**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 167, № 2
май, 2011**

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 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ описываются четырехмерным вектор-потенциалом $(\mathbf{A}, \Phi)$, $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$. Согласно уравнениям Максвелла электрическое и магнитное поля находятся как

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

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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \widehat{\mathcal{H}}\Psi, \qquad \widehat{\mathcal{H}} = c\boldsymbol{\alpha}\hat{\boldsymbol{\pi}} + \beta mc^2 + e\Phi, \tag{1.1}$$

где

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

$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, E – единичная (2×2)-матрица, $\hbar$, $e < 0$, m – постоянная Планка, заряд и масса электрона соответственно, σ_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 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ 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 диагонализовать уравнение Дирака для фурье-образа $\widetilde{\Psi}(\mathbf{p}, t)$ волновой функции $\Psi(\mathbf{x}, t)$.

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

$$i\hbar \frac{\partial \widetilde{\Psi}}{\partial t} = \mathcal{H}\widetilde{\Psi}, \tag{1.2}$$

где $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = c\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\pi} + \beta mc^2 + e\Phi$, $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$. 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 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\pi}/|\boldsymbol{\pi}|$, $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi}) = \sigma_1\pi_1 + \sigma_2\pi_2 + \sigma_3\pi_3$, $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{n}) = \sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3$.

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

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

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 $\boldsymbol{\pi}$:

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

где

$$C_+(\boldsymbol{\pi}) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{mc}{\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}\right)}, \qquad C_-(\boldsymbol{\pi}) = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{mc}{\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}\right)},$$
$$\widetilde{C}_-(\boldsymbol{\pi}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m^2c^2}{mc\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}} \equiv \frac{mc}{|\boldsymbol{\pi}|}C_-(\boldsymbol{\pi}). \tag{1.5}$$

Матрицы $\chi_0^\pm$ удовлетворяют условиям нормировки

$$\chi_0^{\pm *}\chi_0^\pm = E, \qquad \chi_0^{\pm *}\chi_0^\mp = 0. \tag{1.6}$$

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_+, $\widetilde{C}_-$, содержит объекты, гладко зависящие от $\boldsymbol{\pi}$ при $\boldsymbol{\pi} \to 0$.

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

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

Из второй строки (1.7) найдем

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

Подставим это выражение в первую строку (1.7) и с учетом равенства $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\pi})^2 = \boldsymbol{\pi}^2$ получим $m^2c^4 + c^2\boldsymbol{\pi}^2 - (\varepsilon - e\Phi)^2 = 0$. 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 $z_1(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{x}) = C_+(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{x})E$, где $C_+(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{x})$ – нормировочная константа. Из равенства $z^* z = E$ нетрудно найти уравнение для $C_+(\boldsymbol{\pi}, \mathbf{x})$:

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

Это дает формулу для $\chi_0^+(\boldsymbol{\pi})$. Формула для $\chi_0^-(\boldsymbol{\pi})$ 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 $\widetilde{\varphi}^+(\mathbf{p}, t)$, $\widetilde{\varphi}^-(\mathbf{p}, t)$ и четырехмерную вектор-функцию $\widetilde{\varphi} = \begin{pmatrix} \widetilde{\varphi}^+(\mathbf{p}, t) \\ \widetilde{\varphi}^-(\mathbf{p}, t) \end{pmatrix}$, полагая

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

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

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

где

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

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

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

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

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

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

Вектор-функции $\varphi^+(\mathbf{x},t)$ и $\varphi^-(\mathbf{x},t)$ 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

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

где

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

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

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

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 $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}$ справедливы следующие оценки:

$$\left|\frac{e\lambda_{\mathrm{c}}\boldsymbol{E}}{mc^2}\right| \ll 1, \qquad \left|\frac{e\lambda_{\mathrm{c}}\boldsymbol{H}}{mc^2}\right| \ll 1.$$

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 $T = (l_0/\lambda_{\mathrm{c}})\omega_{\mathrm{c}}^{-1}$ и малый "адиабатический" параметр $\mu = \lambda_{\mathrm{c}}/l_0 \ll 1$. 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

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

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) $\widehat{U}$ 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 удается. 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 $\hat{\boldsymbol{\pi}}$. 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 $\widehat{U}$, так и операторов L без предположения малости $\hat{\boldsymbol{\pi}}$. В процессе этих вычислений удобно принять во внимание *принцип зарядового сопряжения* (см. [3], а также вычисления ниже), который позволяет исследовать только электронную часть оператора $\widehat{U}$, а именно оператор $\widehat{\chi}^+$ и уравнение (1.12) для функции $\varphi^+(\mathbf{x}, t)$. Вторая часть оператора $\widehat{U}$ и функция $\varphi^-(\mathbf{x}, t)$ получаются из вычислений для электрона в результате замены $\hat{\boldsymbol{\pi}} \to -\hat{\boldsymbol{\pi}}$ и заряда $e \to -e$ 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]

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

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

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

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

Сделаем важное замечание. Операторы $\widehat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x$ 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

$$\widehat{\chi}^{\pm} = \chi^{\pm}\Bigl(\overset{1}{\widehat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Bigr), \qquad \hat{L}^{\pm} = L^{\pm}\Bigl(\overset{1}{\widehat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Bigr), \qquad \widehat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x, \tag{2.4}$$

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

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

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

$$\widehat{\chi}^{\pm} = \chi_{\mathrm{W}}^{\pm}\Biggl(\frac{\overset{1}{\widehat{\mathbf{p}}} + \overset{3}{\widehat{\mathbf{p}}}}{2}, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Biggr), \qquad \hat{L}^{\pm} = L_{\mathrm{W}}^{\pm}\Biggl(\frac{\overset{1}{\widehat{\mathbf{p}}} + \overset{3}{\widehat{\mathbf{p}}}}{2}, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Biggr), \qquad \widehat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x, \tag{2.6}$$

с вейлевскими символами $\chi_{\mathrm{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)$ и $L_{\mathrm{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$, 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 $\widehat{\mathbf{p}} = -i\mu\nabla_x$ 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

$$b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu, \gamma) = a\Bigl(\mathbf{p} - i\gamma\mu\; \mu\overset{2}{\nabla}_x, \overset{1}{\mathbf{x}}, \mu\Bigr)1.$$

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

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

Пусть $\hat{L} = L\Bigl(\overset{1}{\widehat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, \mu\Bigr)$ есть псевдодифференциальный оператор с символом $L(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$. Тогда вейлевский символ $L_{\mathrm{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ этого оператора связан с $L(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ формулой [4]

$$L_{\mathrm{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = L\Bigl(\mathbf{p} + \frac{i\mu}{2}\nabla_x, \mathbf{x}, \mu\Bigr) = (\text{по крайней мере, формально}) =$$

$$= \sum_{|\nu|=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!}\left(\frac{-i\mu}{2}\right)^{|\nu|} \frac{\partial^{2|\nu|} L}{\partial x^{\nu}\,\partial p^{\nu}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu). \tag{2.7}$$

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}\Big(\mathbf{p} - i\mu \overset{1}{\nabla}_x, \overset{2}{\mathbf{x}}, t\Big)\chi^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) =\\ &\qquad = \chi^{\pm}\Big(\mathbf{p} - i\mu \overset{1}{\nabla}_x, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Big)L^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) + i\mu\frac{\partial\chi^{\pm}}{\partial t}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu).\end{aligned} \tag{3.2}$$

Это уравнение перепишем в виде

$$\begin{aligned}&\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)\chi^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) - i\mu\alpha\nabla_x\chi^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) =\\ &\qquad = \chi^{\pm}\Big(\mathbf{p} - i\mu \overset{1}{\nabla}_x, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Big)L^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) + i\mu\frac{\partial\chi^{\pm}}{\partial t}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu).\end{aligned} \tag{3.3}$$

Используя формулу Тейлора, по крайней мере формально, можно написать

$$\begin{aligned}&\chi^{\pm}\Big(\mathbf{p} - i\mu \overset{1}{\nabla}_x, \overset{2}{\mathbf{x}}, t, \mu\Big) =\\ &\qquad = \chi^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu) + \sum_{|\nu|=1}^{\infty}\frac{1}{\nu!}(-i)^{|\nu|}\mu^{|\nu|}\frac{\partial^{|\nu|}\chi^{\pm}}{\partial p^{\nu}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \mu)\frac{\partial^{|\nu|}}{\partial x^{\nu}}.\end{aligned} \tag{3.4}$$

Здесь $\nu = (\nu_1, \nu_2, \nu_3)$ – мультииндекс, и, как обычно, $|\nu| = \nu_1 + \nu_2 + \nu_3$, $\nu! = \nu_1!\,\nu_2!\,\nu_3!$, $\partial^{|\nu|}/\partial\mathbf{x}^{\nu} = \partial^{|\nu|}/\partial x^{1\nu_1}\partial x^{2\nu_2}\partial x^{1\nu_3}$. 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 $\chi_k^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$, $L_k^{\pm}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t)$:

$$\mathcal{H}\chi_0^{\pm} - \chi_0^{\pm}L_0^{\pm} = 0, \tag{3.5}$$

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

Здесь $\mathcal{H} = \boldsymbol{\alpha\pi} + \beta + e\Phi$, $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, 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

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

и они дважды вырожденны. Следовательно, $\chi_k^{\pm}$ – матрицы, составленные из четырех вектор-столбцов. В частности, матрицы χ_0^{+} зависят от $\mathbf{p}$ и $\mathbf{x}, t$ через длинные импульсы $\boldsymbol{\pi}$. Для упрощения обозначений мы будем писать, как и выше,

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

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*

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

– тоже решения уравнения (3.3), *и*

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

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

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

Используя свойства матриц Паули σ_j, получим равенства

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

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

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

Это уравнение примет вид (3.3), если заменить $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ и $e \to -e$. 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 $\mathcal{F}_2^+$:

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

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

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 $\hat{L}^\pm$, основанные на вейлевском упорядочении (2.6). В этом случае переход от операторного уравнения к уравнению для символов дает

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

Для того чтобы получить уравнения для коэффициентов разложения символов $\chi_{\mathrm{W}}^\pm$ и $L_{\mathrm{W}}^\pm$, нужно использовать формулу Тейлора по параметру μ (по крайней мере, формально) для $\mathbf{A}\big(\mathbf{x} + \frac{i\mu}{2}\nabla_p, t\big)$, $\Phi\big(\mathbf{x} + \frac{i\mu}{2}\nabla_p, t\big)$, $\chi^\pm\big(\mathbf{p} - \frac{i\mu}{2}\nabla_x, \mathbf{x} + \frac{i\mu}{2}\nabla_p, t, \mu\big)$ 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 $\partial\chi_{\mathrm{W}}^\pm/\partial x^j$, $(\partial^{|\nu|}\chi_{\mathrm{W}}^\pm/\partial p^\nu)(\partial^{|\nu|}L_{\mathrm{W}}^\pm/\partial x^\nu)$ 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 $\widehat{\chi}^+\varphi^+$ с четырьмя компонентами и вектор-функции φ^+ с двумя компонентами. Это дает равенство

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

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

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

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

$$(\widehat{\chi}^+)^*\widehat{\chi}^+ = E, \tag{3.16}$$

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

$$(\widehat{\chi}^+)^* = \chi^*\Big(\overset{2}{\widehat{\mathbf{p}}}, \overset{1}{\mathbf{x}}, t, \mu\Big),$$

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

$$\chi^{+*}\Big(\mathbf{p} - i\mu \overset{2}{\nabla}_x, \overset{1}{\mathbf{x}}, \mu\Big)\chi^+(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) = E. \tag{3.17}$$

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

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

Подставляя выражение (2.5) в это уравнение, приравнивая коэффициенты перед различными степенями μ и принимая во внимание (3.7), (3.16), получим рекуррентную систему уравнений

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\xi^{+*}\xi^+ g_j^+ + g_j^{+*}\xi_j^{+*}\xi^+ = f_j \Longleftrightarrow g_j^+ + g_j^{+*} = f_j. \tag{3.24}$$

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

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

и

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

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

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

поскольку

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

Для $j \geqslant 2$ 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 $\widehat{\chi}^{\pm}$ 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

$$g_j^+ = \frac{f_j}{2}. \tag{3.28}$$

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

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

Формулы (3.25), (3.23) вместе с леммой 2 дают алгоритм вычисления коэффициентов (символов) $L_j^\pm$, χ_j^+ и асимптотические разложения операторов $\hat{L}^\pm$, $\widehat{\chi}^\pm$. 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 $j \geqslant 3$ 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

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

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

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

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

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

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

$$Q_{jm}=\mathrm{tr}\biggl(\frac{\partial^2 L_{jm}(\mathbf{p},\mathbf{x},t,\mu)}{\partial p^2}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\biggr).$$

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

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

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 $h\approx\sqrt{\mu}$. 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 $h=\mu^\kappa$ при любых $0<\kappa\leqslant 1$, наряду с $L_0^+(\mathbf{p},\mathbf{x},t)$ достаточно иметь явное выражение для $L_1^+(\mathbf{p},\mathbf{x},t)$, остальные слагаемые $L_j^+(\mathbf{p},\mathbf{x},t)$, $j\geqslant 2$, дают поправку $O(h)$ 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 временны́х 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 гамильтонина.

"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

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

Заметим, что ξ^+ зависит от x, p через длинные импульсы $\boldsymbol{\pi}$, поэтому

$$\xi^{+*}\left(\sum_{j=1}^{3}(\mathcal{H}_{p^j}\xi^+_{x^j} - \varepsilon^+_{x^j}\xi^+_{p^j}) + \frac{\partial \xi^+}{\partial t}\right) = \sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}\xi^{+*}\left[\frac{\partial \pi_k}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}\frac{\partial \pi_k}{\partial x^j} - \frac{\partial \varepsilon^+}{\partial x^j}\frac{\partial \pi_k}{\partial p_j}\right]\frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} =$$

$$= \xi^{+*}\sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}\left[eE_k + e\frac{\pi_j}{\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}\frac{\partial A^j}{\partial x^k} - e\alpha^j\frac{\partial A_k}{\partial x^j}\right]\frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} =$$
$$= \sum_{j=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}\left[\left(eE_k + e\frac{\pi_j}{\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}\frac{\partial A^j}{\partial x^k}\right)\xi^{+*}\frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} - e\frac{\partial A_k}{\partial x^j}\xi^{+*}\alpha^j\frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k}\right]. \tag{4.2}$$

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

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

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

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

$$C_+C_- = \frac{|\boldsymbol{\pi}|}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}, \qquad \frac{C_-}{C_+} = \frac{|\boldsymbol{\pi}|}{\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+mc}. \tag{4.4}$$

Из (4.3) получим

$$\xi^{+*}\frac{\partial \xi^+}{\partial \pi_k} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \pi_k}(C_+^2+C_-^2) + C_-^2(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{n})\frac{\partial}{\partial \pi_k}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{n}) =$$
$$= -\frac{i[\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\sigma}]_k}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}\left(\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+mc\right)}, \tag{4.5}$$

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

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

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

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

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

$$L_2 = -i\chi_0^*\left[\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p^j}\frac{\partial\chi_1^+}{\partial x^j} - \frac{\partial\varepsilon^+}{\partial x^j}\frac{\partial\chi_1^+}{\partial p^j}\right) + i\frac{\partial\chi_1^+}{\partial t}\right] + \\ + i\sum_{j=1}^{3}\chi_0^*\frac{\partial\xi^+}{\partial p^j}\frac{\partial L_1^+}{\partial x^j} - \frac{1}{2}f_1L_1^+ + i\sum_{|\nu|=2}\frac{1}{\nu!}\chi_0^*\frac{\partial^2\xi^+}{\partial p^\nu}\frac{\partial^2\varepsilon^+}{\partial x^\nu}, \tag{4.8}$$

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

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

$$C_+ = 1 - \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{8m^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^4), \qquad C_- = -\frac{|\boldsymbol{\pi}|}{2m}\left(1 - \frac{3\boldsymbol{\pi}^2}{8m^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^4)\right),$$

$$\xi^+ = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{\boldsymbol{\pi}^2}{8m^2c^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^4) \\ \dfrac{(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\pi})}{2mc} + O(|\boldsymbol{\pi}|^3)\end{pmatrix},$$

$$f_1 = \frac{e\hbar}{8m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H}) + O(|\boldsymbol{\pi}|^2), \qquad \chi_0^*\frac{\partial\chi_0}{\partial p_j} = -\frac{i[\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{\sigma}]_j}{4m^2c^2} + O(|\boldsymbol{\pi}|^3), \tag{4.9}$$

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

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

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

Используя эти выражения, с той же точностью получим

$$\chi_1^+ = -\frac{\mathcal{F}_1^+}{2mc} + \xi^+\left(f_1 - \frac{L_1^+}{2mc}\right) + O(\boldsymbol{\pi}^2) = \frac{e}{4m^2c^2}\begin{pmatrix} \dfrac{i(\boldsymbol{E},\boldsymbol{\pi})}{2m} + \dfrac{\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{\pi}]}{2m} \\ -i(\boldsymbol{E},\boldsymbol{\sigma})\end{pmatrix} + \\ + \frac{e}{4m^2}\begin{pmatrix} \dfrac{(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})}{2} \\ -\dfrac{3i}{2mc}\sum_{j,k=1}^{3}\sigma^j\pi_k\dfrac{\partial A^k}{\partial_{x^j}} - \dfrac{i(\nabla_x,\mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\pi})}{2m} + \dfrac{3(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\pi})(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})}{4mc}\end{pmatrix} + O(\boldsymbol{\pi}^2).$$

Отсюда, принимая во внимание равенства

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

получим окончательно

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

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*

$$L_0^+ + \hbar L_1^+ + \hbar^2 L_2^+ = \\ = \varepsilon^+(\boldsymbol{\pi}) - \hbar\left\{\frac{i}{2}\sum_{j=1}^{3}\varepsilon^+_{p^j x^j} - \frac{e(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{H})}{2\sqrt{m^2c^2 + \boldsymbol{\pi}^2}} - \frac{e\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{\pi}]}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}\left(\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2} + mc\right)}\right\} + \\ + \hbar^2\left\{\frac{\hbar^2 e}{8m^2c^2}\Delta\Phi + \frac{e^2\boldsymbol{E}^2}{8m^3c^3} + \frac{e^2}{8m^3c^3}\sum_{j,k=1}^{3}\left(\frac{\partial A^j}{\partial x^k}\frac{\partial A^j}{\partial x^k} + \frac{\partial A^j}{\partial x^k}\frac{\partial A^k}{\partial x^j} + \frac{\partial A^k}{\partial x^k}\frac{\partial A^j}{\partial x^j}\right) + \\ + \frac{ie}{4m^3c^3}(\nabla_x, \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{H}) - \frac{ie}{8m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}, \operatorname{rot}\boldsymbol{E})\right\}. \tag{4.11}$$

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 $\operatorname{mod}\big(O(\hbar^3) + O\big(\hbar^2|\boldsymbol{\pi}|\big)\big)$. Согласно формуле (2.7) вейлевский символ $L_{\mathrm{W}} = L_0^+ + \hbar L_1^+ + \hbar^2 L_2^+$ есть

$$L_{\mathrm{W}}(\mathbf{p}, \mathbf{x}, t, \hbar) = L_0^+ + \frac{i\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 L_0^+}{\partial x^j\,\partial p_j} + \hbar L_1^+ - \\ - \frac{\hbar^2}{8}\sum_{j,k=1}^{3}\frac{\partial^4 L_0^+}{\partial x^j\,\partial x^k\,\partial p_j\,\partial p_k}\bigg|_{\boldsymbol{\pi}=0} + \frac{i\hbar^2}{2}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 L_1^+}{\partial x^j\,\partial p_j}\bigg|_{\boldsymbol{\pi}=0} + \hbar^2 L_2^+|_{\boldsymbol{\pi}=0}. \tag{4.12}$$

После соответствующих вычислений получим

$$\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 L_0^+}{\partial x^j\,\partial p_j} = \sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 \varepsilon_0^+}{\partial x^j\,\partial p_j},$$

$$\sum_{j,k=1}^{3}\frac{\partial^4 L_0^+}{\partial x^j\,\partial x^k\,\partial p_j\,\partial p_k}\bigg|_{\boldsymbol{\pi}=0} = \frac{1}{m^3c^3}\sum_{j,k=1}^{3}\left(\frac{\partial A^j}{\partial x^k}\frac{\partial A^j}{\partial x^k} + \frac{\partial A^j}{\partial x^k}\frac{\partial A^k}{\partial x^j} + \frac{\partial A^k}{\partial x^k}\frac{\partial A^j}{\partial x^j}\right) + O\big(|\boldsymbol{\pi}| + \hbar\big),$$

$$\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial^2 L_1^+}{\partial x^j\,\partial p_j} = \frac{e(\nabla_x, \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{H})}{2\sqrt{m^2c^2 + \boldsymbol{\pi}^2}} + O\big(|\boldsymbol{\pi}| + \hbar\big).$$

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*

$$
\begin{aligned}
L_{\mathrm{W}}^{+}(\mathbf{p},\mathbf{r},\hbar) &= c\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+e\Phi-\frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}-\\
&-\frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{\pi}]}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}\left(\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+mc\right)}+\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta\Phi+\frac{e^2\hbar^2\boldsymbol{E}^2}{8m^3c^3}+O\big(\hbar^2|\boldsymbol{\pi}|\big), \qquad (4.13)\\
L_{\mathrm{W}}^{-}(\mathbf{p},\mathbf{r},\hbar) &= -c\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+e\Phi-\frac{e\hbar(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}}+\\
&+\frac{e\hbar\bar{\boldsymbol{\sigma}}[\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{\pi}]}{2\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}\left(\sqrt{m^2c^2+\boldsymbol{\pi}^2}+mc\right)}+\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta\Phi-\frac{e^2\hbar^2\boldsymbol{E}^2}{8m^3c^3}+O\big(\hbar^2|\boldsymbol{\pi}|\big). \qquad (4.14)
\end{aligned}
$$

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 $L_{\mathrm{W}}^{\pm}$. 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 $O\big((mc)^{-1}\big)$. Все остальные слагаемые – это поправки. Представим окончательные формулы, сохранив также слагаемые $O\big((mc)^{-2}\big)$:

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

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 $(\mathbf{p},\mathbf{x})\to\infty$ порядка не выше m, т. е. с некоторыми константами $C_{\alpha,\beta}$ выполняются неравенства

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

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

$$\bigl\|a(\mathbf{p},\mathbf{x})\bigr\|_{k,m}=\sum_{|\alpha|+|\beta|\leqslant k}\sup\frac{\bigl|\frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial p^{\alpha}}\frac{\partial^{|\beta|}}{\partial x^{\beta}}a(\mathbf{p},\mathbf{x})\bigr|}{\bigl(1+|\mathbf{p}|+|\mathbf{x}|\bigr)^{m}},\tag{5.1}$$

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 $\bigl\|a(\mathbf{p},\mathbf{x},\mu)\bigr\|_{k,m}$ есть величина порядка $O(\mu^N)$ при $\mu\to 0$.

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 $m_1\geqslant 0$, $m_2\geqslant 0$. Тогда композиция $a_2\bigl(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}},\overset{2}{\mathbf{x}}\bigr)a_1\bigl(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}},\overset{2}{\mathbf{x}}\bigr)$ имеет символ $b(\mathbf{p},\mathbf{x},\mu)$, принадлежащий классу $S^{m_1+m_2}$ при каждом $0\leqslant\mu\leqslant 1$, 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 $\mathcal{O}(\mu^N)$ относительно $S^{m_1+m_2}$, причем для любых целых $N\geqslant 0$, $k\geqslant 0$ найдутся такие целые числа $k_1\geqslant 0$, $k_2\geqslant 0$, что выполняются оценки

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

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

$$a\bigl(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}},\overset{2}{\mathbf{x}}\bigr)u=\frac{1}{(2\pi\mu)^3}\iint e^{\frac{i}{\mu}(\mathbf{x}-\mathbf{y})\cdot\mathbf{p}}a(\mathbf{p},\mathbf{x})u(\mathbf{y})\,dy\,dp.\tag{5.3}$$

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 $\mathbf{x}\to\infty$) 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 $\varepsilon \to 0$ 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

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

Путем таких интегрирований можно превратить формулу (5.3) в абсолютно сходящийся интеграл. Оператор $a\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)$ для $a(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \in S^m$ при каждом $\mu \neq 0$ непрерывно переводит пространство S в себя, причем отображение $\big(a(\mathbf{p}, \mathbf{x}), u(\mathbf{x})\big) \to a\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)u$ непрерывно переводит $S^m \times S$ в S, что легко устанавливается интегрированиями по частям в (5.3). Это же отображение при $m \geqslant 0$, $m' \geqslant 0$ 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

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

где

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

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

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

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 $\big(a_1(\mathbf{p}, \mathbf{x}), a_2(\mathbf{p}, \mathbf{x})\big) \to b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ есть непрерывное отображение $S^{m_1} \times S^{m_2} \to S^{m_1+m_2}$ при любых $m_1 \geqslant 0$, $m_2 \geqslant 0$, $0 < \mu \leqslant 1$, поэтому это отображение непрерывно, как и отображение $S^{m_1+1} \times S^{m_2+1} \to S^{m_1+m_2+2}$.

Рассмотрим финитные аппроксимации $a^\varepsilon_{1,2}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) = \rho(\varepsilon\mathbf{x})\rho(\varepsilon\mathbf{p}) a_{1,2}(\mathbf{p}, \mathbf{x})$. Пусть $b^\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ – символ композиции операторов $\hat{a}^\varepsilon_1$ и $\hat{a}^\varepsilon_2$. Легко видеть, что при $\varepsilon \to 0$ 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, $b^\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu) \to b(\mathbf{p}, \mathbf{x}, \mu)$ в $S^{m_1+m_2+2}$, так что в пространстве S

$$b^\varepsilon\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, \mu\big)u \to b\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, \mu\big)u \qquad \forall u(\mathbf{x}) \in S. \tag{5.7}$$

С другой стороны, отображения $a_{1,2}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \to a_{1,2}\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)$ 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

$$b^\varepsilon\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, \mu\big)u = a_2^\varepsilon\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)a_1^\varepsilon\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)u \to a_2\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)a_1\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)u \qquad \forall u(\mathbf{x}) \in S. \tag{5.8}$$

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

$$b\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}, \mu\big)u = a_2\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)a_1\big(\overset{1}{\hat{\mathbf{p}}}, \overset{2}{\mathbf{x}}\big)u \qquad \forall u(\mathbf{x}) \in S,$$

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 временно́м 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 $j \geqslant 1$. Теперь построим функции $\Psi_N^\pm$ с помощью приближенного сплетающего оператора:

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

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

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

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

Утверждение 3. *Пусть выполняется редуцированное уравнение*

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

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. Тютина 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. Dobrokhotov, 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. Соврем. пробл. мат., **13**, ред. Р. В. Гамкрелидзе, ВИНИТИ, 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.

Поступила в редакцию 16.11.2010