\mathrm{d}x'=0,\ \dfrac{\partial E}{\partial t'}=\dfrac{\partial}{\partial t'}\displaystyle\int\in\mathrm{d}x'=0\end{cases} \tag{48}$$

它们分别表示质量、动量和能量守恒。这就是说，在非线性相互作用存在的非线性量子系统中的微观粒子和其他物质一样，遵守普遍的物质运动定律。

当 V 为一个常数时，对于式(6)的微观粒子具有质量、动量和能量分别为

$$M_s=\int_{-\infty}^{+\infty}|\phi|^2\,\mathrm{d}x'=\frac{2A_0\hbar}{\sqrt{mb}},\ \mathrm{P}=2mv_eM_s$$

$$\begin{aligned}E&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left|\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|^2-\frac{b}{2}|\phi|^4+V|\phi|^2\right]\mathrm{d}x'\\&=E_0+VM_s+\frac{1}{2}M_sv_e^2\end{aligned}$$

即它的能量由粒子的动能、束缚能和相互作用能组成。

当然，一些微观粒子也具有一定的电荷、自旋等基本特征。因此由非线性量子力学描述的对象，具有物质的一般属性。

(3) 非线性 Schrödinger 方程相关的 Noether 原理决定的一些守恒定律

实践证明，由非线性 Schrödinger 方程式(6)描述的微观粒子，除具有以上守恒定律外，还存在多个守恒定律，后者可从与非线性 Schrödinger 方程相关的 Noether 定理，在不同变换群下的系统作用量的不变性中推导出来。现在首先给出由 Gelfand，Fomin's 和 Bulman Kumei 等人(见 C. Sulem 和 P. L. Sulem 的书[37]和其中的参数文献)建立的与非线性 Schrödinger 方程式(6)相关的 Noether 原理。

为简化计算，这里引入以下表示 $\bar{\xi}=(t,x)$，$\bar{\xi}=(t,x)=(\xi_0,\xi_1,\cdots,\xi_a)$ 和 $\Phi=(\Phi_1,\Phi_2)=(\phi,\phi^*)$。

根据非线性 Schrödinger 方程式(6)所对应拉格朗日函数 L' 式(39)，可把系统的作用量可表为

$$\mathrm{S}\{\phi\}=\int_{t_0}^{t_1}\int L'\left(\phi,\nabla\phi,\phi_t,\phi^*,\nabla\phi^*,\phi_t^*\right)\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t$$

或 $$\mathrm{S}\{\phi\}=\int_{\mathrm{D}}\int_{x'}^{\infty}L'(\Phi,\partial\Phi)\,\mathrm{d}\bar{\xi} \tag{49}$$

这里 $L'=\mathcal{L}$ 是拉格朗日密度函数。在依赖于小参量 ε 的变换 T^ε 下，则上述量有变换：

$$\bar{\zeta}\to\tilde{\zeta}\left(\bar{\zeta},\Phi,\varepsilon\right),\Phi\to\tilde{\Phi}\left(\bar{\zeta},\Phi,\varepsilon\right),$$

这里 $\tilde{\zeta}$ 和 $\tilde{\Phi}$ 是被假设为对于 ε 是可微分的。当 $\varepsilon=0$ 时，其变换退化为么正变换。对于一个无穷小的 ε，则有 $\tilde{\zeta}=\bar{\zeta}+\delta\varepsilon,\tilde{\Phi}=\Phi+\delta\Phi$。在变换 T^ε 下，则有 $\Phi\left(\bar{\zeta}\right)\to\tilde{\Phi}\left(\tilde{\zeta}\right)$ 的变化，而积分区域 D 变成为 $\tilde{D}$，其作

用量为

$$S\{\phi\} \to \tilde{S}\{\tilde{\phi}\} = \int_{\tilde{D}} \int_{x^1}^{\infty} L'\left(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi}\right) \mathrm{d}\tilde{\zeta}$$

这里 $\tilde{\partial}$ 表示了相对于 $\tilde{\zeta}$ 的微分。在 ε 的一阶极限变换下，其变化 $\delta S = \tilde{S}\left\{\tilde{\phi}\right\} - S\left\{\phi\right\}$ 可写成

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{\mathrm{D}} \int_{x^1}^{\infty} \left[L'\left(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi}\right) - L'\left(\tilde{\Phi}, \partial\tilde{\Phi}\right) \right] \mathrm{d}\bar{\xi} \\ &+ \int_{\mathrm{D}} \int_{x^1}^{\infty} L'\left(\Phi, \partial\Phi\right) \sum_{\upsilon=0}^{\mathrm{d}} \frac{\partial \delta\xi_\upsilon}{\partial \xi_\upsilon} \mathrm{d}\bar{\xi}\end{aligned} \tag{50}$$

此处使用了 Jacobian 展开近似：

$$\frac{\partial\left(\tilde{\xi}_0, \ldots, \tilde{\xi}_d\right)}{\partial\left(\xi_0, \ldots, \xi_d\right)} = 1 + \sum_{\upsilon=0}^{d} \frac{\partial \delta\xi_\upsilon}{\partial \xi_\upsilon}$$

在上式右边的展开式中的第二项 $L'\left(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi}\right)$ 是用 $L'\left(\Phi, \partial\Phi\right)$ 代替。现定义：

$$\begin{aligned}\delta\tilde{\Phi}_i &= \tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) - \tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) = \partial_\upsilon \Phi_i \delta\xi_\upsilon + \delta\Phi_i\left(\xi\right) \\ \tilde{\partial}_\upsilon \tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) - \partial_\upsilon \Phi_i\left(\bar{\xi}\right) &= \left(\tilde{\partial}_\upsilon - \partial_\upsilon\right) \tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) \\ &+ \partial_\upsilon \left[\tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) - \Phi_i\left(\bar{\xi}\right) \right]\end{aligned} \tag{51}$$

这里

$$\partial_\upsilon = \frac{\partial \bar{\xi}_\mu}{\partial \xi_\upsilon} \tilde{\partial}_\mu = \left(\delta_{\upsilon\mu} + \frac{\partial \delta\xi_\mu}{\partial \xi_\upsilon} \right) \tilde{\partial}_\mu = \tilde{\partial}_\upsilon + \frac{\partial \delta\xi_\mu}{\partial \xi_\upsilon} \tilde{\partial}_\mu$$

则有

$$\begin{aligned}&L'\left(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi}\right) - L'\left(\Phi, \partial\Phi\right) \\ &= \frac{\partial L'}{\partial \Phi_{\mathrm{i}}} \left[\tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) - \Phi_{\mathrm{i}}\left(\bar{\xi}\right) \right] + \frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \left[\tilde{\partial}_\upsilon \tilde{\Phi}_i\left(\bar{\xi}\right) - \partial_\mu \Phi_i\left(\bar{\xi}\right) \right] \\ &= \frac{\partial L'}{\partial \Phi_{\mathrm{i}}} \partial\Phi_{\mathrm{i}} + \partial_\mu \left(L' \delta\xi_\upsilon \right) - L' \frac{\partial \delta\xi_\upsilon}{\partial \xi_\upsilon} + \\ &\partial_\upsilon \left[\frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \right] \delta\Phi_{\mathrm{i}} - \partial_\mu \left[\frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \right] \delta\Phi_{\mathrm{i}}\end{aligned}$$

于是式(50)现用

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_D \int_{x'}^{\infty} \left\{ \frac{\partial L'}{\partial \Phi_i} - \frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left[\frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \right] \right\} \delta\Phi_{\mathrm{i}} \,\mathrm{d}\bar{\xi} \\ &+ \int_D \int_{x'}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left[L' \delta\xi_\upsilon + \frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \delta\Phi_{\mathrm{i}} \right] \mathrm{d}\bar{\xi}\end{aligned} \tag{52}$$

代替，在此推导中使用了关系：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left(L' \delta\xi_\upsilon \right) &= L' \frac{\partial \delta\xi_\upsilon}{\partial \xi_\upsilon} + \frac{\partial L'}{\partial \Phi_{\mathrm{i}}} \partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}} \delta\xi_\upsilon \\ &+ \frac{\partial^2 L'}{\partial\left(\partial_\mu \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \partial^2{}_{\upsilon\mu} \Phi_{\mathrm{i}} \delta\xi_\upsilon,\end{aligned},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \partial_\upsilon \int_{x'}^{\infty} \delta\Phi_{\mathrm{i}} &= \frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left[\frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \delta\Phi_{\mathrm{i}} \right] \\ &- \frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left[\frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_{\mathrm{i}}\right)} \delta\Phi_{\mathrm{i}} \right] \delta\Phi_{\mathrm{i}}\end{aligned}$$

使用 Euler-Lagrange 方程，则在 δS 的表示式右边第一项趋于 0，于是可得到 Noether 定理，即(A)如果作用量式(49)在独立和相关的变量作无穷小变换：$\phi \to \phi + \delta\phi, \bar{\xi} \to \bar{\xi} + \delta\bar{\xi}$，这里 $\bar{\xi} = \left(t, x_1 \ldots x_d\right)$ 下是不变的，利用上面定义的 $\tilde{\Phi}$，则下列守恒定律成立：

$$\frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left[L' \delta\xi_\upsilon - \frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_i\right)} \delta\Phi_i \right] = 0, \text{ 或}$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_\upsilon} \left[L' \delta\xi_\upsilon + \frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_\upsilon \Phi_i\right)} \left(\delta\Phi_i - \frac{\partial \Phi_i}{\partial \zeta_\mu} \delta\xi_\mu \right) \right] = 0 \tag{53}$$

(B)如果在无穷小变换：

$$\begin{aligned}&t \to \bar{t} = t + \delta t\left(x, t, \phi\right), x \to \bar{x} = x + \delta x\left(x, t, \phi\right), \\ &\phi\left(x, t\right) \to \bar{\phi}\left(\bar{t}, \bar{x}\right) = \phi\left(t, x\right) + \delta\phi\left(t, x\right),\end{aligned}$$

下其作用量是不变的，则

$$\begin{aligned}\int \Bigg[&\frac{\partial L'}{\partial \phi_t} \left(\partial_t \phi \partial_t + \nabla\phi \cdot \delta\boldsymbol{x} - \delta\phi \right) \\ &+ \frac{\partial L'}{\partial \phi_t^*} \left(\partial_t \phi^* \partial_t + \nabla\phi^* \cdot \delta\boldsymbol{x} - \delta\phi^* \right) - L\delta t \Bigg] \mathrm{d}x\end{aligned}$$

是一个守恒量。

对于非线性 Schrödinger 方程式(6)，从式(53)可得到

$$\frac{\partial L'}{\partial \phi_t} = \frac{i}{2} \phi^*, \quad \frac{\partial L'}{\partial \phi_t^*} = -\frac{i}{2} \phi$$

这里 $L' = \mathcal{L}$ 是式(39)。于是以下的几个守恒定律便可从以上的 Noether 定理得出。

(A) 在时间平移的不变性和能量守恒定律

作时间平移变换：$t \to t + \delta t$，则 $\delta x = \delta\phi = \delta\phi^* = 0$，于是作用量式(49)是不变的，则式(53)变成

$$\partial_t\left[\nabla\phi\cdot\nabla\phi^*-\frac{b}{2}\left(\phi\phi^*\right)^2+V(x,t)\phi^*\phi\right]$$
$$-\nabla\cdot\left(\phi_t\nabla\phi^*+\phi_t^*\nabla\phi\right)=0$$

这结果可导致能量守恒，即

$$E=\int\left(\nabla\phi\cdot\nabla\phi^*-\frac{b}{2}\left(\phi^*\phi\right)^2+V(x,t)\phi^*\phi\right)\mathrm{d}x \tag{54}$$
$$=\text{constant}$$

(B) 相移不变性或规范不变性和质量守恒定律

作相移变换 $\bar{\phi}=\mathrm{e}^{i\theta}\phi$ 时，上式的作用量是不变的，则对于给定的无穷小所引起的变化，在 $\delta t=\delta x=0$ 时可表示 $\delta\phi=i\theta\phi$ 。由此从(53)式可推出：

$$\partial_t|\phi|^2+\nabla\left\{i\left(\phi\nabla\phi^*-\phi^*\nabla\phi\right)\right\}=0$$

于是，便可导致质量或粒子数守恒，即

$$N=\int|\phi|^2\mathrm{d}x=\text{constant}$$

和连续性方程

$$\frac{\partial N}{\partial t}=\nabla\cdot\boldsymbol{j} \tag{55}$$

成立，这里 $\boldsymbol{j}$ 是质量流密度可写成

$$\boldsymbol{j}=-i\left(\phi\nabla\phi^*-\phi^*\nabla\phi\right)$$

(C) 空间平移不变性和动量守恒定律

如果在一个无穷小的空间变换 $x\to x+\delta x$ (此时有 $\delta t=\delta\phi=\delta\phi^*=0$)下，若其作用量是不变的，则从式(53)可得

$$\partial_t\left[i\left(\phi\nabla\phi^*-\phi^*\nabla\phi\right)+\nabla\cdot\left\{2\left(\nabla\phi^*\times\nabla\phi+\nabla\phi\times\nabla\phi^*+L\right)\right\}\right]$$
$$=0$$

从此式可得出以下动量守恒定律：

$$\boldsymbol{P}=i\int\left(\phi\nabla\phi^*-\phi^*\nabla\phi\right)\mathrm{d}x=\text{constant.}$$

此时微观粒子的质心是被定义为

$$\langle x\rangle=\frac{1}{N}\int x|\phi|^2\,\mathrm{d}x$$

则有

$$N\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}=\int x\partial_t|\phi|^2\,\mathrm{d}x$$
$$=-\int x\nabla\left[i\left(\phi\nabla\phi^*-\phi^*\nabla\phi\right)\right]\mathrm{d}x \tag{56}$$
$$=\int i\left(\phi\nabla\phi^*-\phi^*\nabla\phi\right)\mathrm{d}x=\boldsymbol{P}=-\boldsymbol{J}=-\int\boldsymbol{j}\mathrm{d}x$$

此式类似于在经典理论中的动量的定义。由式(56)可知由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子具有经典粒子的特性。

(D) 在空间转动下的不变性和角动量守恒定律。

如果在系统围绕着对称轴 $\boldsymbol{I}$ 作一个无穷小 $\delta\theta$ 的转动时，其作用量是不变的(这时 $\delta t=\delta\phi=\delta\phi^*=0$ 和 $\delta\boldsymbol{x}=\delta\theta\boldsymbol{I}\times\boldsymbol{x}$)，则可导致角动量

$$\boldsymbol{M}=i\int\boldsymbol{x}\cdot\left(\phi^*\nabla\phi-\phi\nabla\phi^*\right)\mathrm{d}x$$

的守恒。

(E) Galilean 不变性。如果在 Galilean 变换：

$$x\to x''=x-\upsilon t,\ t\to t''=t,$$
$$\phi(x,t)\to\phi''(x'',t'')=-i\left[\frac{1}{2}\upsilon x''+\frac{1}{2}\vec{\upsilon}\cdot\vec{\upsilon}t''\right]\phi(x,t)$$

下，其作用量式(49)是不变的，则非线性 Schrödinger 方程式(6)能保持是不变。对于一个无穷小速度 υ ，则有 $\delta\boldsymbol{x}=-\upsilon t,\delta t=0$ 和 $\delta\hat{\phi}=\phi''(x'',t'')-\phi(x,t)=-(i/2)\cdot\upsilon x\phi(x,t)$ 。在这种情况下，对式(53)过空间变量积分后可导致式(56)的动量守恒。这意味着微观粒子的质心速度是一个常数。

我们还可得出其它守恒定律，由此可知，非线性量子力学有多个不同的不变性和守恒定律。这表明非线性量子力学空间和时间具有多种对称性。

5. 微观粒子的位置及其运动规律

现来研究在非线性 Schrödinger 方程描写的微观粒子在外势场作用下在时间－空间中的位置变化和运动规律。

(1) 微观粒子的质心位置与速度

可以证明由 Schrödinger 方程式(6)所描述的微观粒子(孤子)是按经典规律运动的，即在无外势场时或外势场为常数时，它作匀速运动。在与位置相关的外势场作用时，它作匀加速运动；在弹性力场作用时粒子具有振荡的性质，相当于经典谐振子的情况。现来研究这一特性。

从一般的非线性 Schrödinger 方程式(6)和它的共轭式：

$$i\hbar\frac{\partial\phi^*}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi^*+b|\phi|^2\phi^*=V\phi^* \tag{57}$$

出发，并设 $t'=t/\hbar$，$x'=x\Big/\sqrt{\hbar^2/2m}$。以上研究得知由这些方程描述的微观粒子具有确定大小，并局域在 $x=x_0$ 处。描述它的波矢或场量 $\phi(x',t')$ 是一个钟型的孤子，则具有 $\left.\frac{\partial\phi}{\partial x'}\right|_{x'=x_0'}=0$，即在 $x'=x_0'$ 时具有的振幅极大值；在 $|x'|\to\infty$ 时有 $\phi(x',t')\to 0$，以及 $\frac{\partial}{\partial t'}\int\phi^*\phi\mathrm{d}x'=0$ 或 $\int\rho(x')\mathrm{d}x'=\text{constant}$ 等特性。这意味着，$\phi^*\phi\mathrm{d}x'=\rho(x')\mathrm{d}x'$ 可被认为在 x' 到 $x'+\mathrm{d}x'$ 的间隔内粒子的有效质量。利用(56)式，则在 $x_0'+vt'$ 时微观粒子的质心则可定义为

$$<x'>=x_0'=\int_{-\infty}^{\infty}\phi^* x'\mathrm{d}\phi\mathrm{d}x'\Big/\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x' \qquad (58)$$

从式(6)和式(50)可以得到

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\frac{\partial\phi}{\partial x'}\mathrm{d}x'\\&=i\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\phi^*\frac{\partial^3\phi}{\partial(x')^3}-\frac{\partial\phi}{\partial x'}\frac{\partial^2\phi^*}{\partial(x')^2}\right)\mathrm{d}x'\right.\\&+\int_{-\infty}^{+\infty}\left[b\left(\phi^*\right)^2\phi\frac{\partial\phi}{\partial x'}\mathrm{d}x'+b\phi^*\phi^2\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\right]\mathrm{d}x'\\&\left.-\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\frac{\partial V}{\partial x'}\phi\mathrm{d}x'\right\}\end{aligned}$$

其中

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\phi^*\frac{\partial^3\phi}{\partial(x')^3}-\frac{\partial\phi}{\partial x'}\frac{\partial^2\phi^*}{\partial(x')^2}\right)\mathrm{d}x'=0$$

$$\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{+\infty}\left[b\left(\phi^*\right)^2\phi\frac{\partial\phi}{\partial x'}\mathrm{d}x'+b\phi^*\phi^2\frac{\partial\phi^*}{\partial x'}\right]\mathrm{d}x'\\&=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\phi^*\right)^2\left(\frac{\partial}{\partial x'}b\right)\phi^2\mathrm{d}x'=0\end{aligned}$$

于是有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\frac{\partial\phi}{\partial x'}\mathrm{d}x'=i\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\frac{\partial V}{\partial x'}\phi\mathrm{d}x' \qquad (59)$$

则微观粒子的质心速度便可定义为

$$\begin{aligned}v_e&=\frac{\mathrm{d}\langle x'\rangle}{\mathrm{d}t}=\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\chi'\phi\mathrm{d}x'\Big/\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x'\right\}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}(\phi^*\chi'\phi+\phi^*\chi'\phi_{t'})\mathrm{d}x'\Big/\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x \qquad (60)\\&=-2i\int_{-\infty}^{\infty}(\phi^*\phi_{x'}\mathrm{d}x'\Big/\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x\end{aligned}$$

(2) 微观粒子按经典规律运动

于是，微观粒子的质心加速度便可定义为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2\langle x'\rangle}{\mathrm{d}(t')^2}&=\frac{\partial^2}{\partial t'^2}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\chi'\phi\mathrm{d}x'\Big/\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x\right\}\\&=-2i\frac{d}{dt}\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi_x\mathrm{d}x'}{\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x'}\end{aligned} \qquad (61)$$

于是有

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle x'\rangle}{\mathrm{d}(t')^2}=-2\frac{\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\left(\frac{\partial V}{\partial x'}\right)\phi\mathrm{d}x'}{\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\phi\mathrm{d}x'}=-2\left\langle\frac{\partial V}{\partial x'}\right\rangle \qquad (62)$$

这里 $V=V(x')$ 是作用于微观粒子的外势场。可在质心位置 $x_0'=\langle x'\rangle$ 处展开 $\frac{\partial V(x')}{\partial x'}$ 为

$$\begin{aligned}\frac{\partial V(x')}{\partial x'}&=\frac{\partial V(x_0')}{\partial x_0'}+\left(x_i'-x_0'\right)\frac{\partial^2 V(x_0')}{\partial x_0'^2}\\&+\frac{1}{2!}\sum_{i,j=1}^{3}\left(x_i'-x_0'\right)\left(x_j'-x_0'\right)\frac{\partial^3 V(x_0')}{\partial x_0'\partial x_i'\partial x_j'}\\&+\cdots\end{aligned}$$

对于上式两边取其期待值，可得

$$\left\langle\frac{\partial V(x')}{\partial x'}\right\rangle=\frac{\partial V(x_0')}{\partial x_0'}+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}\Delta_{ij}\frac{\partial^3 V(x_0')}{\partial x_0'\partial x_i'\partial x_j'}$$

这里

$$\Delta_{ij}=\left\langle\left(x_i'-x_0'\right)\left(x_j'-x_0'\right)\right\rangle=\left\langle\left(x_i'-\langle x_i'\rangle\right)\left(x_j'-\langle x_j'\rangle\right)\right\rangle$$

对于像图 1 和式(10)的非线性 Schrödinger 方程的孤子解来讲，其质心位置是固定在 $\langle x'\rangle=x_0'$ 处的，当仅研究质心的运动特点时，我们可设计相关于质心 x_0' 的相关项，则可期待 $\Delta_{ij}=0$。于是上式可写成

$$\left\langle\frac{\partial V(x')}{\partial x'}\right\rangle=\frac{\partial V(x_0')}{\partial x_0'} \qquad (63)$$

则微观粒子质心的加速度可写成

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle x'\rangle}{\mathrm{d}(t')^2}=-2\frac{\partial V(x')}{\partial x'}=-2\frac{\partial V(x_0')}{\partial x_0'} \qquad (64)$$

则转化为原来的坐标系统中，则可得

$$m\frac{\mathrm{d}^2\langle x\rangle}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{\partial V\langle x\rangle}{\partial\langle x\rangle} \qquad (65)$$

(3) 运动方程的应用

此式与经典力学中宏观粒子的运动方程很相似。这就清楚地表明在非线性量子力学中的微观粒子可以满足经典运动规律式(65)，这就充分体现了由非线性量子力学描述的微观粒子具有明显的粒子特性。显然，这是由于它具有确定的能量、动量、质量带来的结果。

实际上这个结果也可从微观粒子的能量、动量、质量表示式(42)～式(44)及式(6)及在 $|x'|\to\infty$ 时 $\phi(x',t)\to 0$ 等特性中得出。这里不再推导。总之，在非线性量子力学中式(65)是正确的。

运用式(65)，我们可求得的非线性Schrödinger 方程式(9)的自由微观粒子解(10)式和受恒定外势场 $V(x')=$ 常数作用的粒子解(30)式，由 $V(x)=0$，则它们的质心加速度 $\frac{\mathrm{d}^2\langle x\rangle}{\mathrm{d}t^2}=0$。即它们作匀速运动。当 $V(x')=ax'$ 的外势场，其解为式(31)。则微观粒子的质心加速度为

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle x'\rangle}{\mathrm{d}(t')^2}=-2a=\mathrm{Const} \tag{66}$$

即作匀加速运动。对于处于外势场 $V(x')=a^2x'^2$ 的微观粒子，其解为式(33)。这里 η 是孤子的振幅。ξ 是与微观粒子速度相关的常数。x_0' 是微观粒子的质心位置。t_0' 和 θ_0' 是常数。在这种情况微观粒子的质心加速度为

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle x'\rangle}{\mathrm{d}(t')^2}=-4a^2x_0' \tag{67}$$

因此，在这条件下微观粒子是作谐振运动，其所受到“胡克力”与 $-4a^2x_0'$ 成正比。这些结果却与宏观粒子的运动规律很类似。

6. 非线性量子力学中的微观粒子的拉格朗日方程和哈密顿方程

(1) 微观粒子的拉格朗日方程

在由非线性 Schrödinger 方程式(6)描述的非线性系统是一个可积系统，即该系统的特性可用哈密顿量和拉格朗日函数(39)式来表征。此时微观粒子的状态波函数 ϕ 和 ϕ^* 是系统的动力学量，它们满足 Poisson 括号：

$$\left\{\phi^{(a)}(x),\phi^{(b)}(y)\right\}=i\delta^{ab}\delta(x-y) \tag{68}$$

这里

$$\{A,B\}=i\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\delta A\delta B}{\delta\phi\delta\phi^*}-\frac{\delta B\delta A}{\delta\phi\delta\phi^*}\right) \tag{69}$$

在 $A(\phi)=0$ 时的式(6)所对应的 Lagrangian 密度函数 $\mathcal{L}$ (39)式中的独立变量 $\phi(x,t)$ 和 $\phi^*(x,t)$ 决定的系统的作用量在无穷小变化 $\delta\phi$ 和 $\delta\phi^*$ 下作用量的变化(52)式可写成

$$\delta S=\int_{t_B}^{t}\int_D\left[\frac{\partial L'}{\partial\phi}\delta\phi+\frac{\partial L'}{\partial\nabla\phi}\delta\nabla\phi+\frac{\partial L'}{\partial\phi_t}\delta\phi_t\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}t+c.c. \tag{70}$$

这里 $\partial L'/\partial(\nabla\varphi)$ 表示了一个具有分量为 $\partial L'/\partial(\partial_i\phi)$ $(i=1,2,3)$ 的矢量。作部分积分后可得

$$\begin{aligned}\delta S=&\int_{t_b}^{t}\int_D\left[\frac{\partial L'}{\partial\phi}-\nabla\cdot\left(\frac{\partial L'}{\partial\nabla\phi}\right)-\partial_t\left(\frac{\partial L'}{\partial\phi_t}\right)\right]\delta\phi\mathrm{d}x\mathrm{d}t\\&+\left[\frac{\partial L'}{\partial\phi_t}\delta\phi\right]_{t_0}^{t_1}+c.c\end{aligned} \tag{71}$$

由此式可得出对于一个具有确定值 $\phi(x,t_0)$ 和 $\phi(x,t_1)$ 的函数 $\phi(x,t)$ 要使作用量 S 取一个极值的充分和必要条件是它必须满足以下 Euler-Lagrange 方程

$$\frac{\partial L'}{\partial\phi}=\nabla\cdot\left(\frac{\partial L'}{\partial\nabla\phi}\right)+\partial_t\left(\frac{\partial L'}{\partial\phi_t}\right) \tag{72}$$

从以上的证明可知道，如果一个系统的拉格朗日密度函数 $L'=\mathcal{L}$ 知道，则便可由式(72)方程求出微观粒子满足的非线性Schrödinger 方程式(6)。这意味着在非线性量子力学中式(72)的 Euler-Lagrange 方程和非线性Schrödinger 式(6)有同等效果，都是微观粒子的动力学方程。这一结果迥然不同于线性量子力学的一个新结果。如所知由于 Euler-Lagrange 方程是经典力学中描述宏观粒子的基本动力学方程。(72)式的存在充分表明了在非线性量子力学中微观粒子具有经典的特性。在线性量子力学中系统的线性拉格朗郎日密度函数虽然也可写出一个线性的 Euler-Lagrange 方程，并从它也得出一个线性Schrödinger 方程，但此方程只有波动解，而无粒子性，没有多大物理意义，所以很少提起和使用它。

(2) 微观粒子的哈密顿方程

显然，相应于式(6)的哈密顿密度函数是用(40)式表示。现引入粒子的正则变量，

$$q_1 = \frac{1}{2}\left(\phi + \phi^*\right),\ p_1 = \frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_t q_1\right)};$$

$$q_2 = \frac{1}{2i}\left(\phi - \phi^*\right),\ p_2 = \frac{\partial L'}{\partial\left(\partial_t q_2\right)} \quad (73)$$

则系统的哈密顿密度函数(40)式则变为

$$H' = \sum_i p_i \partial_t q_i - L'$$

于是，相应的拉格朗日密度的变化则为

$$\delta L' = \sum_i \frac{\delta L'}{\delta q_i}\delta q_i + \frac{\delta L'}{\delta\left(\nabla q_i\right)}\delta\left(\nabla q_i\right) + \frac{\delta L'}{\delta\left(\partial_t q_i\right)}\delta\left(\partial_t q_i\right) \quad (74)$$

这里 $L' = \mathcal{L}$。而式(73)又定义了 p_i，则，系统的 Euler-Lagrange 方程(72)式现在变为

$$\frac{\partial L'}{\partial \phi} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial L'}{\partial \nabla \phi}\right) + \partial_t p_i$$

而系统的哈密顿量的变化有

$$\delta H' == \sum_i \int \left(\partial_t q_i \delta p_i - \partial_t p_i \delta q_i\right) \mathrm{d}x$$

于是应用变分原理可得到哈密顿方程为

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\delta H'}{\delta p_i},\ \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\delta H'}{\partial q_i} \quad (75)$$

其由(73)式很容易得到这组方程对应的复数形式为

$$i\partial_t \phi = \delta H' / \delta \phi^* \quad (76)$$

这里 $H' = \mathcal{H}$，这与经典力学的哈密顿方程一致。由此看到，从上述哈密顿方程(76)式也可以推导出非线性 Schrödinger 方程。因此，它和 Euler-Lagrange 方程一样，能够用来描述非线性量子力学中的微观粒子的运动状态和特征。它和非线性 Schrödinger 方程具有同一功能，都是粒子的动力学方程。由于哈密顿方程是经典力学中粒子运动的基本方程，则上述得出的结果充分显示了在非线性量子力学中的微观粒子具有经典特性。

以上结果使我们认识到能用 Euler-Lagrange 方程和哈密顿方程来研究非线性量子力学系统微观粒子的运动特性。但这些方程是用粒子的状态变量 $\phi(x,t)$ 和 $\phi^*(x,t)$ 给出的。如果在能量－动量空间中，根据 de Broglie 关系 $E = h\upsilon = \hbar\omega$ 和 $\boldsymbol{P} = \hbar\boldsymbol{k}$，则系统哈密顿量可用能量 E 或 ω 来代替，其动力学变量用动量或波矢 k 和坐标 x 表示。在自然单位制下，哈密顿量或能量是 k 和 x 的函数，则就有

$$\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}t'} = \left.\frac{\partial \omega}{\partial k}\right|_{x'} \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} + \left.\frac{\partial \omega}{\partial x'}\right|_k \frac{\partial x'}{\partial t'} = 0$$

的关系成立，则在非线性量子力学系统中，由上述式可推出系统的哈密顿方程

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t'} = \left.\frac{\partial \omega}{\partial x'}\right|_k,\ \frac{\mathrm{d}x'}{\mathrm{d}t'} = \left.\frac{\partial \omega}{\partial k}\right|_{x'} \quad (77)$$

这里 $k = \partial\theta/\partial x'$ 是与时间相关的微观粒子的波矢，而 $\omega = -\partial\theta/\partial t'$ 是它的频率，θ 是微观粒子波函数的相位值。应用这个哈密顿方程也可求出微观粒子的运动规律。例如，对于 $V(x') = \alpha x'$，其相应的非线性 Schrödinger 方程的解也被给出在式(31)中。它的相位值为

$$\theta = 2\left(\xi - \alpha t'\right)x' + \frac{4\alpha^2 t'^3}{3} - 4\alpha\xi t'^2 + 4\left(\xi^2 - \eta^2\right)t' + \theta_0,$$

对于 $V(x') = \alpha x'^2$ 时的解表示在式(33)，相应的相位为

$$\theta = 2\xi x' \cos\left[2a\left(t' - t_0'\right) + \left(\frac{\xi^2}{a}\right)\sin 4a\left(t' - t_0'\right) + \right] \cdot 4\eta^2\left(t' - t_0'\right) + \theta_0',$$

应用式(77)，能求出在 $V(x') = ax'$ 时的,

$$k = 2\left(\xi - at'\right),$$

$$\omega = 2ax' - 4\left(2\xi - at'\right)^2 + \left(2\eta\right)^2 = 2ax' - k^2 + \left(2\eta\right)^2$$

于是这个微观粒子的质心群速度为

$$v_g = \frac{\mathrm{d} < x' >}{\mathrm{d}t'} = \left.\frac{\partial w}{\partial k}\right|_{x'} = 4\left(2\xi - at'\right)$$

相应的加速度是

$$\frac{\mathrm{d}^2 x'}{\mathrm{d}t'^2} = \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t'} = -2a = cons\tan t,\quad \left(x_0' = \langle x' \rangle\right) \quad (78)$$

对于 $V(x') = a^2 x'^2$ 的情况，则有

$$k = 2\xi\cos\alpha\left(t' - t_0'\right)$$

$$\omega = 4a\xi x' \sin 2\alpha\left(t' - t_0'\right) - 4\xi^2\cos 4\alpha\left(t' - t_0'\right) - 4\eta^2$$

$$= 2\alpha x'\left(4\xi^2 - k^2\right)^{\frac{1}{2}} - 2k^2 4\left(\xi^2 - \eta^2\right)$$

于是微观粒子的质心群速度为

$$v_g = \left.\frac{\partial w}{\partial k}\right|_{x'} = \frac{\alpha x'}{\xi}\frac{k}{\sqrt{1-k^2/4\xi^2}} - 2k$$
$$= 2\alpha x' \mathrm{ctg}\left[2\alpha\left(t'-t_0'\right)\right] - 4\xi\cos\left[2\alpha\left(t'-t_0'\right)\right]$$

相应的加速度则为

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t'} = -\left.\frac{\partial\omega}{\partial x'}\right|_{x'} = -2\alpha\sqrt{4\xi^2-k^2} = -4\xi^2\alpha\sin\left[2\alpha\left(t'-t_0'\right)\right]$$

因为 $\frac{\mathrm{d}^2 < x' >}{\mathrm{d}t'^2} = \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t'}$，这里 $< x' > = x_0'$，则有

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t'} = \frac{\mathrm{d}^2 < x' >}{\mathrm{d}t'^2} = -4\xi\alpha\sin\left[2\alpha\left(t'-t_0'\right)\right]$$

和

$$< x' > = \frac{\xi}{\alpha}\sin\left[2\alpha\left(t'-t_0'\right)\right] \tag{79}$$

最后求得此种情况下，微观粒子的加速的为

$$\frac{\mathrm{d}^2 < x' >}{\mathrm{d}t'^2} = \frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t'} = -4\alpha^2 < x' > \tag{80}$$

在式(78)～式(80)中求出微观粒子的加速度与前面用 $\frac{\mathrm{d}^2 < x' >}{\mathrm{d}t'^2} = -2\frac{\partial V}{\partial < x' >}$ 求得的结果完全一致。给出了相同的动力学特性，即当 $V\left(x'\right) = ax'$ 时微观粒子在力场中作匀加速运动，相当于点电荷粒子在均匀电场中的运动。当 $V\left(x'\right) = a^2 x'^2$ 时微观粒子以加速度在“胡克力”作用下，绕着平衡位置作谐振运动，其振动的频率为 2α，其振幅为 ξ/α，其相应的振动方程为 $x' = x_0'\sin\omega t'$ 而 $\omega = 2a$ 和 $x_0' = \xi/\alpha$ 这些运动特点和规律完全与经典力学中粒子的运动规律一致。在非线性量子力学中得出这些规律和经典力学之间的相对应性，不但表明了所建立的非线性量子理论是正确的。同时也表明在非线性量子力学中的微观粒子具有经典粒子的特性。

7. 结论

由于原有量子力学存在许多困难和问题，在该理论中的 Schrödinger 动力学方程不能很好地描述微观粒子真实具有的局域特性和波－粒二象性，因此，量子力学必须改进和发展去考虑粒子的非线性相互作用。这个非线性相互作用是由于粒子之间或它与背景场之间的相互作用产生的。在这种情况下，在非线性系统中的微观粒子的状态是用非线性 Schrödinger 方程，而不是用量子力学中的线性 Schrödinger 方程来描述。至此，微观粒子的状态和特征相对于线性量子力学系统中的情况发生了根本性的大变化。在这种情况下不论外势场如何变化，非线性 Schrödinger 方程都能给出具有波－粒二象特性的解，它由包络孤子和一个载波组成，有一个具有确定的位置的质心；同时，微观粒子此时也具有一个确定的质量，能量和动量，并遵守的质量，能量和动量守恒定律，在外场作用时粒子是稳定的，并满足经典运动方程和遵守哈密顿方程和拉格朗日方程。这些结果清楚地显示由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子具有一个明显的的局域特性和波－粒二象性，从而彻底消除了原有量子力学存在近一个世纪的困难和问题，并可解决当代最伟大科学家爱因斯坦与以玻尔为首的哥本哈根学派之间争论了半个多世纪的、一直未解决的线性量子力学中长期存在的问题，也说明原有量子力学是一个近似理论，必须把它发展到非线性系统中去建立起完整和系统的非线性量子力学理论。因此这一研究具有重要意义。

8. 致谢

作者感谢国家科技部基础司的财政支持(编号：SSTC-1996-079)。

参考文献 (References)

[1] D. Bohr, J. Bub. A proposed solution of the measurement problem in quantum mechanics. Phys. Rev., 1935, 48(1): 169-174.

[2] L. de Broglie. Nonlinear Wave Mechanics. Amsterdam: Elsevier, 1960: 35-90.

[3] E. Schrödinger. Collected Papers on Wave Mechanics. Blackie and Son, 1928: 54-103.

[4] E. Schrödinger. Die gegenwartige situation in der quantenmechanik. Die Naturwissenschaften, 1935, 23(48): 807-812, 823-828, 844-849.

[5] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules, Phys. Rev. 1926, 28(10): 1049-1070.

[6] E. Schrödinger. The present situation in quantum mechanics, a translation of translation of Schrödinger “Catparadox paper”. Proc. Cambridge Puil. Soc., 1935, 31(4): 555-561.

[7] W. Z. Heisenberg. Über die quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen. Zeitschrift der Physik, 1925, 33(8): 879-893.

[8] W. Heisenberg, H. Euler. Folgerungen aus der diracschen theorie des positrons. Zeitschr. Phys., 1936, 98(11-12):714-732.

[9] M. Born, L. Infeld. Foundations of the new field theory. Proc.

Roy. Soc. A, 1934, 144(3): 425-430.
[10] M. Born, L. Infeld. A useful review of the theory may be found in M Born. Ann Inst Poincar, 1939, 7(2): 155-161.
[11] D. Bohm. Quantum Theory. New Jersey: Prentice-Hall Englewood Cliffs, 1951.
[12] P. A. M. Dirac. Quantum theory of localizable dynamical systems. Phys. Rev. 1948, 73(8): 1092-1099.
[13] P. A. Dirac. The Principles of Quantum Mechanics. Oxford, 1967: 21-136.
[14] S. Diner, D. Farque, G. Lochak et al. The Wave-Particle Dualism. Dordrecht: Riedel, 1984: 23-79.
[15] J. Potter. Quantum Mechanics. North-Holland Publishing Co., 1973: 45-112.
[16] M. Jammer. The Concettual Development of Quantum Mechanics. Los Angeles: Tomash, 1989: 32-135.
[17] L. R. Roth, A. Inomata. Fundamental Questions in Quantum Mechanics. New York: Gordon and Breach, 1986: 45-143.
[18] M. Ferrero, A. Van der Merwe. New Developments on Fundamental Problems in Quantum Physics. Dordrecht: Kluwer, 1997: 51-147.
[19] M. Ferrero, A. Van der Merwe. Fundamental Problems in Quantum Physics. Dordrecht: Kluwer, 1995: 12-87.
[20] 德布罗意. 非线性波动力学(中译本)[M]. 北京: 高等教育出版社, 1960: 5-67.
[21] 庞小峰. 非线性量子理论的问题(讲义)[M]. 成都: 四川师范大学出版, 1985: 12-98.
[22] 庞小峰. 非线性量子力学理论[M]. 重庆: 重庆出版社, 1994: 14-213.
[23] 庞小峰. 非线性量子的基本原理与理论. 刘洪主编, 新学科研究[M]. 北京: 中国科学技术出版社, 1989: 17-21.
[24] 庞小峰. 非线性量子的基本原理[J]. 潜科学杂志, 1986, 2(3): 18-22.
[25] 庞小峰. 非线性系统中微观粒子的运动规律[J]. 世界科技研究与发展, 2003, 24(1): 54-60, 79-85.
[26] 庞小峰, 在非线性系统中的微观粒子的特性和非线性量子力学[A]. 《科学学术论文集(物理及其应用)》[C]. 北京: 原子能出版社, 2006: 78-91
[27] 庞小峰. 线性量子力学的困难和非线性量子力学理论的建立[J]. 中国基础科学, 2003, 10(5): 35-39.
[28] X. F. Pang. Quantum Mechanics in Nonlinear Systems. World Scientific Publishing Co., Singapore, 2005: 10-237.
[29] X. F. Pang. Features and states of microscopic particles in nonlinear quantum-mechanics systems. Frontiers of Physics in China, 2008, 3(2): 413-489.
[30] X. F. Pang. Investigations of properties and essences of macroscopic quantum effects in superconductors by nonlinear quantum mechanics. Nature Sciences, 2007, 2(1): 42-47.
[31] 庞小峰. 孤子物理学[M]. 成都: 四川科技出版社, 2003: 48- 176.
[32] 郭柏灵, 庞小峰. 孤立子[M]. 北京: 科学出版社, 1987: 345-363.
[33] V. E. Zakharov, A. B. Shabat. Exact theory of two-dimensional self-focusing and one dimensional sel-modulation of waves in nonlinear medim. Sorv. Phys JETP, 1972, 34(1): 62-69.
[34] V. E. Zakharov, A. B. Shabat. Interaction between solitons in a stable medium. Sorv. Phys JETP, 1973, 37(5): 823-828.
[35] H. H. Chen, C. S. Liu. Solitons in nonuniform media. Phys. Rev. Lett., 1976, 37(11): 693-696.
[36] H. H. Chen, C. S. Liu. Nonlinear wave and soliton propagation in media with arbitrary inhomogeneities. Phys. Fluids, 1978, 21(3): 377-380.
[37] C. Sulem, P. L. Sulem. The Nonlinear Schrödinger Equation: Self-Focusing and Wave Collapse. New York: Springer, 1999: 11-189.

