Общая физика

УДК 530.145

Алгебра кватернионов и уравнение Паули

М. А. Микаэлян

Показано, что если вместо алгебры спиноров использовать алгебру кватернионов (чисел с тремя мнимыми единицами), то уравнение Паули для частицы со спином ½ по форме оказывается идентичным уравнению Шредингера для частицы без спина. В то же самое время, в отличие от спинорного описания, «включение» магнитного поля посредством известной замены оператора импульса приводит к правильному значению собственного магнитного момента частицы. В качестве иллюстрации простоты кватернионного описания спина проведен вывод гидродинамических уравнений, соответствующих уравнению Паули.

PACS: 03.65.-w; 03.65.Ca

Ключевые слова: квантовая механика, кватернионы, уравнение Паули, гидродинамическая формулировка.

Введение

В квантовой механике частице без спина соответствует эволюция двух вещественных функций Ψ_0 и Ψ_1, которые для удобства объединяются в одну комплексную функцию $\Psi = \Psi_0 + i\Psi_1$. Частице же со спином ½ соответствует эволюция четырех вещественных функций Ψ_0, Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3, которые принято объединять в две комплексные функции, так что волновая функция представляется матрицей-столбцом

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \psi_1 \equiv \Psi_0 + i\Psi_3, \quad \psi_2 \equiv i\Psi_1 - \Psi_2. \quad (1)$$

Ранее [1] был рассмотрен альтернативный способ объединения четырех вещественных функций в одну гиперкомплексную функцию:

$$\Psi = \Psi_0 + i\Psi_1 + \mathbf{i}\Psi_2 + \mathbf{k}\Psi_3. \quad (2)$$

Это кватернион, компоненты которого $\Psi_{0,1,2,3}$ – функции координат и времени. Следуя Гамильтону, мнимые единицы **i, j, k** принято интерпретировать как базисные векторы декартовой системы координат. Таким образом, кватернион имеет вид формальной суммы скалярной и векторной частей – именно так называют его вещественную и мнимую части, соответственно.

Подчеркнем, что когда мнимая часть кватерниона называется вектором, то речь идет исключительно о геометрической интерпретации – никакие трансформационные свойства в понятие вектора при этом не вкладываются. Говоря точнее, в понятия скаляра и вектора, из которых слагается кватернион, не вкладывается смысл тензоров нулевого и первого рангов, соответственно. Что же касается трансформационных свойств кватернионной волновой функции (2) (равно как и традиционной волновой функции (1)), то они вытекают из того, что при поворотах системы координат четыре вещественные функции $\Psi_{0,1,2,3}$ преобразуются друг через друга таким образом, что сумма их квадратов

$$\rho = \Psi_0^{\,2} + \Psi_1^{\,2} + \Psi_2^{\,2} + \Psi_3^{\,2}, \quad (3)$$

имеющая смысл плотности вероятности нахождения частицы, является инвариантом.

Упомянем об известной в литературе [2] кватернионной квантовой механике, которая отличается от стандартной квантовой механики заменой комплексного гильбертова пространства на кватернионное гильбертово пространство. Подчеркнем, что такая замена проводится независимо от значения спина. При этом кватернионная волновая функция вида (2) сопоставляется частице *без спина*; частице же со спином сопоставляется пара кватернионных функций, то есть волновая функция типа (1), где $\Psi_{1,2}$ – кватернионы вида (2). Такой подход характеризуется удвоением числа вещественных функций, сопоставляемых частице; дополнительные «степени свободы» ассоциируются с такими характеристиками частицы, как гиперзаряд и изотопический спин.

Мы же не выходим за пределы стандартной квантовой механики, а лишь обосновываем следующую точку зрения: если при описании частицы без спина использовать алгебру комплексных чисел, то при описании частицы со спином *в той*

Микаэлян Михаил Андреевич, ст. научн. сотрудн.
Институт общей физики им. А.М.Прохорова РАН.
Россия, 119991 Москва, ул. Вавилова 38.
Тел.: 8 (499) 135-02-47. E-mail: mikhail@bk.ru

Статья поступила в редакцию 12 февраля 2013 г.

же мере адекватным действием оказывается использование алгебры кватернионов.

Алгебра кватернионов

Множество кватернионов – это четырехмерное линейное пространство над полем *вещественных* чисел, базисные элементы которого обозначаются $\{\mathbf{1}, \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$. Для элементов этого пространства (в дополнение к обычным операциям сложения и умножения на вещественное число) определено умножение, линейное по обоим множителям. С учетом свойства линейности операция умножения однозначно определяется правилами умножения базисных элементов: первый из них играет роль единицы, то есть $1 \cdot x = x \cdot 1 = x$ при любом x, а для трех других базисных элементов таблица умножения задается равенствами

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -1$$
$$\mathbf{ij} = -\mathbf{ji} = \mathbf{k} \qquad \mathbf{jk} = -\mathbf{kj} = \mathbf{i} \qquad \mathbf{ki} = -\mathbf{ik} = \mathbf{j} \tag{4}$$

Произвольный кватернион записывается в виде

$$x = x_0 + \mathbf{x},\ x \equiv \mathbf{i}x_1 + \mathbf{j}x_2 + \mathbf{k}x_3, \tag{5}$$

где x_0 и $\mathbf{x}$ называются его скалярной и векторной частями соответственно; ниже для них приняты обозначения[1] : $x_0 = \mathrm{Sc}\ x$, $\mathbf{x} = \mathrm{Ve}\ x$. Операция сопряжения определяется как изменение знака векторной части кватерниона и обозначается чертой сверху. С использованием (4) получаются формулы:

$$\begin{gathered}\bar{x}x = x\bar{x} = x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2, \\ \overline{xy} = \bar{y}\,\bar{x}, \qquad \mathrm{Sc}(xy) = \mathrm{Sc}(yx)\end{gathered} . \tag{6}$$

Модулем кватерниона называется величина

$$|x| \equiv \sqrt{\bar{x}x} = \sqrt{x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}; \quad |xy| = |yx| = |x||y| . \tag{7}$$

Каждому кватерниону можно поставить в соответствие упорядоченную пару комплексных чисел. С учетом (4) произвольный кватернион (5) представим в виде $x \equiv X_1 + X_2\mathbf{j}$, где $X_1 \equiv x_0 - \mathbf{k}x_3$, $X_2 = \mathbf{k}x_1 - x_2$. Если в выражениях для $X_{1,2}$ отождествить $\mathbf{k}$ с обычной мнимой единицей i, то будем иметь правило соответствия

$$x \equiv X_1 - X_2\mathbf{j} \quad \mapsto \quad X \equiv \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}_{\mathbf{k}\to i}, \tag{8}$$

обеспечивающее, в частности, переход от $\Psi(2)$ к $\Psi(1)$. Опираясь на это правило, с использованием (4) легко получить следующие формулы соответствия:

$$\begin{gathered}\Psi\mathbf{i} \mapsto i\sigma_x\psi,\ \Psi\mathbf{j} \mapsto i\sigma_y\psi, \\ \Psi\mathbf{k} \mapsto i\sigma_z\psi;\ \mathbf{k}\Psi \mapsto i\psi; \\ \mathbf{k}\Psi\mathbf{i} \mapsto -\sigma_x\psi,\ \mathbf{k}\Psi\mathbf{j} \mapsto -\sigma_y\psi,\ \mathbf{k}\Psi\mathbf{k} \mapsto -\sigma_z\psi,\end{gathered} \tag{9}$$

где $\sigma_{x,y,z}$ – стандартный набор матриц Паули.

Теория кватернионов была построена Гамильтоном, и в этой теории скаляры и векторы рассматриваются совместно. Векторное же исчисление было построено позже – Хевисайдом и независимо от него Гиббсом, причем построено оно было на основе теории кватернионов. Это не случайно, так как именно в рамках теории кватернионов векторы (объекты геометрические) определяются как объекты алгебраические – то есть как объекты, которые могут быть перемножены. Для произведения двух векторов $\mathbf{A} = \mathbf{i}A_1 + \mathbf{j}A_2 + \mathbf{k}A_3$ и $\mathbf{B} = \mathbf{i}B_1 + \mathbf{j}B_2 + \mathbf{k}B_3$ с использованием (4) получается формула

$$\mathbf{AB} = -\mathbf{A} \bullet \mathbf{B} + \mathbf{A}\times\mathbf{B}, \tag{10}$$

где жирной точкой и крестиком (здесь и ниже) обозначаются «обычные» скалярное и векторное произведения векторов. В частности, для квадрата произвольного вектора $\mathbf{p}$, в том числе единичного вектора $\mathbf{e}$ ($\mathbf{e} \bullet \mathbf{e} = 1$), получаем:

$$\mathbf{p}^2 = -\mathbf{p} \bullet \mathbf{p},\ \mathbf{e}^2 = -1 \tag{11}$$

(для $\mathbf{e} = \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ второе соотношение принимает вид верхних равенств (4)). Другой частный случай – это когда один из перемножаемых в (10) векторов есть оператор Гамильтона

$$\boldsymbol{\nabla} = \mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z} \tag{12}$$

(впервые введенный именно в рамках теории кватернионов). Ниже встретится случай, когда в (10) $\mathbf{B} = \nabla$:

$$\mathbf{A}\overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}} = -\mathbf{A} \bullet \overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}} + \mathbf{A}\times\overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}} = -\mathrm{div}\mathbf{A} - \mathrm{rot}\mathbf{A}, \tag{13}$$

где стрелка указывает «направление» дифференцирования (само же умножение происходит по кватернионным законам). Попутно заметим, что с учетом первого из равенств (11) лапласиан Δ выражается через ∇ формулой

$$\Delta = \nabla \bullet \nabla = -\nabla^2. \tag{14}$$

Отдельно взятый кватернион может рассматриваться как обычное комплексное число. Для этого следует представить (5) в виде $x = x_0 + \mathbf{e}\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$ ($\mathbf{e}$ – единичный вектор), после чего с учетом второго из равенств (11) отождествить $\mathbf{e}$ с обычной мнимой единицей i (говоря точнее, две алгебры, натянутые на базисные элементы $\{1, \mathbf{c}\}$ и $\{1, j\}$, изоморфны друг другу). Соответственно, для кватернионов оказывает-

---

[1] Как отмечалось, в эти термины не вкладывается тензорный смысл, то есть трансформационные свойства. Что же касается обозначений, то они выбраны по аналогии с обозначениями Re(...) и Im(...).

ся справедливой экспоненциальная форма записи: $x = |x|e^{\mathbf{e}\alpha}$ ($\mathrm{tg}\alpha = \sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}/x_0$); $\bar{x} = |x|e^{-\mathbf{e}\alpha}$. По той же причине справедлива формула Эйлера, так что для кватерниона R с единичным модулем $(R\bar{R} = \bar{R}R = 1)$ – такие кватернионы называются *единичными* – имеем: $R = e^{\mathbf{e}\alpha} = \cos\alpha + \mathbf{e}\sin\alpha$.

Ниже нам также потребуется следующее представление кватерниона[2]:

$$x = |x|e^{\mathbf{i}\alpha}e^{\mathbf{j}\beta}e^{\mathbf{i}\gamma} \tag{15}$$

(в качестве **i** и **j** могут быть использованы два произвольных ортогональных единичных вектора).

При рассмотрении операторов, действующих в пространстве кватернионов, последнее наделяется метрикой: скалярное произведение кватернионов (как векторов четырехмерного вещественного линейного пространства) определяется формулой $(x, y) \equiv x_0y_0 + x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3$. Умножение (как слева, так и справа) на единичный кватернион является ортогональным оператором: $(Rx, Ry) = (xR, yR) = (x, y)$. В общем случае ортогональный оператор представляется в виде [3]

$$\hat{O} = R(...)Q, \tag{16}$$

где R и Q – единичные кватернионы. Именно такой вид должен иметь оператор, преобразующий кватернионную волновую функцию (2) при переходе из одной системы отсчета в другую, чтобы обеспечивать инвариантность ρ(3).

Частным случаем ортогонального оператора является оператор поворота

$$\hat{R} = R(...)\bar{R}, \quad R = e^{\mathbf{n}(\theta/2)} = \cos(\theta/2) + \mathbf{n}\sin(\theta/2). \tag{17}$$

Действуя на кватернион (5), этот оператор оставляет неизменной его скалярную часть x_0, а вектор **x** поворачивает на угол θ вокруг направления единичного вектора **n**.

Схема кватернионного описания частицы со спином

Формальной основой квантово-механического нерелятивистского описания частицы без спина является ее классическая функция Гамильтона $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, которая после замены **p** на оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$ превращается в гамильтониан $\hat{H}$, определяющий эволюцию волновой функции:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \;\; \hat{H} \equiv H(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}), \;\; \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \tag{18}$$

Плотность же вероятности нахождения частицы дается выражением ρ = Ψ * Ψ.

Казалось бы, раз классическая функция Гамильтона от спина не зависит, то квантово-механическая схема такого типа не может в полной мере охватить случай частицы со спином. Именно таким образом обстоит дело в рамках традиционного описания спина, когда частице сопоставляется волновая функция (1): «включение» магнитного поля по стандартному правилу $\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ не охватывает взаимодействия с магнитным полем собственного магнитного момента частицы; соответствующий член взаимодействия в правой части волнового уравнения приходится (при нерелятивистском рассмотрении) дописывать «руками».

Иначе обстоит дело при кватернионном описании спина, когда частице сопоставляется волновая функция (2). Схема такого описания по форме идентична схеме, относящейся к частице без спина и сводится к следующему [1].

Вместо обычной мнимой единицы i в теории фигурирует кватернионная «мнимая единица» – произвольный (но фиксированный) единичный вектор

$$\mathbf{I} = \mathbf{i}\alpha + \mathbf{j}\beta + \mathbf{k}\gamma \qquad (\alpha^2+\beta^2+\gamma^2=1),$$

направление которого можно изменять (с помощью преобразования эквивалентности), не затрагивая при этом значений наблюдаемых; вектор **I** – аналог матричного вектора Паули **σ**. С учетом второго из равенств (11)

$$\mathbf{I}^2 = -1. \tag{19}$$

Внешние отличия от случая частицы без спина сводятся, во-первых, к замене $i \to \mathbf{I}$, во-вторых, к замене комплексного сопряжения на кватернионное сопряжение и, в-третьих, к существенности порядка сомножителей (алгебра кватернионов некоммутативная).

Операторы проекций импульса на координатные оси имеют вид

$$\hat{p}_x = -\hbar\mathbf{I}\frac{\partial}{\partial x}, \;\; \hat{p}_y = -\hbar\mathbf{I}\frac{\partial}{\partial y}, \;\; \hat{p}_z = -\hbar\mathbf{I}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{20}$$

Собственные функции этих операторов выглядят соответственно:

$$\Psi_{p_x} = e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}p_x x}\xi(y,z), \quad \Psi_{p_y} = e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}p_y y}\eta(x,z),$$

---

[2] Используя (4), экспоненциальную форму записи кватерниона и формулу Эйлера, будем иметь: $x = (x_0 + \mathbf{i}x_1) + (x_2 + \mathbf{i}x_3)\mathbf{j} = \sqrt{x_0^2 + x_1^2}e^{\mathbf{i}\alpha_1} + \sqrt{x_2^2 + x_3^2}e^{\mathbf{i}\alpha_2}\mathbf{j}$. После замен $\alpha_1 = \alpha+\gamma$, $\alpha_2 = \alpha-\gamma$ имеем: $x = e^{\mathbf{i}\alpha}\left(\sqrt{x_0^2 + x_1^2}e^{\mathbf{i}\gamma} + \sqrt{x_2^2 + x_3^2}e^{-\mathbf{i}\gamma}\mathbf{j}\right)$; с учетом $e^{-\mathbf{i}\gamma}\mathbf{j} = \mathbf{j}e^{\mathbf{i}\gamma}$ получаем:
$x = e^{\mathbf{i}\alpha}\left(\sqrt{x_0^2 + x_1^2} + \mathbf{j}\sqrt{x_2^2 + x_3^2}\right)e^{\mathbf{i}\gamma} = e^{\mathbf{i}\alpha}\sqrt{x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}e^{\mathbf{j}\beta}e^{\mathbf{i}\gamma} = |x|e^{\mathbf{i}\alpha}e^{\mathbf{j}\beta}e^{\mathbf{i}\gamma}$.

$$\Psi_{p_z} = e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar} p_z z} \varsigma(x, y),$$

где ξ, η, ς – кватернионные функции указанных переменных. Общие же собственные функции, отвечающие определенному значению импульса **p**, имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{p}} = e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a \quad , \tag{21}$$

где $a = const$. Последние суть собственные функции оператора импульса

$$\hat{\mathbf{p}} = -\hbar \mathbf{I}(...)\overleftarrow{\nabla} \tag{22}$$

в том смысле, что удовлетворяют уравнению $\hat{\mathbf{p}}\Psi = \Psi\mathbf{p}$ (собственное значение фигурирует как правый множитель). Действительно, с учетом (22) и (12) имеем:

$$\hat{\mathbf{p}}(e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a) = -\hbar \mathbf{I} e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a \overleftarrow{\nabla} = -\hbar \mathbf{I} e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a \left(\mathbf{i}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x} + ... \right) =$$
$$= -\hbar \mathbf{I}\left(\frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} \right) a\mathbf{i} - ... = p_x e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a\mathbf{i} + ... =$$
$$= e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a(\mathbf{i}p_x + ...) = (e^{\frac{\mathbf{I}}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{x}} a)\mathbf{p}.$$

Для частицы со спином вместо схемы (18) имеем:

$$\hbar \mathbf{I}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad \hat{H} \equiv H(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{p}}), \quad \hat{\mathbf{p}} = -\hbar \mathbf{I}(...)\overleftarrow{\nabla}. \tag{23}$$

Плотность же вероятности дается выражением $\rho = \overline{\Psi}\Psi$, которое с учетом (6) имеет вид (3). Правило «включения» магнитного поля выглядит так:

$$\hat{\mathbf{p}} \to \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}(...)\mathbf{A}. \tag{24}$$

Если Ψ – собственная функция гамильтониана $\hat{H}$, то, решая волновое уравнение (первое из соотношений (23)) с подстановкой $\hat{H}\Psi = E\Psi$, получаем общий вид волновой функции, соответствующей определенному значению энергии:

$$\Psi_E = e^{-\frac{\mathbf{I}}{\hbar}E} \xi(\mathbf{x}). \tag{25}$$

Оператор проекции момента импульса (в единицах $\hbar$) на направление единичного вектора **n** имеет вид

$$\hat{j}_{\mathbf{n}} = -\mathbf{I}(\mathbf{n} \bullet [\mathbf{x} \times \nabla]) - \frac{1}{2}\mathbf{I}(...)\mathbf{n},$$

Здесь первое слагаемое соответствует орбитальному моменту. Второе же слагаемое – это оператор проекции спина на направление **n**:

$$\hat{s}_{\mathbf{n}} = -\frac{1}{2}\mathbf{I}(...)\mathbf{n}. \tag{26}$$

В частности, если вектор **I** направить по оси z ($\mathbf{I} = \mathbf{k}$), то для операторов проекций спина на координатные оси ($\mathbf{n} = \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$) будем иметь:

$$\hat{s}_x = -\frac{1}{2}\mathbf{k}(...)\mathbf{i}, \;\; \hat{s}_y = -\frac{1}{2}\mathbf{k}(...)\mathbf{j}, \;\; \hat{s}_z = -\frac{1}{2}\mathbf{k}(...)\mathbf{k}.$$

Собственные функции, отвечающие $s_z = \pm\frac{1}{2}$, – это функции, которые либо коммутируют, либо антикоммутируют с **k**. С учетом (4) это линейные комбинации {1, **k**} и {**i**, **j**} соответственно: $\Psi_{1/2} = \Psi_0 + \mathbf{k}\Psi_3$ и $\Psi_{-1/2} = \mathbf{i}\Psi_1 + \mathbf{j}\Psi_2$. Таким образом, произвольная волновая функция (2) имеет вид $\Psi = \Psi_{1/2} + \Psi_{-1/2}$.

Кватернионным аналогом оператора спина $\hat{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\sigma}/2$ ($\boldsymbol{\sigma}$ – матричный вектор Паули) является оператор

$$\hat{\mathbf{s}} = \mathbf{I/2}. \tag{27}$$

Для него уравнение на собственные значения имеет вид[3] $(\mathbf{I}/2)\Psi = \Psi(\mathbf{n}/2)$ (как и для оператора импульса (22) собственное значение фигурирует в качестве правого множителя). После умножения справа на $-\mathbf{n}$ с учетом (26) получаем: $\hat{s}_{\mathbf{n}}\Psi = (1/2)\Psi$, то есть Ψ – собственная функция оператора $\hat{s}_{\mathbf{n}}$(26), отвечающая собственному значению $+\frac{1}{2}$. Таким образом, если Ψ– собственная функция оператора $\hat{\mathbf{s}}$ (27), то в пространстве существует направление **n**, проекция спина на которое имеет определенное значение ($+\frac{1}{2}$).

Уравнение Паули на языке кватернионов

Классическая функция Гамильтона нерелятивистской частицы с учетом (11) записывается в виде $H(\mathbf{x},\mathbf{p}) = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{x})$. После замены $\mathbf{p} \to \hat{\mathbf{p}}$ получаем гамильтониан $\hat{H}$, для которого волновое уравнение (первое из равенств (23)) имеет вид

$$\hbar \mathbf{I}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}\Psi + U\Psi. \tag{28}$$

С учетом (22), (19) и (14) имеем:

$\hat{\mathbf{p}}^2 = \hbar^2 \mathbf{I}\,\mathbf{I}(...)\overleftarrow{\nabla}\overleftarrow{\nabla} = \hbar^2(...)\overleftarrow{\Delta} = \hbar^2\Delta$ (лапласиан, будучи скаляром, коммутирует с любым кватернионом). После подстановки в (28) получаем:

$$\hbar \mathbf{I}\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi. \tag{29}$$

Отметим случай свободной частицы, $U = 0$. Общее решение – это суперпозиция плоских волн $e^{-\mathbf{I}(\omega t - \mathbf{q}\bullet\mathbf{x})}a$ (где $\omega = \hbar q^2/2m$). Последние имеют вид Ψ_E (25) и $\Psi_{\mathbf{p}}$ (21) одновременно, так что соответствуют определенным значениям энергии ($\hbar\omega$) и импульса ($\hbar\mathbf{q}$). Кроме того, плоская волна – собственная функция оператора $\hat{\mathbf{s}}$ (27):

$$(\mathbf{I}/2)(e^{-\mathbf{I}(\omega t - \mathbf{q}\bullet\mathbf{x})}a) = e^{-\mathbf{I}(\omega t - \mathbf{q}\bullet\mathbf{x})}\mathbf{I}a/2 =$$
$$= (e^{-\mathbf{I}(\omega t - \mathbf{q}\bullet\mathbf{x})}a)(a\mathbf{I}a/2\overline{a}a) = (e^{-\mathbf{I}(\omega t - \mathbf{q}\bullet\mathbf{x})}a)(\mathbf{n}/2) \quad ,$$

где $\mathbf{n} = \overline{a}\mathbf{I}a/\overline{a}a$. Единичный вектор **n** определяет направление, проекция спина на которое имеет определенное значение ($+\frac{1}{2}$).

[3] После левостороннего умножения уравнения на $2\overline{\Psi}$имеем $\mathbf{n} = \overline{\Psi}\,\mathbf{I}\Psi / \overline{\Psi}\,\Psi$. С учетом второй из формул (6) и $\overline{\mathbf{I}} = -\mathbf{I}$ получаем: $\overline{\mathbf{n}} = -\mathbf{n}$, то есть **n** – вектор; с учетом второй из формул (7) $|\overline{\Psi}\mathbf{I}\Psi| = \overline{\Psi}\,\Psi$, так что $|\mathbf{n}| = 1$.

Ввиду изотропности пространства в теории обязано существовать преобразование, не затрагивающее значений наблюдаемых и позволяющее придать вектору **I** любое направление. Преобразование эквивалентности имеет вид

$$\mathbf{I} \to R\mathbf{I}\overline{R}, \qquad \Psi \to R\Psi. \qquad (30)$$

где R – единичный кватернион (если в (29) провести замены (30), то после левостороннего умножения на $\overline{R}$ и с учетом $R\overline{R} = \overline{R}R = 1$ уравнение вновь примет вид (29)). Первая из этих формул описывает изменение направления вектора **I** под действием оператора поворота $\hat{R}$(17). Вторая же формула соответствует действию на волновую функцию ортогонального оператора (см. (16) с Q = 1), что не сказывается на плотности вероятности ρ (3).

Перейдем к рассмотрению частицы во внешнем электромагнитном поле. Положив в (28) $U = e\varphi$ и совершив замену (24), получим волновое уравнение

$$\hbar\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\left[\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}(...)\mathbf{A}\right]^2\Psi + e\varphi\Psi. \quad (31)$$

Плотность вероятности $\rho = \overline{\Psi}\Psi$ удовлетворяет уравнению непрерывности, которое на кватернионном языке записывается в виде

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} - \mathrm{Sc}(\nabla\mathbf{J}) = 0 \qquad (32)$$

(с учетом (10) $-\mathrm{Sc}(\nabla\mathbf{J}) = \nabla \bullet \mathbf{J} = \mathrm{div}\mathbf{J}$). Здесь **J** дается выражением

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{2m}\left[(\nabla\overline{\Psi})\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}(\Psi\overleftarrow{\nabla})\right] - \frac{e}{mc}\overline{\Psi}\Psi\mathbf{A}, \quad (33)$$

что легко показать, используя формулу[4]

$$\mathrm{Sc}(\nabla\xi\eta) = \mathrm{Sc}\left[(\nabla\xi)\eta + \xi(\eta\overleftarrow{\nabla})\right]. \qquad (34)$$

Заметим, что волновое уравнение (31) и выражение (33) для **J** внешне идентичны своим аналогам для частицы без спина, а отличаются от них заменой $i \to \mathbf{I}$, заменой комплексного сопряжения на кватернионное сопряжение и существенностью порядка сомножителей.

Остановимся на структуре величины **J**. Определим вектор

$$\Omega \equiv \overline{\Psi}\mathbf{I}\Psi. \qquad (35)$$

Это вектор, поскольку $\overline{\Omega} = -\Omega$ (с учетом второго из соотношений (6) и $\overline{\mathbf{I}} = -\mathbf{I}$). Действуя на Ω оператором ∇, получаем сумму двух слагаемых, соответствующих тому, что Ψ и $\overline{\Psi}$ поочередно считаются постоянными, что (при необходимости) отражает индекс «с» (см. сноску[4]):

$$\begin{aligned}\nabla\Omega &= (\nabla\overline{\Psi})\mathbf{I}\Psi + \nabla\overline{\Psi}_c\,\mathbf{I}\Psi = \\ &= 2(\nabla\overline{\Psi})\mathbf{I}\Psi - (\nabla\overline{\Psi})\mathbf{I}\Psi + \nabla\overline{\Psi}_c\,\mathbf{I}\Psi\end{aligned}.$$

Подставив во второе и третье слагаемые ∇ (12), будем иметь:

$$\begin{aligned}\nabla\Omega = 2(\nabla\overline{\Psi})\mathbf{I}\Psi - \mathbf{i}\left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) - \\ - \mathbf{j}\left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial y}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right) - \mathbf{k}\left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial z}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right)\end{aligned} \quad (36)$$

После кватернионного сопряжения (с использованием второго из соотношений (6) и с учетом того, что при сопряжении векторы меняют знак) имеем:

$$\begin{aligned}\Omega\overleftarrow{\nabla} = 2\overline{\Psi}\mathbf{I}(\Psi\overleftarrow{\nabla}) + \left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\mathbf{i} + \\ + \left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial y}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial y}\right)\mathbf{j} + \left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial z}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right)\mathbf{k}\end{aligned} \quad (37)$$

Выражения в больших скобках – скаляры ($\overline{(...)} = (...)$, что проверяется с использованием второго из соотношений (6) и $\overline{\mathbf{I}} = -\mathbf{I}$), так что они коммутируют с **i**, **j**, **k**; учитывая это, для полуразности (36) и (37) находим:

$$\begin{aligned}(\nabla\Omega - \Omega\overleftarrow{\nabla})/2 = (\nabla\overline{\Psi})\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}(\Psi\overleftarrow{\nabla}) - \\ - \mathbf{i}(...) - \mathbf{j}(...) - \mathbf{k}(...)\end{aligned}.$$

С учетом (10) левая часть равенства есть ∇ × Ω = rot Ω, а сумма первых двух слагаемых в правой части равенства с учетом (33) равна $\frac{2m}{\hbar}\mathbf{J} + \frac{2e}{\hbar c}\overline{\Psi}\Psi\mathbf{A}$; в итоге получаем:

$$\mathbf{J} = \mathbf{j} + \frac{\hbar}{2m}\mathrm{rot}\Omega, \qquad (38)$$

$$\begin{gathered}j_i \equiv \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x_i}\mathbf{I}\Psi - \overline{\Psi}\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial x_i}\right) - \frac{e}{mc}\overline{\Psi}\Psi A_i \\ (i = x, y, z)\end{gathered} \quad (39)$$

Заметим, что второе слагаемое в (38) не вносит вклада в дивергенцию, под знаком которой в уравнении непрерывности (32) фигурирует **J**. Поэтому в качестве плотности потока вероятности вместо **J** (38) может быть принято выражение $\mathbf{j} + \varepsilon\frac{\hbar}{2m}\mathrm{rot}\Omega$ с произвольным множителем ε. Однако только при ε = 0 уравнения, определяющие эволюцию ρ, оказываются по форме близкими к уравнениям классической гидродинамики (см. ниже). Так что за плотность потока вероятности целесообразно принять величину **J**.

Следует отметить, что, в отличие от плотности

---

[4] Согласно общим правилам дифференцирования ∇ξη есть сумма двух слагаемых, соответствующих тому, что ξ и η поочередно считаются постоянными, что (в случае необходимости) отражает индекс «с»: ∇ξη = (∇ξ)η + $\nabla\xi_c\eta$. После взятия скалярной части с использованием третьего из соотношений (6) имеем: Sc (∇ξη) = Sc [(∇ξ)η] + Sc ($\xi_c\eta\overleftarrow{\nabla}$). Второе слагаемое (с учетом того, что ξ_c считается постоянным) можно записать Sc [$\xi_c(\eta\overleftarrow{\nabla})$], после чего индекс «с» опустить; в итоге получаем (34).

потока вероятности, плотность электрического тока $\mathbf{J}^e$ определяется однозначно. После двукратного дифференцирования по времени среднего значения координаты $\langle \mathbf{x} \rangle = \int \Psi \Psi \mathbf{x} dV$ с использованием волнового уравнения (31) получается уравнение Эренфеста $\frac{m}{2}\frac{d^2\langle \mathbf{x} \rangle}{dt^2} = \int \left(e\rho\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{J}\times\mathbf{H} \right) dV$, где $\mathbf{J}$ дается (38). Таким образом, $\mathbf{J}^e = e\mathbf{J} = e\mathbf{j} + \frac{e\hbar}{2m}\mathrm{rot}\Omega$.

После перехода к традиционному описанию по правилам (8) и (9) выражение для $\mathbf{J}^e$ принимает известный вид [4]:

$$\mathbf{J}^e = \frac{ie\hbar}{2m}\left[(\nabla\psi^+)\psi - \psi^+(\nabla\psi) \right] - \frac{e^2}{mc}\psi^+\psi\mathbf{A} +$$

$$+\frac{e\hbar}{2m}\mathrm{rot}(\psi^+\sigma\psi).$$

Как отмечалось, волновое уравнение (31) внешне идентично уравнению Шредингера для частицы без спина. Между тем, если перейти к развернутой форме записи с использованием выражения (22) для $\hat{p}$, то в правой части указанного уравнения появится слагаемое $-\frac{e\hbar}{2mc}\mathbf{I}\Psi(\mathbf{A}\overleftarrow{\nabla})$; с учетом (13) и $\mathbf{H} \equiv \mathrm{rot}\,\mathrm{A}$, появится член $\frac{e\hbar}{2mc}\mathbf{I}\Psi\mathbf{H}$, соответствующий взаимодействию с магнитным полем собственного магнитного момента частицы. После проведения необходимых преобразований уравнение (31) приводится к виду

$$\hbar\mathbf{I}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i \right)^2\Psi + \frac{e\hbar}{2m}\mathbf{I}\Psi\mathbf{H} + e\varphi\Psi, \quad (40)$$

где операторы $\hat{p}_i$ даются (20).

Перейдем к традиционному описанию. Воспользовавшись преобразованием эквивалентности (30), придадим вектору $\mathbf{I}$ значение $\mathbf{I} = \mathbf{k}$, а также подставим $\mathbf{H} = \mathbf{i}H_x + \mathbf{j}H_y + \mathbf{k}H_z$. После использования формул соответствия (9) уравнение (40) принимает вид уравнения Паули

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i \right)^2\psi - \frac{e\hbar}{2mc}(\sigma\bullet\mathbf{H})\psi + e\varphi\psi,$$

где $\hat{p}_i = -i\hbar\,\partial/\partial x_i$, а σ – матричный вектор Паули.

Гидродинамическая формулировка уравнения Паули

Гидродинамическая формулировка квантовой механики была предложена Маделунгом [5] и первоначально относилась к случаю частицы без спина. Речь шла о выводе уравнений, определяющих эволюцию плотности вероятности. Использование гидродинамических уравнений в ряде случаев облегчает рассмотрение и оказывается весьма эффективным [6].

Уравнение Шредингера для частицы в электромагнитном поле, плотность вероятности и плотность потока вероятности имеют известный вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i \right)^2\Psi + e\varphi\Psi, \quad (41)$$

$$\rho = \Psi^*\Psi,$$

$$j_i \equiv \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial x_i}\Psi - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x_i} \right) - \frac{e}{m}\Psi^*\Psi A_i \quad (42)$$

где $\hat{p}_i = -i\hbar\,\partial/\partial x_i$. После подстановки в (42)

$$\Psi = \sqrt{\rho}e^{i\alpha} \quad (43)$$

получаем $j_i = \rho v_i$, где «скорость течения» дается выражением

$$v_i = \frac{\hbar}{m}\frac{\partial\alpha}{\partial x_i} - \frac{e}{mc}A_i; \quad (44)$$

с учетом $\mathbf{H} \equiv \mathrm{rot}\,\mathrm{A}$ для скорости имеем:

$$\frac{\partial v_k}{\partial v_i} - \frac{\partial v_i}{\partial v_k} = -\frac{e}{mc}\varepsilon_{ikl}H_l, \quad (45)$$

где ε_{ikl} – абсолютно антисимметричный тензор. Если подставить (43) в (41) и отделить друг от друга вещественную и мнимую части, то получаются два уравнения, одно из которых есть уравнение непрерывности

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho\mathbf{v}) = 0, \quad (46)$$

где $\mathbf{v}$ дается (44). Второе же уравнение определяет производную по времени фазы α, и после взятия градиента его обеих частей с учетом (44) получается уравнение

$$\rho\left[\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{v} \right]_i = \frac{\partial T_k}{\partial x_k} + \frac{\rho}{m}\left(e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{H} \right)_i, \quad (47)$$

где «тензор напряжений» T_{ik} дается выражением[5]

$$T_k = \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2\left(\frac{\partial^2\rho}{\partial x_i\partial x_k} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_k} \right). \quad (48)$$

Перейдем к случаю частицы со спином. Гидродинамические уравнения, соответствующие уравнению Паули, впервые были получены Такабаяси [7]. В работе [8] был приведен более простой вывод указанных уравнений, однако использование кватернионной формулировки уравнения Паули позволяет сделать это еще проще – в полной аналогии со случаем частицы без спина. Ниже мы приведем лишь схему вывода гидродинамических уравнений; необходимые преобразования легко

---

[5] Случаю гидродинамики жидкости отвечало бы $T_{ik} = -p\delta_{ik}$ (p – давление) и (47) имело бы вид уравнения Эйлера.

проводятся с использованием таблицы умножения (4), экспоненциальной формы записи кватерниона, формулы Эйлера, а также формул (6) и (34).

Для каждой физической величины (которой в общем случае соответствует некоторый оператор $\hat{L}$) можно формально определить ее гидродинамическое значение $L(\mathbf{x})$ потребовав, чтобы величина $\int\rho L(\mathbf{x})dV$ равнялась квантово-механическому среднему $\langle L\rangle = \int\overline{\Psi}\hat{L}\Psi dV$. Приравняв подынтегральные функции обеих величин, применительно к случаю $\hat{L} = \hat{\mathbf{s}}$, где $\hat{\mathbf{s}}$ дается (27), получим гидродинамическое значение спина:

$$\mathbf{s} = \mathbf{n}/2,\ \mathbf{n} \equiv \overline{\Psi}\mathbf{I}\Psi/\rho, \tag{49}$$

($\mathbf{n}$ – единичный вектор, см. сноску[3]).

Аналогом (43) является следующее представление волновой функции

$$\Psi = \sqrt{\rho}e^{\mathbf{i}\alpha}e^{\mathbf{j}\beta}e^{\mathbf{i}\gamma} \tag{50}$$

(см. (15)). Воспользовавшись преобразованием эквивалентности (30), придадим вектору $\mathbf{I}$ значение $\mathbf{I} = \mathbf{i}$ После подстановки (50) в (49) получим:

$$\mathbf{s} = \mathbf{i}\cos 2\beta + \mathbf{j}\sin 2\beta\sin 2\gamma + \mathbf{k}\sin 2\beta\cos 2\gamma/2 \tag{51}$$

Подставив (50) в (39) (где также считаем $\mathbf{I} = \mathbf{i}$), будем иметь $j_i = \rho v_i$, где «скорость течения» дается выражением

$$v_i = \frac{\hbar}{m}\left(\frac{\partial\alpha}{\partial x_i} + \cos 2\beta\frac{\partial\gamma}{\partial x_i}\right) - \frac{e}{mc}A_i$$

(аналог (44)). С использованием (51) получим условие (аналог (45))

$$\frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = \frac{4\hbar}{m}\mathbf{s}\bullet\left[\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial x_i}\times\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial x_k}\right] - \frac{e}{mc}\varepsilon_{ikl}H_l. \tag{52}$$

В дальнейшем изложении предварительно отметим случай свободной частицы. Волновое уравнение дается (29), где $U = 0$. Это уравнение (обе части которого помножены на $-\mathbf{I}/\hbar$) и уравнение, ему сопряженное, имеют вид

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m}\mathbf{I}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_k^2},\ \frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\overline{\Psi}}{\partial x_k^2}\mathbf{I}. \tag{53}$$

Продифференцируем по времени j_i(39), где положено $A_i = 0$; с использованием (53) получим:

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2\left(\frac{\partial^2\overline{\Psi}}{\partial x_i\partial x_k}\Psi + \overline{\Psi}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x_i\partial x_k} - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x_i}\frac{\partial\Psi}{\partial x_k} - \frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x_k}\frac{\partial\Psi}{\partial x_i}\right)\right].$$

Квадратная скобка может быть выражена через $\rho = \overline{\Psi}\Psi$, $\mathbf{j}$(39) и $\mathbf{\Omega}$ (35):

$$\frac{\partial j_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2\left(\frac{\partial^2\rho}{\partial x_i\partial x_k} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial\mathbf{\Omega}}{\partial x_i}\bullet\frac{\partial\mathbf{\Omega}}{\partial x_k}\right) - \frac{j_i j_k}{\rho}\right].$$

Подставив сюда $j_i = \rho v_i$, и $\mathbf{\Omega} = 2\rho\mathbf{s}$ (см. (35) и (49)), с учетом (46) получим:

$$\rho\left[\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{v}\right]_i = \frac{\partial T_k}{\partial x_k}, \tag{54}$$

где «тензор напряжений» T_{ik} (аналог (48)) дается выражением

$$T_{ik} = \left(\frac{\hbar}{2m}\right)^2\left(\frac{\partial^2\rho}{\partial x_i\partial x_k} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_k} - 4\rho\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial x_i}\bullet\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial x_k}\right). \tag{55}$$

Дифференцируя $\mathbf{\Omega}$(35), используя (53), будем иметь

$$\frac{\partial\mathbf{\Omega}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left[\left(\frac{\hbar}{2m}\right)\left(\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial x_k}\Psi - \overline{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial x_k}\right)\right].$$

Квадратная скобка может быть выражена через ρ и $\mathbf{\Omega}$:

$$\frac{\partial\mathbf{\Omega}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\hbar}{2m\rho}\mathbf{\Omega}\times\frac{\partial\mathbf{\Omega}}{\partial x_k} - \mathbf{\Omega}v_k\right).$$

Подставив сюда $\mathbf{\Omega} = 2\rho\mathbf{s}$, после преобразований получим:

$$\rho\left[\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial t} + (\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{s}\right] = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\hbar}{m}\rho\mathbf{s}\times\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial x_k}\right). \tag{56}$$

В присутствии электромагнитного поля, то есть при использовании волнового уравнения (31), вместо (54) и (56) будем иметь:

$$\rho\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{v}\right]_i = \frac{\partial T_k}{\partial x_k} + \frac{\rho}{m}\left[e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{v}\times\mathbf{H} + \right.$$
$$\left. + (\boldsymbol{\mu}\bullet\nabla)\mathbf{H} + \boldsymbol{\mu}\times\mathrm{rot}\mathbf{H}\right]_i,$$

$$\rho\left[\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial t} + (\mathbf{v}\bullet\nabla)\mathbf{s}\right] = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\hbar}{m}\rho\mathbf{s}\times\frac{\partial\mathbf{s}}{\partial x_k}\right) + \frac{\rho}{\hbar}\boldsymbol{\mu}\times\mathbf{H},$$

где T_{ik} дается (55), а $\boldsymbol{\mu} = (e\hbar/mc)\mathbf{s}$ – гидродинамическое значение магнитного момента частицы. Эти два уравнения вместе с уравнением непрерывности (46) определяют эволюцию плотности вероятности ρ, «скорости течения» $\mathbf{V}$ и гидродинамического значения спина $\mathbf{s}$. В указанных уравнениях $\mathbf{V}$ и $\mathbf{s}$ – величины не произвольные: $\mathbf{v}$ удовлетворяет условию (52), $|\mathbf{s}| = 1/2$ (см. (49)).

Заключение

Рассмотренная в статье квантово-механическая схема соответствует тому, что частице сопоставляется не комплексная, а кватернионная волновая функция (2). Описание частицы (формулы (23)) внешне идентично описанию частицы без спина (формулы (18), в которых Ψ – комплексная функция). Формальной основой описания частицы по-прежнему является классическая функция Гамильтона $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$, не зависящая от спина. Несмотря на это, волновое уравнение (определяемое

(23)) описывает частицу со спином ½. Кроме того, при «включении» магнитного поля по правилу (24) автоматически оказывается учтенным взаимодействие с полем собственного магнитного момента частицы, для которого получается правильное значение.

Однокомпонентность кватернионной волновой функции (2) означает, что в используемом формализме отсутствуют матрицы, что существенно упрощает рассмотрение. В качестве иллюстрации простоты кватернионного описания частицы со спином приведена схема вывода гидродинамических уравнений, соответствующих уравнению Паули.

Литература

1. *Микаэлян М. А.*//Доклады Академии наук. 2005. Т. 400. № 2. С. 173.
2. *Finkelstein D. et al.*//J. Math. Phys. 1962. V. 3. P. 207.
3. *Фаддеев Д. К.* Лекции по алгебре. – М.: Наука, 1984.
4. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. – М.: Наука, 1974.
5. *Madelung E.*//Z. Physik. 1926. V. 40. P. 322.
6. *Кузелев М. В., Рухадзе А. А.*//УФН. 1999. Т. 169. № 6. С. 687.
7. *Takabayasi T.*//Progr. Theor. Phys. 1955. V. 14. P. 283.
8. *Микаэлян М. А.*//Прикладная физика. 2003. № 3. С. 5.

Quaternion algebra and Pauli equation

M.A. Mikaelyan

A.M. Prokhorov General Physics Institute, Russian Academy of Sciences
38 Vavilov str., Moscow, 119991, Russia
E-mail: mikhail@bk.ru

If we use quaternion algebra instead of spinor formalism, then the description of spin particle appears to be identical to the description of spinless particle. At the same time, unlike standard approach, "switching" of magnetic field by the use of well-known substitution in momentum operator leads to the correct value of intrinsic magnetic moment of the particle.

PACS: 03.65.-w, 03.65.Ca
Keywords: quantum mechanics, quaternion, Pauli equation, hydrodynamic formulation.

Bibliography – 8 references *Received February 12, 2013*