Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Й. Брюнинг, В. В. Грушин, С. Ю. Доброхотов,
Т. Я. Тудоровский, Обобщенное преобразование Фолди–
Вутхайзена и псевдодифференциальные операторы,
ТМФ, 2011, том 167, номер 2, 171–192

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6632>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 04:30:59

© 2011 г.

Й. Брюнинг*, В. В. Грушин^{†‡},
С. Ю. Доброхотов^{‡§}, Т. Я. Тудоровский[¶]

ОБОБЩЕННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФОЛДИ–ВУТХАЙЗЕНА И ПСЕВДОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Показано, что преобразование Фолди–Вутхайзена и его обобщения упрощаются, если использовать технику псевдодифференциальных операторов, что также позволяет получать оценки точности перехода от уравнения Дирака к редуцированным уравнениям для электронов и позитронов. Используемые метод и приемы могут быть полезны не только для изучения асимптотических решений уравнения Дирака, но также и в других задачах.

Ключевые слова: уравнение Дирака, преобразование Фолди–Вутхайзена, адиабатическое приближение, псевдодифференциальные операторы.

1. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА ДЛЯ СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЫ

Преобразование Фолди–Вутхайзена [1] позволяет получить из уравнения Дирака нерелятивистские уравнения типа уравнения Паули для квантовой динамики электронов и позитронов с кинетической энергией, много меньшей mc^2 ($v \ll c$). Оно применимо в предположении о малости электрических и магнитных полей и представляет собой процедуру, состоящую из последовательного применения унитарных преобразований. Имеются обобщения преобразования Фолди–Вутхайзена, справедливые в широком диапазоне энергий вплоть до релятивистских (см., например, [2]).

Для того чтобы последующие вычисления и преобразования стали более понятными, напомним некоторые хорошо известные факты, относящиеся к уравнению

*Humboldt University, Berlin, Germany. E-mail: bruening@mathematik.hu-berlin.de

[†]Московский государственный институт электроники и математики, Москва, Россия.
E-mail: vvgrushin@mail.ru

[‡]Московский физико-технический институт, Москва, Россия

[§]Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия.
E-mail: dobr@ipmnet.ru

[¶]Institute for Molecules and Materials Radboud, University of Nijmegen, Nijmegen, The Netherlands. E-mail: T.Tudorovsky@science.ru.nl

Дирака [3]. Уравнение Дирака описывает квантовое релятивистское движение электронов и позитронов. Мы предполагаем, что электрическое и магнитное поля $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ описываются четырехмерным вектор-потенциалом $(\mathbf{A}, \Phi)$, $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$. Согласно уравнениям Максвелла электрическое и магнитное поля находятся как

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla_x \Phi, \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}.$$

Уравнение Дирака в пространстве координата-время $\mathbb{R}_x^3 \times R_t$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \Psi, \quad \hat{\mathcal{H}} = c\alpha \hat{\pi} + \beta mc^2 + e\Phi, \quad (1.1)$$

где

$$\alpha = \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix},$$

$\hat{\pi} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla_x$, E – единичная (2×2) -матрица, $\hbar, e < 0, m$ – постоянная Планка, заряд и масса электрона соответственно, $\sigma_i, i = 1, 2, 3$, – стандартные матрицы Паули, удовлетворяющие равенствам $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} E + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$, где ε_{ijk} – абсолютно антисимметричный тензор.

Предположим сначала, что поля $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ отсутствуют, но сохраним потенциалы в виде констант $(\mathbf{A}, \Phi)$ в уравнении Дирака. Введем вектор-столбец $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$, состоящий из импульсов, сопряженных координатам $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$. Тогда, используя преобразование Фурье по переменным $\mathbf{x}$, легко диагонализировать уравнение Дирака для фурье-образа $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ волновой функции $\Psi(\mathbf{x}, t)$.

Уравнение для $\tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial t} = \mathcal{H} \tilde{\Psi}, \quad (1.2)$$

где $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = c\alpha \boldsymbol{\pi} + \beta mc^2 + e\Phi$, $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$. Коэффициенты последнего уравнения – константы, поэтому его диагонализация сводится к диагонализации самосопряженной матрицы $\mathcal{H}$. Ее собственные значения и векторы хорошо известны (см. [3]), приведем их для полноты изложения вместе с доказательством. Обозначим $\mathbf{n} = \boldsymbol{\pi}/|\boldsymbol{\pi}|$, $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi}) = \sigma_1 \pi_1 + \sigma_2 \pi_2 + \sigma_3 \pi_3$, $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{n}) = \sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3$.

ЛЕММА 1. *Собственные значения матрицы $\mathcal{H}$ являются гладкими функциями аргумента $\mathbf{p}$ и имеют вид*

$$\varepsilon^\pm(\boldsymbol{\pi}) = \pm c \sqrt{m^2 c^2 + \boldsymbol{\pi}^2} + e\Phi. \quad (1.3)$$

Каждое из них дважды вырожденно и соответствующие ортонормированные собственные векторы могут быть выбраны как вектор-столбцы следующих матриц-функций размера 2×4 , гладко зависящих от $\boldsymbol{\pi}$:

$$\chi_0^+ = \xi(\boldsymbol{\pi}) \equiv \begin{pmatrix} C_+ E \\ C_- (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{n}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} C_+ E \\ \tilde{C}_- (\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi})/mc \end{pmatrix}, \quad \chi_0^- = -i\alpha_2 \beta \xi(-\boldsymbol{\pi}), \quad (1.4)$$

где

$$\begin{aligned} C_+(\pi) &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{mc}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \right)}, & C_-(\pi) &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{mc}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \right)}, \\ \tilde{C}_-(\pi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m^2 c^2}{mc\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + m^2 c^2 + \pi^2}} \equiv \frac{mc}{|\pi|} C_-(\pi). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Матрицы $\chi_0^\pm$ удовлетворяют условиям нормировки

$$\chi_0^{\pm*} \chi_0^\pm = E, \quad \chi_0^{\pm*} \chi_0^\mp = 0. \quad (1.6)$$

Здесь и ниже индекс * означает эрмитово сопряжение.

ЗАМЕЧАНИЕ. Мы приводим два представления для ξ . Иногда удобнее использовать формулу, основанную на коэффициентах C_+ , C_- , поскольку $C_+^2 + C_-^2 = 1$. С другой стороны, формула, основанная на C_+ , $\tilde{C}_-$, содержит объекты, гладко зависящие от π при $\pi \rightarrow 0$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Представим собственный вектор z матрицы $\mathcal{H}$, соответствующий значению ε , в виде $z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$, где z_j – двумерные векторы. Тогда уравнение $\mathcal{H}z = \lambda z$ может быть переписано в виде

$$\begin{pmatrix} (mc^2 + e\Phi - \varepsilon)E & c(\sigma, \pi) \\ c(\sigma, \pi) & (-mc^2 + e\Phi - \varepsilon)E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (1.7)$$

Из второй строки (1.7) найдем

$$z_2 = \frac{c(\sigma, \pi)}{mc^2 - e\Phi + \varepsilon} z_1.$$

Подставим это выражение в первую строку (1.7) и с учетом равенства $(\sigma, \pi)^2 = \pi^2$ получим $m^2 c^4 + c^2 \pi^2 - (\varepsilon - e\Phi)^2 = 0$. Это дает собственные значения (1.3) и их двукратное вырождение. Чтобы получить первую матрицу в (1.4), предположим, что z_1, z_2 – (2×2) -матрицы, и положим $z_1(\pi, \mathbf{x}) = C_+(\pi, \mathbf{x})E$, где $C_+(\pi, \mathbf{x})$ – нормировочная константа. Из равенства $z^* z = E$ нетрудно найти уравнение для $C_+(\pi, \mathbf{x})$:

$$C_+^2 \left(1 + \frac{\pi^2}{(mc^2 + \sqrt{m^2 c^4 + \pi^2})^2} \right) = 1.$$

Это дает формулу для $\chi_0^+(\pi)$. Формула для $\chi_0^-(\pi)$ может быть получена с помощью аналогичных вычислений, однако проще получить χ_0^- с помощью принципа зарядового сопряжения. Мы вернемся к упомянутому принципу несколько ниже.

Теперь построим гладкую матричнозначную функцию размера 4×4

$$U(\mathbf{p}, \mathbf{A}) = (\chi_0^+, \chi_0^-),$$

введем две двумерные вектор-функции $\tilde{\varphi}^+(\mathbf{p}, t)$, $\tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}, t)$ и четырехмерную вектор-функцию $\tilde{\varphi} = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}^+(\mathbf{p}, t) \\ \tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}, t) \end{pmatrix}$, полагая

$$\tilde{\Psi} = U(\mathbf{p}, \mathbf{A})\tilde{\varphi} = \chi_0^+ \tilde{\varphi}^+ + \chi_0^- \tilde{\varphi}^-. \quad (1.8)$$

Обозначим через $\varphi^\pm(\mathbf{x}, t)$ обратное преобразование функций $\tilde{\varphi}^\pm(\mathbf{p}, t)$. Возвращаясь к исходным переменным, вместо (1.8) получим

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \hat{U}\varphi = \hat{\chi}_0^+\varphi^+(\mathbf{x}, t) + \hat{\chi}_0^-\varphi^-(\mathbf{x}, t), \quad (1.9)$$

где

$$\hat{U} = U(-i\hbar\nabla_x, \mathbf{A}), \quad \hat{\chi}_0^+ = \chi_0^+ \left(-i\hbar\nabla_x - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right), \quad \hat{\chi}_0^- = \chi_0^- \left(-i\hbar\nabla_x - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right). \quad (1.10)$$

СЛЕДСТВИЕ. 1. U есть матричная функция из (1.8), гладко зависящая от $\mathbf{p}$ и $\mathbf{A}$. Она диагонализует уравнение Дирака (1.2): функции $\tilde{\varphi}^+(\mathbf{p}, t)$, $\tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}, t)$ удовлетворяют уравнениям

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\varphi}^\pm(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \varepsilon^\pm(\boldsymbol{\pi}) \tilde{\varphi}^\pm(\mathbf{p}, t). \quad (1.11)$$

2. $\hat{U} = U(-i\hbar\nabla_x, \mathbf{A})$ есть унитарный псевдодифференциальный оператор, диагонализующий уравнение Дирака (1.1): функции $\varphi^+(\mathbf{x}, t)$, $\varphi^-(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяют системе псевдодифференциальных уравнений

$$i\hbar \frac{\partial \varphi^\pm(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{L}^\pm \varphi^\pm(\mathbf{x}, t), \quad (1.12)$$

$$\text{где } \hat{L}^\pm = \varepsilon^\pm(-i\hbar\nabla_x - \frac{e}{c}\mathbf{A}).$$

Вектор-функции $\varphi^+(\mathbf{x}, t)$ и $\varphi^-(\mathbf{x}, t)$ из (1.9) описывают квантовое движение электрона и позитрона соответственно. В нерелятивистском случае $|\boldsymbol{\pi}| \ll mc^2$. Сохраняя два члена разложения по $\boldsymbol{\pi}$ в $\varepsilon^\pm(\boldsymbol{\pi})$, имеем

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^\pm(\mathbf{p}, t)}{\partial t} = \left(\pm \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\Phi \right) \tilde{\psi}^\pm(\mathbf{p}, t), \quad (1.13)$$

где

$$\tilde{\varphi}^\pm(\mathbf{p}, t) = \exp\left(\mp it \frac{mc^2}{\hbar}\right) \tilde{\psi}^\pm(\mathbf{p}, t).$$

Фурье-образы $\psi^\pm(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяют уравнениям Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi^\pm(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(\pm \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla_x - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\Phi \right) \psi^\pm(\mathbf{x}, t). \quad (1.14)$$

Знак “+” соответствует электрону, знак “−” – позитрону. Ясно, что последние уравнения получаются квантованием $\boldsymbol{\pi}$.

2. ПСЕВДОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ АНЗАЦ ДЛЯ ОБОБЩЕННОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФОЛДИ–ВУТХАЙЗЕНА

Преобразование Фолди–Вутхайзена представляет собой аналог приведенных вычислений в присутствии слабых электрического и магнитного полей. Введем характерные параметры: комптоновскую длину волны $\lambda_c = \hbar/(mc)$ и энергию mc^2 .

Предположим, что для электрического и магнитного полей $\mathbf{E}$, $\mathbf{H}$ справедливы следующие оценки:

$$\left| \frac{e\lambda_c \mathbf{E}}{mc^2} \right| \ll 1, \quad \left| \frac{e\lambda_c \mathbf{H}}{mc^2} \right| \ll 1.$$

Эти неравенства означают, что потенциалы $\mathbf{A}$, Φ изменяются медленно как по времени t , так и по пространственным переменным $\mathbf{x}$. Для большей строгости введем пространственный масштаб l_0 , характерное время $T = (l_0/\lambda_c)\omega_c^{-1}$ и малый “адиабатический” параметр $\mu = \lambda_c/l_0 \ll 1$. Напишем $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{x}/l_0, t/T)$, $\Phi = \Phi(\mathbf{x}/l_0, t/T)$ и предположим, что $\mathbf{A}(\mathbf{x}', t')$, $\Phi(\mathbf{x}', t')$ – гладкие функции аргументов $\mathbf{x}'$, t' . Перейдем к безразмерным переменным $\mathbf{x}' = \mathbf{x}/L$, $t' = t/T$, к потенциалам $e'\Phi' = e\Phi/(mc^2)$, $e'\mathbf{A}' = e\mathbf{A}/(mc^2)$, $e' = e/|e| = \pm 1$, и поделим уравнение (1.1) на mc^2 . Для упрощения обозначений опустим “штрих” и окончательно получим уравнение Дирака в виде

$$i\mu \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \mathcal{H}(-i\mu \nabla_x, \mathbf{x}) \Psi, \quad \mathcal{H} = \alpha(-i\mu \nabla_x - e\mathbf{A}) + \beta + e\Phi. \quad (2.1)$$

Такие же замены мы сделаем в формулах (1.3)–(1.5), которые формально эквивалентны тому, что мы полагаем $m = c = 1$ и оператор $-i\hbar \nabla_x$ заменяется оператором $-i\mu \nabla_x$. Наша цель состоит в построении унитарного преобразования (оператора) $\hat{U}$ уравнения (1.1), приводящего его к двум уравнениям (1.12) для двумерных вектор-функций $\varphi^+(\mathbf{x}, t)$ и $\varphi^-(\mathbf{x}, t)$. Как правило, точно это сделать не удастся. Фолди и Вутхайзен предложили представить эту процедуру в виде последовательных унитарных преобразований, приближенных как по (малому) параметру μ , так и в предположении малости оператора длинного импульса $\hat{\pi}$. Вычисления, приведенные в работе [1] и во многих других работах (см. статьи [2] и библиографию в них), довольно громоздкие. Здесь мы хотим показать, что, используя псевдодифференциальные операторы и операторный метод [4], развитый для адиабатических задач [5], [6], можно получить более общие формулы для разложения как оператора $\hat{U}$, так и операторов L без предположения малости $\hat{\pi}$. В процессе этих вычислений удобно принять во внимание принцип зарядового сопряжения (см. [3], а также вычисления ниже), который позволяет исследовать только электронную часть оператора $\hat{U}$, а именно оператор $\hat{\chi}^+$ и уравнение (1.12) для функции $\varphi^+(\mathbf{x}, t)$. Вторая часть оператора $\hat{U}$ и функция $\varphi^-(\mathbf{x}, t)$ получаются из вычислений для электрона в результате замены $\hat{\pi} \rightarrow -\hat{\pi}$ и заряда $e \rightarrow -e$ и комплексного сопряжения некоторых функций.

Цель последующих исследований может быть сформулирована следующим образом: мы ищем некоторые “электронные решения” уравнения (2.1) в виде [5], [6]

$$\Psi = \hat{\chi} \varphi^\pm(\mathbf{x}, t), \quad (2.2)$$

предполагая, что функция $\varphi^\pm(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяет уравнению (2.2), которое в безразмерных переменных имеет вид

$$i\mu \frac{\partial \varphi^\pm(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{L}^\pm \varphi^\pm(\mathbf{x}, t). \quad (2.3)$$

Здесь $\hat{\chi}^\pm$ и $\hat{L}^\pm$ – μ -псевдодифференциальные операторы, т. е. функции от операторов $\hat{\mathbf{p}} = -i\mu \nabla_x$ и $\mathbf{x}$. Операторы $\hat{\chi}^\pm$ можно назвать *сплетающими* или *восстанавливающими*, операторы $\hat{L}^\pm$ связаны с хорошо известной *подстановкой Пайерлса* (см. [7]).

Сделаем важное замечание. Операторы $\hat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x$ и $\mathbf{x}$ не коммутируют, конструкция функций от операторов не единственна и зависит от способа упорядочения этих операторов. Два способа упорядочения (или “квантования”) используются существенно чаще других. В первом случае, который естественно назвать упорядочением Фейнмана–Маслова, имеем

$$\hat{\chi}^{\pm} = \chi^{\pm}\left(\frac{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right), \quad \hat{L}^{\pm} = L^{\pm}\left(\frac{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x, \quad (2.4)$$

с гладкими символами $\chi(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$ и $L(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$, допускающими асимптотические разложения

$$\begin{aligned} \chi^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) &= \chi_0^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \mu\chi_1^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \mu^2\chi_2^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \dots, \\ L^{\pm} &= L_0^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \mu L_1^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \mu^2 L_2^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \dots. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Следуя Фейнману, цифрами над операторами мы обозначаем порядок действия этих операторов (см. [4]). Второй случай соответствует квантованию по Вейлю, и мы имеем

$$\hat{\chi}^{\pm} = \chi_w^{\pm}\left(\frac{1}{\hat{\mathbf{p}} + \frac{3}{2}\hat{\mathbf{p}}}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right), \quad \hat{L}^{\pm} = L_w^{\pm}\left(\frac{1}{\hat{\mathbf{p}} + \frac{3}{2}\hat{\mathbf{p}}}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right), \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x, \quad (2.6)$$

с вейлевскими символами $\chi_w(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$ и $L_w(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$, имеющими асимптотические разложения, аналогичные (2.5). Подчеркнем, что операторы в (2.4) и (2.6) те же самые, но их символы, вообще говоря, различны из-за различных способов упорядочения (квантования) действия операторов $\hat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x$ и $\mathbf{x}$. С теоретической точки зрения вейлевское квантование более удобно, поскольку оно автоматически дает, по крайней мере, симметричные операторы $\hat{L}^{\pm}$, если имеется равенство $L^* = L$. Но наш опыт решения многих задач показывает, что упорядочение Фейнмана–Маслова существенно более удобно с практической точки зрения в смысле получения явных окончательных формул. Можно сказать, что прагматичный путь состоит сначала в нахождении символов соответствующих операторов (коэффициентов их асимптотических разложений), основанных на упорядочении Фейнмана–Маслова, и затем в переходе (пересчете) к псевдодифференциальным операторам, основанном на вейлевском упорядочении. Приведем соответствующую формулу пересчета, основанную на “самодействии внутри псевдодифференциального оператора”.

Именно, определим функцию $b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu, \gamma) = a(\mathbf{p} - i\gamma\mu\nabla_x, \mathbf{x}, \mu)$, $\gamma \in \mathbb{R}$, с помощью формулы

$$b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu, \gamma) = a\left(\mathbf{p} - i\gamma\mu \frac{2}{\mu\nabla_x}, \frac{1}{\mathbf{x}}, \mu\right)1.$$

Например, если $a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \mathbf{p}^2 g(\mathbf{x})$, $x \in \mathbb{R}$, то

$$\left(\mathbf{p} - i\gamma\mu \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 g(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^2 g - 2i\gamma\mu \frac{\partial g}{\partial x} - \gamma^2 \mu^2 \frac{\partial^2 g}{\partial x^2}.$$

Пусть $\hat{L} = L\left(\frac{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \frac{2}{\hat{\mathbf{x}}}, \mu\right)$ есть псевдодифференциальный оператор с символом $L(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$. Тогда вейлевский символ $L_W(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ этого оператора связан с $L(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ формулой [4]

$$\begin{aligned} L_W(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) &= L\left(\mathbf{p} + \frac{i\mu}{2}\nabla_x, \mathbf{x}, \mu\right) = (\text{по крайней мере, формально}) = \\ &= \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \left(\frac{-i\mu}{2}\right)^{|\nu|} \frac{\partial^{2|\nu|} L}{\partial x^\nu \partial p^\nu}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Наконец, отметим, что все последующие рассуждения, как и преобразование Фолди–Вутхайзена, находятся в рамках адиабатического приближения, и используемый подход – это, на наш взгляд, очень удобная его реализация.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СИМВОЛОВ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТИВНЫХ ГАМИЛЬТониАНОВ И СПЛЕТАЮЩИХ ОПЕРАТОРОВ

3.1. Основные уравнения. Подставляя (2.2) в (2.1) и принимая во внимание подстановку Пайерлса (2.3), получим уравнение

$$\left(\hat{\mathcal{H}}\hat{\chi}^\pm - \hat{\chi}^\pm \hat{L}^\pm - i\mu \frac{\partial \hat{\chi}^\pm}{\partial t}\right)\varphi^\pm = 0.$$

Очевидно, это уравнение справедливо для любой функции $\varphi^\pm$, если справедливо следующее операторное равенство:

$$\hat{\mathcal{H}}\hat{\chi}^\pm - \hat{\chi}^\pm \hat{L}^\pm - i\mu \frac{\partial \hat{\chi}^\pm}{\partial t} = 0. \quad (3.1)$$

Теперь перейдем от операторного уравнения к уравнению для символов этих операторов, получим

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\left(\mathbf{p} - i\mu \frac{1}{\nabla_x}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t\right)\chi^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = \\ = \chi^\pm\left(\mathbf{p} - i\mu \frac{1}{\nabla_x}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right)L^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) + i\mu \frac{\partial \chi^\pm}{\partial t}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Это уравнение перепишем в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)\chi^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) - i\mu\alpha\nabla_x\chi^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) = \\ = \chi^\pm\left(\mathbf{p} - i\mu \frac{1}{\nabla_x}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right)L^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) + i\mu \frac{\partial \chi^\pm}{\partial t}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Используя формулу Тейлора, по крайней мере формально, можно написать

$$\begin{aligned} \chi^\pm\left(\mathbf{p} - i\mu \frac{1}{\nabla_x}, \frac{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\right) = \\ = \chi^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) + \sum_{|\nu|=1}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (-i)^{|\nu|} \mu^{|\nu|} \frac{\partial^{|\nu|} \chi^\pm}{\partial p^\nu}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) \frac{\partial^{|\nu|}}{\partial x^\nu}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Здесь $\nu = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$ – мультииндекс, и, как обычно, $|\nu| = \nu_1 + \nu_2 + \nu_3$, $\nu! = \nu_1! \nu_2! \nu_3!$, $\partial^{|\nu|}/\partial \mathbf{x}^\nu = \partial^{|\nu|}/\partial x^{1^{\nu_1}} \partial x^{2^{\nu_2}} \partial x^{3^{\nu_3}}$. Подставляя это выражение и асимптотические разложения (2.5) в (3.3), после приравнивания нулю коэффициентов перед разными степенями μ получим линейную систему неоднородных алгебраических уравнений для коэффициентов $\chi_k^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$, $L_k^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$:

$$\mathcal{H}\chi_0^\pm - \chi_0^\pm L_0^\pm = 0, \quad (3.5)$$

$$\mathcal{H}\chi_k^\pm - \chi_k^\pm L_0^\pm = \chi_0^\pm L_k^\pm + \mathcal{F}_k^\pm + i \frac{\partial \chi_{k-1}^\pm}{\partial t}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

Здесь $\mathcal{H} = \alpha \boldsymbol{\pi} + \beta + e\Phi$, $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, и каждая функция $\mathcal{F}_k^\pm$ есть сумма, состоящая из произведений $\partial \chi_j^\pm / \partial x^j$, $(\partial^\nu \chi_j^\pm / \partial p^\nu)(\partial^\nu L_m^\pm / \partial x^\nu)$ с номерами $j = 1, \dots, k-1$. Ниже мы приведем формулы для $\mathcal{F}_1^\pm$, $\mathcal{F}_2^\pm$, но сначала отметим, что уравнение (3.5) было изучено в лемме 1. Отсюда получим, что собственные значения матрицы-функции $\mathcal{H}$ суть

$$L_0^\pm = \varepsilon^\pm(\boldsymbol{\pi}), \quad (3.7)$$

и они дважды вырождены. Следовательно, $\chi_k^\pm$ – матрицы, составленные из двух четырехмерных вектор-столбцов. В частности, матрицы $\chi_0^\pm$ зависят от $\mathbf{p}$ и $\mathbf{x}, t$ через длинные импульсы $\boldsymbol{\pi}$. Для упрощения обозначений мы будем писать, как и выше,

$$\chi_0^+ = \xi^+(\boldsymbol{\pi}). \quad (3.8)$$

Ниже под производными $\partial \xi^\pm / \partial x^j$, $\partial \xi^\pm / \partial p_j$ мы будем понимать выражения $\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \xi^\pm}{\partial \pi_k} \frac{\partial \pi_k}{\partial x^j}$ и $\sum_{k=1}^3 \frac{\partial \xi^\pm}{\partial \pi_k}$.

Будем называть $L_0^+ = \varepsilon^+(\boldsymbol{\pi})$ и $L_0^- = \varepsilon^-(\boldsymbol{\pi})$ соответственно *электронным* и *позитронным термами* или *эффективными гамильтонианами*.

Ясно, что коэффициенты χ_k^+ могут быть вычислены независимо от коэффициентов χ_k^- . Более того, достаточно найти коэффициенты $L_k^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ и χ_k^+ . Коэффициенты $L_k^-(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ и χ_k^- могут быть выражены через χ_k^+ с помощью известной процедуры зарядового сопряжения (см., например, [3]). Включим на некоторое время заряд электрона (параметр) e как аргумент в функции $L^\pm$, $\chi^\pm$ и напишем $L^\pm = L^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, e)$, $\chi^\pm = \chi^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, e)$.

ЛЕММА 2. Пусть $L^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, e)$, $\chi^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, e)$ – такое решение уравнения (3.3), что $L^+|_{\mu=0} = L_0^+ = \varepsilon^+(\boldsymbol{\pi})$, $\chi^+|_{\mu=0} = \xi_0^+(\boldsymbol{\pi})$, тогда функции

$$\begin{aligned} \chi^-(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, e) &= -i\alpha_2 \beta \overline{\chi^+}(-\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, -e), \\ L^-(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, e) &= -\overline{L^+}(-\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu, -e) \end{aligned} \quad (3.9)$$

– тоже решения уравнения (3.3), и

$$L^-|_{\mu=0} = L_0^- = \varepsilon^-(\boldsymbol{\pi}), \quad \chi^-|_{\mu=0} = \xi_0^-(\boldsymbol{\pi}). \quad (3.10)$$

Заметим, что $-i\alpha_2 \beta$ – вещественнозначные матрицы.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим уравнение (3.3), соответствующее знаку “+”. Возьмем от него комплексное сопряжение и умножим на матрицу $-i\alpha_2\beta$ (множитель $-i$ обеспечивает вещественность), получим

$$\begin{aligned} & -i\alpha_2\beta(\overline{\alpha}(\mathbf{p} - e\mathbf{A} + i\mu\nabla_x) + \beta + e\Phi)\overline{\chi^+}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, e, \mu) = \\ & = -i\alpha_2\beta\overline{\chi^+}(\mathbf{p} + i\mu\nabla_x, \mathbf{x}, t, \mu)\overline{L^+}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, e, \mu) - i\mu\frac{\partial}{\partial t}(-i\alpha_2\beta\overline{\chi^+})(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, e, \mu). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Используя свойства матриц Паули σ_j , получим равенства

$$\begin{aligned} (i\alpha_2\beta)\alpha_1 &= -\alpha_1(i\alpha_2\beta), & (i\alpha_2\beta)\alpha_2 &= \alpha_2(i\alpha_2\beta), \\ i\alpha_2\beta\alpha_3 &= -\alpha_3(i\alpha_2\beta), & (i\alpha_2\beta)\beta &= -\beta(i\alpha_2\beta). \end{aligned}$$

Принимая во внимание эти равенства и равенство $\overline{\alpha} = \{\alpha_1, -\alpha_2, \alpha_2\}$, можно переписать (3.11) в виде

$$\begin{aligned} & \alpha((- \mathbf{p} + e\mathbf{A} - i\mu\nabla_x) + \beta - e\Phi)(-i\alpha_2\beta)\overline{\chi^+}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, e, \mu) = \\ & = -(-i\alpha_2\beta)\overline{\chi^+}(\mathbf{p} + i\mu\nabla_x, \mathbf{x}, t, \mu)\overline{L^+}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, e, \mu) + \\ & + i\mu\frac{\partial}{\partial t}(-i\alpha_2\beta)\overline{\chi^+}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, e, \mu). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Это уравнение примет вид (3.3), если заменить $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ и $e \rightarrow -e$. Поэтому формулы (3.9) дают также решения (3.3). Полагая $\mu = 0$, получим (3.10). ■

Лемма 2 утверждает, что достаточно найти коэффициенты χ_k^+ и L_k^+ в (2.5), а чтобы найти χ_k^- и L_k^- , можно использовать (3.9).

Приведем явные формулы для $\mathcal{F}_1^+$ и $\mathcal{F}_2^+$:

$$\mathcal{F}_1^+ = i \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p^j} \frac{\partial \xi^+}{\partial x^j} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j} \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} \right), \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_2^+ &= i \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p^j} \frac{\partial \chi_1^+}{\partial x^j} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j} \frac{\partial \chi_1^+}{\partial p^j} \right) - \\ &- i \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} \frac{\partial L_1^+}{\partial x^j} + \chi_1^+ L_1^+ - \sum_{|\nu|=2} \frac{1}{\nu!} \frac{\partial^2 \xi^+}{\partial p^\nu} \frac{\partial^2 \varepsilon^+}{\partial x^\nu}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

ЗАМЕЧАНИЕ. Мы уже отмечали, что вычисления, основанные на вейлевском упорядочении, могут быть технически существенно более сложные. Проиллюстрируем сказанное, рассматривая уравнения для символов операторов $\widehat{\chi}^\pm$ и $\widehat{L}^\pm$, основанные на вейлевском упорядочении (2.6). В этом случае переход от операторного уравнения к уравнению для символов дает

$$\begin{aligned} & \left[\alpha \left(\mathbf{p} - \frac{i\mu}{2} \nabla_x - e\mathbf{A} \left(\mathbf{x} + \frac{i\mu}{2} \nabla_p, t \right) \right) + \beta + e\Phi \left(\mathbf{x} + \frac{i\mu}{2} \nabla_p \right) \right] \chi_{\mathbf{W}}^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = \\ & = \chi_{\mathbf{W}}^\pm \left(\mathbf{p} - \frac{i\mu}{2} \nabla_x, \mathbf{x} + \frac{i\mu}{2} \nabla_p, \mu \right) L_{\mathbf{W}}^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) + i\mu \frac{\partial \chi_{\mathbf{W}}^\pm}{\partial t}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu). \end{aligned}$$

Для того чтобы получить уравнения для коэффициентов разложения символов $\chi_W^\pm$ и $L_W^\pm$, нужно использовать формулу Тейлора по параметру μ (по крайней мере, формально) для $\mathbf{A}(\mathbf{x} + \frac{i\mu}{2}\nabla_p, t)$, $\Phi(\mathbf{x} + \frac{i\mu}{2}\nabla_p, t)$, $\chi^\pm(\mathbf{p} - \frac{i\mu}{2}\nabla_x, \mathbf{x} + \frac{i\mu}{2}\nabla_p, t, \mu)$ и затем приравнять к нулю коэффициенты при разных степенях μ . Это опять дает линейную систему алгебраических неоднородных уравнений для коэффициентов разложений $\chi_k^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ и $L_k^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ по параметру μ . Первое из уравнений этой системы есть уравнение (3.5), а другие имеют структуру (3.6), но с существенно более сложными функциями $\mathcal{F}_k^\pm$, поскольку наряду с производными $\partial\chi_W^\pm/\partial x^j$, $(\partial^{|\nu|}\chi_W^\pm/\partial p^\nu)(\partial^{|\nu|}L_W^\pm/\partial x^\nu)$ появляется много других производных.

3.2. Условия нормировки. Схема вычисления коэффициентов χ_k^+ и L_k^+ из уравнения (3.6) очень похожа на стандартную схему вычисления собственных векторов и значений в теории возмущений (см., например, [8]). Решение каждого из уравнений (3.6) не единственно, и, чтобы уменьшить степень свободы в определении коэффициентов χ_k^+ и L_k^+ , можно потребовать выполнения равенства L_2 -векторной нормы вектор-функции $\hat{\chi}^+\varphi^+$ с четырьмя компонентами и вектор-функции φ^+ с двумя компонентами. Это дает равенство

$$(\hat{\chi}^+\varphi^+, \hat{\chi}^+\varphi^+)_{L_2} = (\varphi^+, \varphi^+)_{L_2}. \quad (3.15)$$

Используя стандартную процедуру, “перебросим” один из псевдодифференциальных операторов $\hat{\chi}^+$ в скалярном произведении. Это дает

$$(\hat{\chi}^+\varphi^+, \hat{\chi}^+\varphi^+)_{L_2} = (\varphi^+, (\hat{\chi}^+)^*\hat{\chi}^+\varphi^+)_{L_2},$$

где $(\hat{\chi}^+)^*$ – оператор, сопряженный $\hat{\chi}^+$. Тогда равенство (3.15) имеет место, если

$$(\hat{\chi}^+)^*\hat{\chi}^+ = E, \quad (3.16)$$

где E – единичная (2×2) -матрица (или тождественный оператор в $\mathbb{R}^2$). В соответствии со свойствами псевдодифференциальных операторов можно написать

$$(\hat{\chi}^+)^* = \chi^*\left(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, t, \mu\right),$$

где $\chi^*(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ означает эрмитово сопряженную матрицу. Перепишем операторное равенство (3.16) для символа $\chi(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$. Согласно [9] получим

$$\chi^{+*}\left(\mathbf{p} - i\mu \frac{2}{\nabla_x}, \hat{\mathbf{x}}, \mu\right)\chi^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = E. \quad (3.17)$$

Используя разложение Тейлора, можно переписать, по крайней мере формально, это равенство в виде

$$\sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{(-i\mu)^{|\nu|}}{\nu!} \frac{\partial^{|\nu|}}{\partial x^\nu} \left\{ \frac{\partial^{|\nu|}\chi^{+*}}{\partial p^\nu}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)\chi^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) \right\} = E. \quad (3.18)$$

Подставляя выражение (2.5) в это уравнение, приравнявая коэффициенты перед различными степенями μ и принимая во внимание (3.7), (3.16), получим рекуррент-

ную систему уравнений

$$\chi_0^{+*}(\mathbf{p}, \mathbf{x})\chi_0^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \equiv \xi^{+*}(\boldsymbol{\pi})\xi^+(\boldsymbol{\pi}) = E, \quad (3.19)$$

$$\xi^{+*}(\boldsymbol{\pi})\chi_j^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}) + \chi_j^{+*}(\mathbf{p}, \mathbf{x})\xi^+(\boldsymbol{\pi}) = f_j. \quad (3.20)$$

Функции f_j суть произведение функций $\chi_0^+, \dots, \chi_{j-1}^+$ и их производных. В частности,

$$f_1 = i \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial \xi^{+*}}{\partial p^j} \xi^+ \right). \quad (3.21)$$

3.3. Схема вычисления L_j, ξ_j . Уравнение (3.19) выполнено в силу (3.7), (1.6) и условий нормировки для $\xi^\pm(\boldsymbol{\pi})$.

Опишем теперь схему вычисления коэффициентов χ_j^+, L_j^+ . Вектор-столбцы матриц ξ^+ и ξ^- образуют базис в четырехмерном евклидовом пространстве, поэтому для всех χ_j^+ имеем

$$\chi_j^+ = \xi^+ g_j^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) + \xi^- g_j^-(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t), \quad (3.22)$$

где $g^\pm(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ – гладкие (2×2) -матричнозначные функции. Подставляя (3.22) в (3.6), (3.20) и принимая во внимание равенства $\xi^{\pm*}\xi^\pm = E$, $\xi^{\pm*}\xi^\mp = 0$, получим

$$(\varepsilon^- - \varepsilon^+)\xi^- g_j^- = \xi^+ L_j^+ + \mathcal{F}_j^+ + i \frac{\partial \chi_{j-1}^+}{\partial t}, \quad (3.23)$$

$$\xi^{+*}\xi^+ g_j^+ + g_j^{+*}\xi_j^{+*}\xi^+ = f_j \iff g_j^+ + g_j^{+*} = f_j. \quad (3.24)$$

Уравнения (3.23) разрешимы тогда и только тогда, когда их правые части ортогональны вектор-столбцам матрицы χ_i^+ . Это немедленно дает

$$L_j^+ = -\xi^{+*}\mathcal{F}_j^+ - i\xi^{+*}\frac{\partial \chi_{j-1}^+}{\partial t} \quad (3.25)$$

и

$$g_j^- = -\frac{1}{2\sqrt{1+\pi^2}} \left(\xi^{-*}\mathcal{F}_j^+ + i\xi^{-*}\frac{\partial \chi_{j-1}^+}{\partial t} \right). \quad (3.26)$$

Ясно, что уравнения (3.24) разрешимы тогда и только тогда, когда $f_j^* = f_j$. Для $j = 1$ имеем

$$f_1^* = -i \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\xi^{+*} \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} \right) = i \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial \xi^{+*}}{\partial p^j} \xi^+ \right) = f_1, \quad (3.27)$$

поскольку

$$\xi^{+*} \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} + \frac{\partial \xi^{+*}}{\partial p^j} \xi^+ = \frac{\partial}{\partial p^j} (\xi^{+*} \xi^+) = 0.$$

Для $j \geq 2$ этот факт вытекает из определения f_j и равенства (3.18). Мы опускаем его доказательство. Решение уравнения (3.24) не единственно и может быть представлено в виде

$$g_j^+ = \frac{f_j}{2} + v_j,$$

где $v_j(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ – эрмитова гладкая антисимметричная (2×2) -матричнозначная функция: $v_j^* = -v_j$. Эта неединственность отражает неединственный выбор операторов $\hat{\chi}^\pm$ и $\hat{L}^\pm$. Мы можем всегда сделать некоторое унитарное преобразование операторов $\hat{L}^\pm$, математических соображений, касающихся предпочтительного выбора v_j , кроме простоты окончательных формул, на наш взгляд, не существует, по крайней мере всегда можно положить $v_j = 0$ и выбрать

$$g_j^+ = \frac{f_j}{2}. \quad (3.28)$$

Подставляя (3.26), (3.28) в (3.22), получим

$$\begin{aligned} \chi_j^+ &= \frac{1}{2} \xi^+ f_j(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) - \frac{1}{2\sqrt{1+\pi^2}} \xi^- \xi^{-*} \left(\mathcal{F}_j^+ + i \frac{\partial \chi_{j-1}^+}{\partial t} \right) (\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) = \\ &= \frac{1}{2} \xi^+ f_j(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t) - \frac{1}{2\sqrt{1+\pi^2}} \left(\xi^+ L_k^+ + \mathcal{F}_j^+ + i \frac{\partial \chi_{j-1}^+}{\partial t} \right) (\mathbf{p}, \mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Формулы (3.25), (3.23) вместе с леммой 2 дают алгоритм вычисления коэффициентов (символов) $L_j^\pm$, χ_j^+ и асимптотические разложения операторов $\hat{L}^\pm$, $\hat{\chi}^\pm$. Вопрос теперь состоит в их представлении в более явном и приемлемом виде.

3.4. Соображения о минимальном количестве слагаемых $L_j^\pm$ и упрощении редуцированных уравнений для различных решений. Записать $L_j^\pm$ в достаточно простом виде в общей ситуации не легко даже для $j = 2$. Представляется, однако, что, как правило, операторы L_j с номерами $j \geq 3$ не особенно интересны для физических приложений. Кроме того, в зависимости от поведения потенциалов $\mathbf{A}$, Φ и дополнительных условий, определяющих решения редуцированных уравнений (и исходного уравнения Дирака), сами редуцированные псевдодифференциальные уравнения могут быть упрощены. Проиллюстрируем сказанное на примере решения задачи Коши для редуцированного уравнения с быстроосциллирующими начальными данными, которое описывает распространение быстроосциллирующих волновых пакетов. Именно, ограничившись электронным термом и считая, что потенциалы $\mathbf{A}$ и Φ не зависят от t , рассмотрим в безразмерных переменных задачу Коши

$$i\mu \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \hat{L}^+ \Phi, \quad \Phi|_{t=0} = a^0(\mathbf{x}) e^{iS^0(\mathbf{x})/h}. \quad (3.30)$$

Здесь вещественная фаза S^0 и компоненты a_1^0 , a_2^0 (комплексной) векторной амплитуды a^0 – гладкие функции, причем a^0 имеет компактный носитель и на нем $|\nabla_x S^0|$ отделен от нуля; h – параметр, который может принимать различные значения μ^κ , κ – неотрицательное число. При $\kappa > 0$ начальная функция осциллирует, возможно, не очень сильно, а при $\kappa = 0$ быстрые осцилляции вообще отсутствуют. Согласно (многомерному) методу ВКБ [10], [11] решения задачи (3.30) ищутся в виде

$$\Phi = a(\mathbf{x}, t, h) e^{iS(\mathbf{x}, t)/h}, \quad (3.31)$$

где вещественная фаза $S(\mathbf{x}, t)$ и комплексная векторная амплитуда $a(\mathbf{x}, t, h)$ – новые неизвестные гладкие функции, причем будем считать, что функция $a(\mathbf{x}, t)$ финитна

по $\mathbf{x}$. Подставляя эту вектор-функцию в уравнение (3.30) и пользуясь формулой коммутации псевдодифференциального оператора с экспонентой [11], получим

$$\begin{aligned} \left(-i\mu\frac{\partial}{\partial t} + \hat{L}^+\right)(a(\mathbf{x}, t)e^{iS(\mathbf{x}, t)/h}) &= e^{iS(\mathbf{x}, t)/h} \left[\frac{\mu}{h} S_t a - i\mu\frac{\partial a}{\partial t} + L^+ \left(\frac{\mu}{h} \nabla_x S, \mathbf{x}, t, \mu \right) - \right. \\ &\quad \left. - i\mu \left(\left\langle \nabla_p L^+ \left(\frac{\mu}{h} \nabla_x S \right), \nabla_x \right\rangle a + \frac{1}{2} Q \left(\frac{\mu}{h} \nabla_x S, \mathbf{x}, t, \mu \right) \right) a + \mu^2 \hat{R} a \right]. \end{aligned}$$

Здесь $\hat{R} = R\left(\frac{\mu}{h} \nabla_x S, \frac{\mu}{h} \nabla_x S, \frac{1}{h} \nabla_x S, \mu\right)$ – псевдодифференциальный оператор, действие которого на функцию a дает гладкую ограниченную функцию, если $\mu/h = O(1)$, при этом $R(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \xi, \mu)|_{\mathbf{p}=0} = 0$; компоненты $Q_{jm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$ (2×2)-матрицы $Q(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$ определяются равенствами

$$Q_{jm} = \text{tr} \left(\frac{\partial^2 L_{jm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)}{\partial p^2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right).$$

Считая $h = O(\mu^\kappa)$, $0 < \kappa \leq 1$, выделим старшие по параметрам μ и μ/h слагаемые в правой части этого равенства. Без учета осциллирующей экспоненты они суть

$$\frac{\mu}{h} S_t a + L_0^+ \left(\frac{\mu}{h} \nabla_x S, \mathbf{x}, t \right) a + \mu L_1^+(0, \mathbf{x}, t) a.$$

Напомним, что $L_0^+ = \varepsilon^+(\boldsymbol{\pi})$ – скалярная функция. Действуя в рамках метода ВКБ, можно приравнять к нулю это выражение, что при всех фиксированных $(\mathbf{x}, t)$ дает задачу на собственные векторы a и значения $-\frac{\mu}{h} S_t - \varepsilon^+(\boldsymbol{\pi})$, и в конечном итоге уравнения Гамильтона–Якоби

$$\frac{\mu}{h} S_t + \varepsilon^+(\boldsymbol{\pi}) + \mu \lambda_\pm(\mathbf{x}, t) = 0,$$

где $\lambda_\pm(\mathbf{x})$ – собственные значения матрицы $\mu L_1^+|_{\mathbf{p}=0}$. Если $h \sim \mu$, мы имеем *релятивистский* или *коротковолновой случай*, тогда слагаемые $\mu L_1^+|_{\mathbf{p}=0}$ и $\lambda_\pm(\mathbf{x})$ разумно перенести в уравнение (переноса) для амплитуды и гамильтониан в уравнении Гамильтона–Якоби будет равен $\varepsilon^\pm(\boldsymbol{\pi})$, он и задает классические траектории, определяющие фазу $S(\mathbf{x}, t)$. В другом критическом случае $h \sim \sqrt{\mu}$, $\mu/h \sim h$, при этом нужно также предположить, что в безразмерных переменных электрический и векторный потенциалы (точнее, их “переменные части”) также имеют порядок h . Тогда мы имеем нерелятивистский случай, но, тем не менее, все еще быстроосциллирующие решения. Очень быстрые осцилляции по времени мы можем сразу выделить, полагая $S = ct/\mu + S'(\mathbf{x}, \tau)$. Здесь $\tau = \mu t/h$ – “перенормированное” время, введение которого означает, что волновой пакет пробегает (безразмерные) расстояния порядка единицы за время τ порядка единицы. Тогда, используя формулу Тейлора, получим для $S'(\mathbf{x}, \tau)$ уравнения Гамильтона–Якоби

$$\frac{\mu}{h} S'_\tau + \frac{(\nabla_x S' - \mathbf{A}')^2}{2m} \Phi' + \lambda_\pm(\mathbf{x}) + O(h) = 0.$$

Последнее слагаемое $O(h)$ разумно переместить в уравнение для определения амплитуды a , как, впрочем, часто (но не всегда) и слагаемое $\lambda_\pm(\mathbf{x})$, которое отвечает

за динамику спина и которое также может оказаться достаточно малым по сравнению с сохраненными слагаемыми. Тогда останется гамильтониан, соответствующий нерелятивистскому движению. Таким образом, реальным малым параметром в этой нерелятивистской ситуации, но все еще с осциллирующими решениями, оказывается $\hbar \approx \sqrt{\mu}$. Этот случай можно назвать нерелятивистским “средневолновым”.

Дальнейший анализ, основанный на методе ВКБ, показывает, что для того чтобы определить главный член амплитуды a по малому параметру $\hbar = \mu^\kappa$ при любых $0 < \kappa \leq 1$, наряду с $L_0^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$ достаточно иметь явное выражение для $L_1^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$, остальные слагаемые $L_j^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$, $j \geq 2$, дают поправку $O(\hbar)$ к главному члену асимптотики.

Теперь рассмотрим случай, когда решение редуцированного уравнения если и осциллирует, то достаточно медленно, и будем предполагать, что меняющиеся части потенциалов $\mathbf{A}$, Φ (в безразмерном виде) имеют порядок μ^2 . Тогда после выделения из решения очень быстрых временных осцилляций в виде экспоненты e^{itc^2m} оставшаяся часть решения представляется в виде регулярного разложения по параметру μ , главный член этого разложения будет определять нерелятивистский “длинноволновой” предел. Несложный анализ показывает, что уравнение для него получается в результате разложения в ряд Тейлора символов операторов $L_0^+ - mc^2$, L_1^+ , L_2^+ по длинному импульсу $\boldsymbol{\pi} \sim \mu$ и импульсу $\mathbf{p} \sim \mu$ в предположении, что $\boldsymbol{\pi} \sim \mu$ и $\mathbf{p} \sim \mu$, и при сохранении слагаемых порядка μ^2 . Отсюда ясно, что во всех случаях, во-первых, члены разложения L_j^+ при $j > 2$ дают лишь поправки к главному члену асимптотики волновой функции и, во-вторых, из L_2^+ достаточно сохранить лишь его значение при $\mathbf{p} = 0$. Поэтому дадим следующее определение.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Символ $L_0^\pm + \mu L_1^\pm + \mu^2 L_2^\pm|_{\boldsymbol{\pi}=0}$ назовем *существенной частью* (классического) эффективного гамильтониана, а соответствующий оператор – *существенной частью* квантового эффективного гамильтониана.

“Средневолновой” и “длинноволновой” случаи относятся к нерелятивистскому случаю, и описанные упрощения приводят в результате к преобразованию Фолди–Вутхайзена, соответствующие упрощения мы приведем ниже в п. 4.5. Подчеркнем, что с помощью метода ВКБ можно также рассмотреть ситуацию малых полей, но больших импульсов $\mathbf{p}$, в этом случае квазиклассическое приближение аналогично борновскому приближению.

Отметим также, что приведенные соображения переносятся и на случай, когда в асимптотике решения появляются фокальные точки и каустики, а также эффекты смены кратности, которые могут возникнуть при включении в старшую часть эффективного гамильтониана $\mu L_1^\pm|_{\mathbf{p}=0}$: развитый вариант адиабатического приближения охватывает все эти случаи.

Детальное обсуждение этого вопроса приведено в работах [6].

4. СУЩЕСТВЕННАЯ ЧАСТЬ ЭФФЕКТИВНОГО ГАМИЛЬТОНИАНА (ЭЛЕКТРОННОГО ТЕРМА)

Таким образом, мы ограничимся вычислением L_1^+ и $L_2^+|_{\boldsymbol{\pi}=0}$. Имея в виду физические приложения, окончательные формулы будем приводить в исходных переменных и потенциалах.

4.1. Первая поправка существенной части эффективного гамильтониана. Для L_1^+ имеем

$$L_1^+ = -\xi^{+*} \left(\mathcal{F}_1^+ + i \frac{\partial \xi^+}{\partial t} \right) = -i \xi^{+*} \left(\sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p^j} \frac{\partial \xi^+}{\partial x^j} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j} \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} \right) + \frac{\partial \xi^+}{\partial t} \right). \quad (4.1)$$

Заметим, что ξ^+ зависит от x, p через длинные импульсы π , поэтому

$$\begin{aligned} \xi^{+*} \left(\sum_{j=1}^3 (\mathcal{H}_{p^j} \xi_{x^j}^+ - \varepsilon_{x^j}^+ \xi_{p^j}^+) + \frac{\partial \xi^+}{\partial t} \right) &= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \xi^{+*} \left[\frac{\partial \pi_k}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \frac{\partial \pi_k}{\partial x^j} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j} \frac{\partial \pi_k}{\partial p_j} \right] \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} = \\ &= \xi^{+*} \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \left[e E_k + e \frac{\pi_j}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} - e \alpha^j \frac{\partial A_k}{\partial x^j} \right] \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} = \\ &= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \left[\left(e E_k + e \frac{\pi_j}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \right) \xi^{+*} \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} - e \frac{\partial A_k}{\partial x^j} \xi^{+*} \alpha^j \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} \right]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Здесь $E_k = -\partial A_k / \partial t - \partial \Phi / \partial x^k$ – компоненты электрического поля, и мы воспользовались равенствами

$$\frac{\partial \pi_k}{\partial t} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j} \frac{\partial \pi_k}{\partial p_j} = e E_k \pm e \frac{\pi_j}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \frac{\partial A^j}{\partial x^k}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \frac{\partial \pi_k}{\partial x^j} = -e \alpha^j \frac{\partial A_k}{\partial x^j}.$$

Вычислим матрицы $\xi^{+*} \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k}$, $\xi^{+*} \alpha^j \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k}$. В результате некоторых вычислений имеем

$$C_+^2 + C_-^2 = 1, \quad (\sigma, n) \frac{\partial}{\partial \pi_k} (\sigma, n) = -\frac{i[\pi \times \sigma]_k}{|\pi|^2}, \quad (4.3)$$

$$C_+ C_- = \frac{|\pi|}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}}, \quad \frac{C_-}{C_+} = \frac{|\pi|}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + mc}. \quad (4.4)$$

Из (4.3) получим

$$\begin{aligned} \xi^{+*} \frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \pi_k} (C_+^2 + C_-^2) + C_-^2 (\sigma, n) \frac{\partial}{\partial \pi_k} (\sigma, n) = \\ &= -\frac{i[\pi \times \sigma]_k}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} (\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + mc)}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

где $[\pi \times \sigma]_k$ означает k -ю компоненту векторного произведения. Аналогично из (4.4) найдем

$$\begin{aligned} (\chi_0^+)^* \alpha^j \frac{\partial \chi_0^+}{\partial \pi_k} &= C_+ \frac{\partial (C_- \sigma_j(\sigma, n))}{\partial \pi_k} + C_- (\sigma, n) \sigma_j \frac{\partial C_+}{\partial \pi_k} = \frac{\partial (C_+ C_- n_j)}{\partial \pi_k} + \\ &+ i C_+^2 \frac{\partial (C_+^{-1} C_- [n \times \sigma]_j)}{\partial \pi_k} = \frac{\partial}{\partial \pi_k} \left(\frac{\pi_j}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \right) + \\ &+ i C_+^2 \frac{\partial}{\partial \pi_k} \left(\frac{[\pi \times \sigma]_j}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + mc} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon^+}{\partial \pi_k \partial \pi_j} + \\ &+ \frac{i \varepsilon_{jkl} \sigma_l}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} - \frac{i[\pi \times \sigma]_j \pi_k}{2(m + \sqrt{m^2 c^2 + \pi^2})(m^2 c^2 + \pi^2)}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Собирая (4.2), (4.5), (4.6), получим окончательно

$$\begin{aligned}
 L_1^+ &= -i\hbar \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \left[\left(eE_k + e \frac{\pi_j}{\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \right) \frac{i[\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\sigma}]_k}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} (m + \sqrt{m^2 c^2 + \pi^2})} + \right. \\
 &\quad \left. + i e \hbar \frac{\partial A_k}{\partial x^j} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_+}{\partial \pi_k \partial \pi_j} + \frac{i \varepsilon_{jkl} \sigma_l}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} - \frac{i[\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\sigma}]_j \pi_k}{2(m c + \sqrt{m^2 c^2 + \pi^2})(m^2 c^2 + \pi^2)} \right) \right] = \\
 &= -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{p^j x^j}^+ - \frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} - \frac{e\hbar \boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} (\sqrt{m^2 + \pi^2} + mc)}. \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

4.2. Вторая поправка существенной части эффективного гамильтониана. Найдем поправки $L_2|_{\boldsymbol{\pi}=0}$. Имеем

$$\begin{aligned}
 L_2 &= -i\chi_0^* \left[\sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p^j} \frac{\partial \chi_1^+}{\partial x^j} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j} \frac{\partial \chi_1^+}{\partial p^j} \right) + i \frac{\partial \chi_1^+}{\partial t} \right] + \\
 &\quad + i \sum_{j=1}^3 \chi_0^* \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} \frac{\partial L_1^+}{\partial x^j} - \frac{1}{2} f_1 L_1^+ + i \sum_{|\nu|=2} \frac{1}{\nu!} \chi_0^* \frac{\partial^2 \xi^+}{\partial p^\nu} \frac{\partial^2 \varepsilon^+}{\partial x^\nu}, \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

$$f_1 = -i \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\xi^{+*} \frac{\partial \xi^+}{\partial p^j} \right) = - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{[\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\sigma}]_j}{4\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} (\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + mc)} \right).$$

Используя явные формулы для $C_\pm$, $\xi^\pm$ и других нужных функций, получим следующие равенства для малых $\boldsymbol{\pi}$:

$$\begin{aligned}
 C_+ &= 1 - \frac{\pi^2}{8m^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^4), \quad C_- = -\frac{|\boldsymbol{\pi}|}{2m} \left(1 - \frac{3\pi^2}{8m^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^4) \right), \\
 \xi^+ &= \left(1 - \frac{\pi^2}{8m^2 c^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^4) \right), \\
 &\quad \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi})}{2mc} + O(|\boldsymbol{\pi}|^3) \Bigg), \\
 f_1 &= \frac{e\hbar}{8m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H}) + O(|\boldsymbol{\pi}|^2), \quad \chi_0^* \frac{\partial \chi_0}{\partial p_j} = -\frac{i[\boldsymbol{\pi} \times \boldsymbol{\sigma}]_j}{4m^2 c^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^3), \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

$$L_1^+ = \frac{ie}{2mc} (\nabla_x, \mathbf{A}) - \frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2mc} - \frac{e\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{4m^2 c^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^2),$$

$$\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^i \partial x^j} = \frac{e^2}{mc} \frac{\partial A_k}{\partial x^i} \frac{\partial A^k}{\partial x^j} + e \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^i \partial x^j} + O(|\boldsymbol{\pi}|^2),$$

$$\mathcal{F}_1^+ = \frac{ie}{2mc} \begin{pmatrix} -(\mathbf{E}, \boldsymbol{\pi}) \\ 2m \\ (\mathbf{E}, \boldsymbol{\sigma}) \end{pmatrix} + \frac{ie}{2m} \begin{pmatrix} -(\nabla_x, \mathbf{A}) - i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H}) \\ \frac{3\sigma^j \pi_k A_{,j}^k}{2m} \end{pmatrix} + O(|\boldsymbol{\pi}|^2).$$

Используя эти выражения, с той же точностью получим

$$\chi_1^+ = -\frac{\mathcal{F}_1^+}{2mc} + \xi^+ \left(f_1 - \frac{L_1^+}{2mc} \right) + O(\pi^2) = \frac{e}{4m^2 c^2} \begin{pmatrix} \frac{i(\mathbf{E}, \boldsymbol{\pi})}{2m} + \frac{\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{2m} \\ -i(\mathbf{E}, \boldsymbol{\sigma}) \end{pmatrix} +$$

$$+ \frac{e}{4m^2} \left(-\frac{3i}{2mc} \sum_{j,k=1}^3 \sigma^j \pi_k \frac{\partial A^k}{\partial x_j} - \frac{i(\nabla_x, \mathbf{A})(\sigma, \pi)}{2m} + \frac{3(\sigma, \pi)(\sigma, \mathbf{H})}{4mc} \right) + O(\pi^2).$$

Отсюда, принимая во внимание равенства

$$(\nabla_x, \mathbf{E}) = -\Delta\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial(\nabla_x, \mathbf{A})}{\partial t}, \quad \text{rot } \mathbf{E} = -\mathbf{H}_t, \quad \mathbf{H}^2 = \sum_{j,k=1}^3 \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} - \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^k}{\partial x^j},$$

получим окончательно

$$\begin{aligned} L_2|_{\pi=0} &= \frac{e}{8m^2c^2} \Delta\Phi + \frac{e^2 \mathbf{E}^2}{8m^3c^3} + \frac{e^2}{8m^3c^3} \sum_{j,k=1}^3 \left(\frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} + \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^k}{\partial x^j} + \frac{\partial A^k}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^j} \right) + \\ &+ \frac{ie}{4m^3c^3} (\nabla_x, \mathbf{A})(\sigma, \mathbf{H}) - \frac{ie}{8m^2c^2} (\sigma, \text{rot } \mathbf{E}). \end{aligned} \quad (4.10)$$

4.3. Символ Фейнмана–Маслова существенной части эффективного гамильтониана. Собирая формулы для L_0^+ , L_1^+ , L_2^+ , получим

УТВЕРЖДЕНИЕ 1. Символ Фейнмана–Маслова существенной части квантового эффективного гамильтониана электронного терма определяется формулой

$$\begin{aligned} L_0^+ + \hbar L_1^+ + \hbar^2 L_2^+ &= \\ &= \varepsilon^+(\pi) - \hbar \left\{ \frac{i}{2} \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{pj}^+ x_j - \frac{e(\sigma, \mathbf{H})}{2\sqrt{m^2c^2 + \pi^2}} - \frac{e\sigma[\mathbf{E} \times \pi]}{2\sqrt{m^2c^2 + \pi^2}(\sqrt{m^2c^2 + \pi^2} + mc)} \right\} + \\ &+ \hbar^2 \left\{ \frac{\hbar^2 e}{8m^2c^2} \Delta\Phi + \frac{e^2 \mathbf{E}^2}{8m^3c^3} + \frac{e^2}{8m^3c^3} \sum_{j,k=1}^3 \left(\frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} + \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^k}{\partial x^j} + \frac{\partial A^k}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^j} \right) + \right. \\ &\left. + \frac{ie}{4m^3c^3} (\nabla_x, \mathbf{A})(\sigma, \mathbf{H}) - \frac{ie}{8m^2c^2} (\sigma, \text{rot } \mathbf{E}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

4.4. Вейлевский символ существенной части эффективного гамильтониана. Как отмечалось выше, более подходящие формулы для электронных и позитронных операторов $\hat{L}^\pm$ получаются при использовании вейлевского упорядочения, которое дает их сразу в самосопряженной или, по крайней мере, симметричной форме. Перейдем от символа Фейнмана–Маслова к символу Вейля для того же самого оператора mod $(O(\hbar^3) + O(\hbar^2|\pi|))$. Согласно формуле (2.7) вейлевский символ $L_W = L_0^+ + \hbar L_1^+ + \hbar^2 L_2^+$ есть

$$\begin{aligned} L_W(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \hbar) &= L_0^+ + \frac{i\hbar}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 L_0^+}{\partial x^j \partial p_j} + \hbar L_1^+ - \\ &- \frac{\hbar^2}{8} \sum_{j,k=1}^3 \frac{\partial^4 L_0^+}{\partial x^j \partial x^k \partial p_j \partial p_k} \Big|_{\pi=0} + \frac{i\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 L_1^+}{\partial x^j \partial p_j} \Big|_{\pi=0} + \hbar^2 L_2^+|_{\pi=0}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

После соответствующих вычислений получим

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 L_0^+}{\partial x^j \partial p_j} &= \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \varepsilon_0^+}{\partial x^j \partial p_j}, \\ \sum_{j,k=1}^3 \frac{\partial^4 L_0^+}{\partial x^j \partial x^k \partial p_j \partial p_k} \Big|_{\pi=0} &= \frac{1}{m^3 c^3} \sum_{j,k=1}^3 \left(\frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^k} + \frac{\partial A^j}{\partial x^k} \frac{\partial A^k}{\partial x^j} + \frac{\partial A^k}{\partial x^k} \frac{\partial A^j}{\partial x^j} \right) + O(|\pi| + \hbar), \\ \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 L_1^+}{\partial x^j \partial p_j} &= \frac{e(\nabla_x, \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} + O(|\pi| + \hbar). \end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в (4.11), (4.12), окончательно получим

УТВЕРЖДЕНИЕ 2. Вейлевские символы существенных частей квантовых эффективных электронных и позитронных матричных гамильтонианов определяются формулами

$$\begin{aligned} L_W^+(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \hbar) &= c\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + e\Phi - \frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} - \\ &- \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}(\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + mc)} + \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta\Phi + \frac{e^2 \hbar^2 \mathbf{E}^2}{8m^3 c^3} + O(\hbar^2 |\pi|), \quad (4.13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_W^-(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \hbar) &= -c\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + e\Phi - \frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}} + \\ &+ \frac{e\hbar\bar{\boldsymbol{\sigma}}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{2\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2}(\sqrt{m^2 c^2 + \pi^2} + mc)} + \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta\Phi - \frac{e^2 \hbar^2 \mathbf{E}^2}{8m^3 c^3} + O(\hbar^2 |\pi|). \quad (4.14) \end{aligned}$$

Вместе с (2.3) и (2.6) эти формулы определяют в некотором приближении квантовую динамику электрона и позитрона соответственно.

4.5. Нерелятивистский предел. Как отмечалось выше, иногда полезно допускать регулярную зависимость потенциалов $\mathbf{A}$, Φ от параметра μ , что дает возможность рассматривать ситуацию достаточно слабых магнитных полей и изучить нерелятивистский предел. В этом случае справедливы все предыдущие рассуждения, но можно упростить окончательные уравнения, разлагая потенциалы $\mathbf{A}$ и Φ в символах $L_W^\pm$. Приведем упрощенные формулы.

Формально нерелятивистский предел получается в результате разложения Тейлора по параметру mc символа (4.13) с сохранением членов $O(mc)$, $O(1)$ и $O((mc)^{-1})$. Все остальные слагаемые – это поправки. Представим окончательные формулы, сохранив также слагаемые $O((mc)^{-2})$:

$$\begin{aligned} L_W^+(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \hbar) &= mc^2 \sqrt{1 + \frac{\pi^2}{m^2 c^2}} + e\Phi - \frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2mc\sqrt{1 + \pi^2/(m^2 c^2)}} - \\ &- \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{2m^2 c^2 \sqrt{1 + \pi^2/(m^2 c^2)} (\sqrt{1 + \pi^2/(m^2 c^2)} + 1)} + \\ &+ \frac{e\hbar^2}{8m^2 c^2} \Delta\Phi + \frac{e^2 \hbar^2 \mathbf{E}^2}{8m^3 c^3} + O(\hbar^2 |\pi|) = mc^2 + \\ &+ \left[\frac{\pi^2}{2m} + e\Phi - \frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H})}{2m} \right] + \left[\frac{e\hbar^2}{8m^2 c} \operatorname{div} \mathbf{E} - \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \boldsymbol{\pi}]}{2m^2 c} \right] + O(\hbar^2 |\pi|). \quad (4.15) \end{aligned}$$

Первое слагаемое здесь определяет символ стандартного оператора Паули, остальные слагаемые задают поправки к нему.

5. ОЦЕНКИ И ТОЧНОСТЬ ПРОВЕДЕННЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ

Обсудим вопрос о точности проведенных преобразований. Формальные разложения вида (3.4) – это известные формулы композиции μ -псевдодифференциальных операторов. Для различных классов символов такие формулы обоснованы в работах [4], [9], [11]–[13]. Нам понадобятся формулы композиции с оценкой остаточного члена для символов класса S^m , состоящего из таких гладких функций $a(\mathbf{p}, \mathbf{x})$, что сами эти функции и их производные имеют степенной рост при $(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \rightarrow \infty$ порядка не выше m , т. е. с некоторыми константами $C_{\alpha, \beta}$ выполняются неравенства

$$\left| \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial p^\alpha} \frac{\partial^{|\beta|}}{\partial x^\beta} a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \right| \leq C_{\alpha, \beta} (1 + |\mathbf{p}| + |\mathbf{x}|)^m$$

для всех мультииндексов $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ с целыми неотрицательными компонентами. Например, класс S^0 состоит из ограниченных вместе со всеми производными функций. В пространстве S^m можно ввести систему норм

$$\|a(\mathbf{p}, \mathbf{x})\|_{k, m} = \sum_{|\alpha| + |\beta| \leq k} \sup \frac{\left| \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial p^\alpha} \frac{\partial^{|\beta|}}{\partial x^\beta} a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \right|}{(1 + |\mathbf{p}| + |\mathbf{x}|)^m}, \quad (5.1)$$

в результате чего S^m становится счетно-нормированным пространством. Будем писать $a(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = O(\mu^N)$ относительно S^m , если каждая норма $\|a(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)\|_{k, m}$ есть величина порядка $O(\mu^N)$ при $\mu \rightarrow 0$.

Простое обоснование формулы композиции в случае символов класса S^m можно дать на основе теоремы 2.2 из работы [13], а именно имеет место следующее утверждение.

ЛЕММА 3. Пусть $a_1(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ и $a_2(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ принадлежат классам S^{m_1} и S^{m_2} соответственно с $m_1 \geq 0$, $m_2 \geq 0$. Тогда композиция $a_2(\overset{1}{\mathbf{p}}, \overset{2}{\mathbf{x}})a_1(\overset{1}{\mathbf{p}}, \overset{2}{\mathbf{x}})$ имеет символ $b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$, принадлежащий классу $S^{m_1+m_2}$ при каждом $0 \leq \mu \leq 1$, для которого выполняется асимптотическое разложение

$$b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} (-i\mu)^{|\nu|} \frac{\partial^{|\nu|} a_2}{\partial p^\nu}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \frac{\partial^{|\nu|} a_1}{\partial x^\nu}(\mathbf{p}, \mathbf{x}).$$

Остаточный член $b_N(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$, который получается при учете в этой сумме членов с $|\nu| < N$, является величиной порядка $O(\mu^N)$ относительно $S^{m_1+m_2}$, причем для любых целых $N \geq 0$, $k \geq 0$ найдутся такие целые числа $k_1 \geq 0$, $k_2 \geq 0$, что выполняются оценки

$$\|b_N(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)\|_{k, m_1+m_2} \leq C_{N, k, m_1, m_2} \mu^N \|a_1(\mathbf{p}, \mathbf{x})\|_{k_1, m_1} \|a_2(\mathbf{p}, \mathbf{x})\|_{k_2, m_2}. \quad (5.2)$$

Напомним некоторые факты из теории псевдодифференциальных операторов. Как известно (см. [4]), μ -псевдодифференциальный оператор $a(\overset{1}{\mathbf{p}}, \overset{2}{\mathbf{x}})$ с символом

$a(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ можно записать в виде

$$a(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})u = \frac{1}{(2\pi\mu)^3} \iint e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \mathbf{p}} a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) u(\mathbf{y}) d\mathbf{y} d\mathbf{p}. \quad (5.3)$$

Если $a(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ и $u(\mathbf{x})$ достаточно быстро убывают по $\mathbf{p}$ и по $\mathbf{x}$ соответственно, то интеграл в (5.3) понимается в обычном смысле, но мы будем пользоваться формулой (5.3) и в случае, когда $a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \in S^m$, а $u(\mathbf{x})$ принадлежит пространству S (пространство S состоит из функций, убывающих вместе с производными быстрее любой отрицательной степени $|\mathbf{x}|$ при $\mathbf{x} \rightarrow \infty$) или $S^{m'}$ (пространства S^m для функций от $\mathbf{x}$ определяются аналогично пространствам S^m функций от $(\mathbf{p}, \mathbf{x})$). В таком случае интеграл в (5.3) понимают как осцилляторный интеграл (см., например, [13]), который можно определить как предел при $\varepsilon \rightarrow 0$ таких же интегралов, в которых символ $a(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ заменяется на $a^\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{x})\rho(\varepsilon\mathbf{p})$, а $u(\mathbf{y})$, если $u \in S^{m'}$, заменяется на $u(\mathbf{y})\rho(\varepsilon\mathbf{y})$, где $\rho(\mathbf{x})$ – финитная функция, равная единице в окрестности начала координат. В осцилляторном интеграле можно производить интегрирование по частям исходя из соотношений

$$\frac{\partial}{\partial p_j} e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \mathbf{p}} = \frac{i}{\mu} (x_j - y_j) e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \mathbf{p}}, \quad \frac{\partial}{\partial y_j} e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \mathbf{p}} = -\frac{i}{\mu} p_j e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \mathbf{p}}.$$

Путем таких интегрирований можно превратить формулу (5.3) в абсолютно сходящийся интеграл. Оператор $a(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$ для $a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \in S^m$ при каждом $\mu \neq 0$ непрерывно переводит пространство S в себя, причем отображение $(a(\mathbf{p}, \mathbf{x}), u(\mathbf{x})) \rightarrow a(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})u$ непрерывно переводит $S^m \times S$ в S , что легко устанавливается интегрированиями по частям в (5.3). Это же отображение при $m \geq 0$, $m' \geq 0$ можно рассматривать как непрерывное отображение $S^m \times S^{m'}$ в $S^{m+m'}$, что следует из теоремы 2.2 работы [13].

Теперь перейдем к доказательству леммы 3. Сначала получим формулу для символа композиции операторов с финитными символами и $u \in S$. Записывая соответствующие операторы с помощью формулы (5.3), получим

$$\begin{aligned} a_2(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})a_1(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})u &= \frac{1}{(2\pi\mu)^6} \iint e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{z}) \cdot \boldsymbol{\eta}} a_2(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{x}) \iint e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{z}-\mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\xi}} a_1(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{z}) u(\mathbf{y}) d\mathbf{y} d\boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\eta} = \\ &= \frac{1}{(2\pi\mu)^3} \iint e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\xi}} b(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, \mu) u(\mathbf{y}) d\mathbf{y} d\boldsymbol{\xi}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

где

$$b(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}, \mu) = \frac{1}{(2\pi\mu)^3} \iint e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{z}-\mathbf{x}) \cdot (\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\eta})} a_2(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{x}) a_1(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{z}) d\mathbf{z} d\boldsymbol{\eta}. \quad (5.5)$$

Переходя от переменных $\mathbf{z}$, $\boldsymbol{\eta}$ к $\tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{z} - \mathbf{x}$, $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\xi}$ и заменив $\boldsymbol{\xi}$ на $\mathbf{p}$, получим

$$b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = \frac{1}{(2\pi\mu)^3} \iint e^{-\frac{i}{\mu}\tilde{\mathbf{z}} \cdot \tilde{\boldsymbol{\eta}}} a_2(\tilde{\boldsymbol{\eta}} + \mathbf{p}, \mathbf{x}) a_1(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{z}} + \mathbf{x}) d\tilde{\mathbf{z}} d\tilde{\boldsymbol{\eta}}. \quad (5.6)$$

Формула (5.4) показывает, что $b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ является символом композиции операторов $\hat{a}_1$ и $\hat{a}_2$. Теперь нужно перейти к произвольным символам $a_1(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \in S^{m_1}$ и $a_2(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \in S^{m_2}$ и установить, что формула (5.5) определяет символ композиции соответствующих операторов и в этом случае, если интеграл в этой формуле понимать

как осцилляторный интеграл. Из теоремы 2.2 работы [13] следует оценка (5.2). В частном случае $N = 0$ из нее вытекает, что отображение $(a_1(\mathbf{p}, \mathbf{x}), a_2(\mathbf{p}, \mathbf{x})) \rightarrow b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ есть непрерывное отображение $S^{m_1} \times S^{m_2} \rightarrow S^{m_1+m_2}$ при любых $m_1 \geq 0$, $m_2 \geq 0$, $0 < \mu \leq 1$, поэтому это отображение непрерывно, как и отображение $S^{m_1+1} \times S^{m_2+1} \rightarrow S^{m_1+m_2+2}$.

Рассмотрим финитные аппроксимации $a_{1,2}^\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \rho(\varepsilon \mathbf{x}) \rho(\varepsilon \mathbf{p}) a_{1,2}(\mathbf{p}, \mathbf{x})$. Пусть $b^\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ – символ композиции операторов $\hat{a}_1^\varepsilon$ и $\hat{a}_2^\varepsilon$. Легко видеть, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ эти аппроксимации сходятся к самим символам $a_1(\mathbf{p}, \mathbf{x})$, $a_2(\mathbf{p}, \mathbf{x})$ в S^{m_1+1} , S^{m_2+1} соответственно, следовательно, $b^\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) \rightarrow b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ в $S^{m_1+m_2+2}$, так что в пространстве S

$$b^\varepsilon(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, \mu)u \rightarrow b(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, \mu)u \quad \forall u(\mathbf{x}) \in S. \quad (5.7)$$

С другой стороны, отображения $a_{1,2}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \rightarrow a_{1,2}(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})$ можно рассматривать как непрерывные отображения пространств S^{m_1} и S^{m_2} соответственно в пространство непрерывных операторов из S в S , откуда следует, что в пространстве S

$$b^\varepsilon(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, \mu)u = a_2^\varepsilon(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})a_1^\varepsilon(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})u \rightarrow a_2(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})a_1(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})u \quad \forall u(\mathbf{x}) \in S. \quad (5.8)$$

Из соотношений (5.7) и (5.8) вытекает, что

$$b(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}}, \mu)u = a_2(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})a_1(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{x}})u \quad \forall u(\mathbf{x}) \in S,$$

т. е. функция $b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$, которая определяется интегралом (5.5), и есть символ композиции операторов $\hat{a}_1$ и $\hat{a}_2$. Утверждение леммы 3 вместе с оценкой (5.2) теперь следует из теоремы 2.2 работы [13], примененной к интегралу (5.6).

Перейдем к анализу символов $\chi_j^\pm$ и $L_j^\pm$, полученных в п. 3.3. Будем предполагать, что потенциалы $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ и $\Phi(\mathbf{x}, t)$ на рассматриваемом ограниченном временном интервале принадлежат классу S^1 , а их производные любых порядков относительно переменных $(\mathbf{x}, t)$ принадлежат S^0 равномерно по t . Здесь мы считаем, что эти потенциалы и сами переменные $(\mathbf{x}, t)$ представлены в безразмерном виде (как в разделе 2). Из формул (1.3), (1.4) и леммы 2 следует, что $\chi_0^\pm \in S^0$ и $L_0^\pm \in S^1$. Далее, из формул, приведенных в п. 3.3, по индукции легко получается, что $\chi_j^\pm \in S^0$ и $L_j^\pm \in S^0$ для всех $j \geq 1$. Теперь построим функции $\Psi_N^\pm$ с помощью приближенного сплетающего оператора:

$$\Psi_N^\pm = (\hat{\chi}_0^\pm + \mu \hat{\chi}_1^\pm + \dots + \mu^N \hat{\chi}_N^\pm) \varphi^\pm. \quad (5.9)$$

Исходя из рекуррентных соотношений (см. п. 3.3) и леммы 3 получим

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\Psi_N - i\mu \frac{\partial \Psi_N}{\partial t} &= \left(\hat{\mathcal{H}}(\hat{\chi}_0^\pm + \dots + \mu^N \hat{\chi}_N^\pm) - \right. \\ &\quad \left. - (\hat{\chi}_0^\pm + \dots + \mu^N \hat{\chi}_N^\pm)(\hat{L}_0^\pm + \dots + \mu^N \hat{L}_N^\pm) - i\mu \frac{\partial(\hat{\chi}_0^\pm + \dots + \mu^N \hat{\chi}_N^\pm)}{\partial t} \right) \varphi^\pm - \\ &\quad - (\hat{\chi}_0^\pm + \dots + \mu^N \hat{\chi}_N^\pm) \left(i\mu \frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_0^\pm - \dots - \mu^N \hat{L}_N^\pm \right) \varphi^\pm + \mu^{N+1} \hat{R}_N \varphi^\pm, \end{aligned} \quad (5.10)$$

где символ $R_N(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$ принадлежит S^1 с равномерными оценками соответствующих норм (5.1) при всех $0 \leq \mu \leq 1$ и t из рассматриваемого временного интервала. Таким образом, получаем следующий результат.

УТВЕРЖДЕНИЕ 3. Пусть выполняется редуцированное уравнение

$$i\mu \frac{\partial}{\partial t} \varphi^{\pm} = (\hat{L}_0^{\pm} + \mu \hat{L}_1^{\pm} + \dots + \mu^N \hat{L}_N^{\pm}) \varphi^{\pm}, \quad (5.11)$$

тогда функция (5.9) будет удовлетворять уравнению Дирака (2.1) приближенно с невязкой порядка $O(\mu^{N+1})$. Если редуцированное уравнение (5.11) выполнено с точностью до $O(h^{\alpha})$, то с учетом характера невязки редуцированного уравнения (5.11) из (5.10) можно определить характер невязки в исходном уравнении (2.1).

Благодарности. Мы благодарим И.В. Тютютина за обсуждения и полезные советы. Работа выполнена при поддержке проекта DFG-РАН и гранта 2.1.1/4540 Министерства науки и образования РФ.

Список литературы

- [1] L. L. Foldy, S. A. Wouthuysen, *Phys. Rev.*, **78**:1 (1950), 29–36.
- [2] A. J. Silenko, *J. Math. Phys.*, **44**:7 (2003), 2952–2966, arXiv:math-ph/0404067; В.П. Незнамов, *Докл. РАН*, **362**:1 (1998), 44–46; *ЭЧАЯ*, **37**:1 (2006), 151–182, arXiv:hep-th/0411050; V. P. Neznamov, *The necessary and sufficient conditions for transformation from Dirac representation to Foldy–Wouthuysen representation*, arXiv:0804.0333; K. Yu. Bliokh, *Europhys. Lett.*, **72**:1 (2005), 7–13, arXiv:quant-ph/0501183.
- [3] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Теоретическая физика*, т. 4, ч. 1: *Релятивистская квантовая теория*, Наука, М., 1968; Дж. Д. Бьеркен, С. Д. Дрелл, *Релятивистская квантовая теория*, т. 1: *Релятивистская квантовая механика*, Наука, М., 1978; А. Мессиа, *Квантовая механика*, гл. XX. Уравнение Дирака, т. 2, Наука, М., 1979; В.Г. Левич, Ю.А. Вдовин, В.А. Мямлин, *Курс теоретической физики*, гл. XIII. Релятивистская квантовая механика, т. II: *Квантовая механика. Квантовая статистика и физическая кинетика*, Наука, М., 1971.
- [4] В.П. Маслов, *Операторные методы*, Наука, М., 1973; М.В. Карасев, В.П. Маслов, *Нелинейные скобки Пуассона. Геометрия и квантование*, Наука, М., 1991.
- [5] С.Ю. Доброхотов, *Докл. АН СССР*, **269**:1 (1983), 76–80; Л.В. Берлянд, С.Ю. Доброхотов, *Докл. АН СССР*, **296**:1 (1987), 80–84.
- [6] В.В. Белов, С.Ю. Доброхотов, Т.Я. Тудоровский, *ТМФ*, **141**:2 (2004), 267–303; V. V. Belov, S. Yu. Dobrokhотов, T. Ya. Tudorovskiy, *J. Engrg. Math.*, **55**:1–4 (2006), 183–237, arXiv:math-ph/0503041.
- [7] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Теоретическая физика*, т. 9: *Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния*, Наука, М., 1978.
- [8] И.М. Гельфанд, *Лекции по линейной алгебре*, Наука, М., 1971.
- [9] М.В. Карасев, В.П. Маслов, “Алгебры с общими перестановочными соотношениями и их приложения. II. Операторные унитарно-нелинейные уравнения”, *Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. мат.*, **13**, ред. Р.В. Гамкредидзе, ВИНТИ, М., 1979, 145–267.
- [10] В.П. Маслов, *Теория возмущений и асимптотические методы*, МГУ, М., 1965.
- [11] В.П. Маслов, М.В. Федорюк, *Квазиклассическое приближение для уравнений квантовой механики*, Наука, М., 1976.
- [12] G. Panati, H. Spohn, S. Teufel, *Comm. Math. Phys.*, **242**:3 (2003), 547–578, arXiv:math-ph/0212041.
- [13] В.В. Грушин, С.Ю. Доброхотов, *Матем. заметки*, **87**:4 (2010), 554–571.