ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 176, № 2
август, 2013

 А. Я. Силенко*

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ ПРЯМОГО И “ШАГ ЗА ШАГОМ” ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФОЛДИ–ВАУТХОЙЗЕНА

Релятивистские методы преобразования Фолди–Ваутхойзена типа “шаг за шагом” уже после первого шага дают выражение для оператора Гамильтона, не совпадающее с точным результатом, который определяется при помощи метода Эриксена. Согласие между методами имеет место для слагаемых нулевого и первого порядков по постоянной Планка, а для слагаемых второго и более высоких порядков такое согласие отсутствует. Проанализированы достоинства и недостатки различных методов и установлены границы их применимости.

Ключевые слова: преобразование Фолди–Ваутхойзена, унитарные преобразования, релятивистская квантовая механика.

DOI: 1010.4231/tmf8468

1. ВВЕДЕНИЕ

Представление Фолди–Ваутхойзена (ФВ) [1] обладает уникальными свойствами, благодаря которым оно занимает особое место в квантовой механике. В этом представлении квантово-механические операторы для релятивистских частиц во внешнем поле имеют такой же вид, как и в нерелятивистской квантовой теории. В частности, операторы положения [2] и импульса равны $\boldsymbol{r}$ и $\boldsymbol{p} = -i\hbar\nabla$, а оператор поляризации для частиц со спином $1/2$ выражается матрицей Дирака $\mathbf{\Pi}$. В других представлениях эти операторы записываются с помощью значительно более громоздких формул (см. работы [1], [3]). Соотношения между операторами в представлении ФВ аналогичны соотношениям между соответствующими классическими величинами. Простой вид операторов, соответствующих классическим наблюдаемым, является важнейшим достоинством данного представления. Указанные свойства представления ФВ обеспечивают возможность его успешного использования для перехода к квазиклассическому приближению и классическому пределу релятивистской квантовой механики [1], [4]. Отметим, что в данном представлении гамильтониан и все операторы диагональны по двум спинорам (являются блочно-диагональными).

*Научно-исследовательское учреждение “Институт ядерных проблем” Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь. E-mail: silenko@inp.bsu.by

При использовании представления ФВ переход к классическому пределу, как правило, производится путем простой замены операторов в выражениях для гамильтониана и операторных уравнениях динамики соответствующими классическими величинами. Возможность такой замены, явно или неявно использованная почти во всех работах, посвященных релятивистскому преобразованию ФВ, была недавно строго доказана в работе [5]. Эта возможность радикально упрощает интерпретацию базовых квантово-механических уравнений, особенно в релятивистском случае.

Для практических целей вывод оператора Гамильтона в представлении ФВ должен производиться с точностью до слагаемых порядка $\hbar^2$. Вклад в оператор Гамильтона, обусловленный скалярными электрической и магнитной поляризуемостями, а для частиц со спином $s > 1/2$ – также квадрупольным взаимодействием и тензорными электрической и магнитной поляризуемостями, имеет именно такой порядок величины. Отметим, что слагаемые, характеризующие поляризуемости, имеют второй порядок по полю. В качестве примера того, насколько важен анализ таких взаимодействий для современной экспериментальной физики, укажем на необходимость учета тензорных поляризуемостей при проведении экспериментов по поиску электрического дипольного момента дейтрона. В этих экспериментах тензорные поляризуемости дейтрона могут быть успешно измерены (см. работы [6]–[8] и цитированную в них литературу).

Важность представления ФВ для современной квантовой механики и физики элементарных частиц делает весьма актуальной проблему перехода к этому представлению. Основными являются прямые методы перехода, позволяющие перейти к представлению ФВ в результате одного преобразования, и методы типа "шаг за шагом" (итерационные). В настоящей работе мы проводим сравнительный анализ данных методов и устанавливаем границы их применимости.

В работе используется система единиц $c = 1$. В то же время в уравнения включается постоянная Планка $\hbar$.

2. МЕТОДЫ ПЕРЕХОДА К ПРЕДСТАВЛЕНИЮ ФВ

Переход к представлению ФВ является весьма нетривиальной задачей. Сравнительно давно было замечено, что такой переход отнюдь не тождествен приведению гамильтониана к блочно-диагональному виду (см. работу [9] и цитированную в ней литературу). В частности, как показано в [10], даже классический метод, разработанный Фолди и Ваутхойзеном [1], строго говоря, не ведет к этому представлению. В работе [1] переход к блочно-диагональному виду гамильтониана производился "шаг за шагом", путем последовательных итераций, в результате каждой из которых удалялись нечетные (не имеющие блочно-диагонального вида) слагаемые наибольшего порядка. Однако оператор U_{FW} *точного* преобразования ФВ ($\Psi_{\mathrm{FW}} = U_{\mathrm{FW}}\Psi$) для частиц со спином $1/2$ должен удовлетворять условию Эриксена [11]:

$$\beta U_{\mathrm{FW}} = U_{\mathrm{FW}}^{\dagger}\beta, \tag{1}$$

где β – матрица Дирака. При представлении оператора U_{FW} в экспоненциальной форме $U_{\mathrm{FW}} = e^{iS}$ условие (1) эквивалентно требованию, чтобы показатель экспоненты S был эрмитовым и нечетным оператором [10]. В силу теоремы Хаусдорфа [12]

$$e^{A}e^{B} = \exp\biggl(A + B + \frac{[A,B]}{2} + \text{коммутаторы более высоких порядков}\biggr), \tag{2}$$

причем $e^A e^B \neq e^B e^A$. Если $A = iS_1$, $B = iS_2$, где S_1 и S_2 – нечетные эрмитовы операторы, то оператор $[A, B]$ является четным и оператор $e^A e^B$ условию Эриксена (1) не удовлетворяет [10]. Таким образом, классический метод ФВ [1] и другие методы типа "шаг за шагом" не удовлетворяют условию нечетности оператора S и, следовательно, могут обеспечить только приближенный переход к представлению ФВ. Вследствие некоммутативности матриц Дирака оператор $[S_1, S_2]$ может иметь тот же порядок, что и S_2. В этом случае уже вторая итерация является бесполезной. Однако формула (2) не позволяет количественно определить ошибку, даваемую итерационными методами.

Для статического случая общий вид оператора точного преобразования к представлению ФВ (преобразования ФВ) был найден Эриксеном [11]. Исходный гамильтониан для частиц со спином 1/2 можно представить в следующем общем виде:

$$\mathcal{H}_{\rm D} = \beta m + \mathcal{E} + \mathcal{O}, \qquad \beta\mathcal{E} = \mathcal{E}\beta, \quad \beta\mathcal{O} = -\mathcal{O}\beta, \tag{3}$$

где $\mathcal{E}$ и $\mathcal{O}$ – четный и нечетный операторы соответственно. Найденный Эриксеном оператор преобразования определяется выражением

$$U_{\rm FW} = \frac{1}{2}(1 + \beta\lambda)\left[1 + \frac{1}{4}(\beta\lambda + \lambda\beta - 2)\right]^{-1/2}, \tag{4}$$

где $\lambda = \mathcal{H}_{\rm D}/\sqrt{\mathcal{H}_{\rm D}^2}$. Величина λ принимает значения $+1$ и -1 для решений с положительной и отрицательной энергией соответственно. Важно, что $\lambda^2 = 1$ и $[\beta\lambda, \lambda\beta] = 0$ [11]. Кроме того, оператор $\beta\lambda + \lambda\beta$ четный: $[\beta, (\beta\lambda + \lambda\beta)] = 0$. Четные операторы являются блочно-диагональными и не смешивают верхние и нижние спиноры. Формула (4) может быть также представлена в виде [9]

$$U_{\rm FW} = \frac{1 + \beta\lambda}{\sqrt{(1 + \beta\lambda)^\dagger (1 + \beta\lambda)}}.$$

Два операторных множителя под знаком квадратного корня коммутируют.

Оператор $U_{\rm FW}$ обращает в нуль нижний или верхний спинор любой собственной функции гамильтониана Дирака для положительной или отрицательной полной энергии соответственно. Это преобразование совершается в один шаг.

Другие прямые методы преобразования ФВ разработаны в статьях [13]–[15]. Мы ограничимся рассмотрением метода Эриксена, поскольку он получил исчерпывающее обоснование, данное в работе [16].

Легко видеть, однако, что эффективно использовать метод Эриксена с целью нахождения релятивистских формул для частиц во внешнем поле не удается, поскольку общая формула (4) очень громоздка и содержит квадратные корни из матриц Дирака. Наиболее общее выражение для оператора Гамильтона в представлении ФВ, найденное методом Эриксена в работе [16], представляет этот оператор в виде ряда релятивистских поправок по степеням операторов $\mathcal{E}/m$ и $\mathcal{O}/m$. Данное разложение дает хорошее решение проблемы для нерелятивистских скоростей частиц. В частности, его можно использовать для электронов в атомах (исключая тяжелые атомы), поскольку $|v/c| \sim \sqrt{Z}\alpha \ll 1$. Однако метод Эриксена не позволяет, например, перейти к представлению ФВ для быстрых частиц, двигающихся во внешних полях (в ускорителях и накопительных кольцах). При $\mathcal{O}^2/m^2 \approx \boldsymbol{p}^2/m^2 \geqslant 1$

ряд релятивистских поправок вообще не является сходящимся. Таким образом, с помощью метода Эриксена нельзя найти компактные релятивистские выражения для оператора Гамильтона в данном представлении.

В противоположность методу Эриксена некоторые из итерационных методов дают искомые релятивистские выражения [3], [17], [18], [19]–[22]. Отметим, что разработанный в работе [18] метод применим для частиц с любым спином. Поскольку все указанные методы являются приближенными, необходимо определить границы их применимости. Очевидно, что наиболее простой и надежный способ такого определения – это сравнение релятивистских гамильтонианов в представлении ФВ, получаемых методами типа "шаг за шагом", с точным разложением в ряд, приведенным в [16]. Данная задача является чрезвычайно важной, поскольку проверяются, в частности, слагаемые, пропорциональные вторым производным от потенциалов поля и квадратам напряженностей поля. Как указано выше, их учет может быть необходим при рассмотрении эффектов, обусловленных скалярными и тензорными поляризуемостями.

В настоящей работе мы сравниваем между собой результаты, получающиеся тремя методами, которые были развиты в работе [17], статьях [3], [18] и работах [19]–[22]. Эти методы имеют наиболее фундаментальное обоснование среди методов типа "шаг за шагом". Затем мы сопоставляем эти результаты с результатами по методу Эриксена и делаем вывод о точности перехода к представлению ФВ, даваемой указанными методами.

3. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ, ПОЛУЧАЕМЫХ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ ТИПА "ШАГ ЗА ШАГОМ"

Для сравнения результатов, разумеется, необходимо использовать уравнения (3) в качестве исходных и формальное выражение гамильтониана в представлении ФВ через операторы $\mathcal{E}$, $\mathcal{O}$. Именно в таком виде преобразованный гамильтониан был представлен в работах [10], [11], [16], [23]. Хотя в работах [17], [19]–[22] решались достаточно общие задачи, данная форма записи там не использовалась. С другой стороны, в работе [3] конкретный вид оператора Гамильтона в представлении ФВ был получен в приближении слабого поля, т. е. при учете только слагаемых первого порядка по потенциалам поля и их производным. По этой причине мы сначала определим данный оператор с необходимой для сравнения точностью, используя общее уравнение (31) из работы [3]. Указанное уравнение имеет вид

$$\mathcal{H}_{\rm FW}=\beta\epsilon+\mathcal{E}'+\frac{1}{4}\beta\left\{\frac{1}{\epsilon},(\mathcal{O}')^2\right\},\qquad \epsilon=\sqrt{m^2+\mathcal{O}^2},\tag{5}$$

где $\{\,\cdot\,,\cdot\,\}$ обозначает антикоммутатор, а $\mathcal{E}'$ и $\mathcal{O}'$ – четный и нечетный операторы после первого шага преобразования, определяемые выражениями [3]

$$\begin{aligned}\mathcal{E}'=\mathcal{E}-\frac{1}{4}\left[\frac{\epsilon+m}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}\,,\left[\frac{\epsilon+m}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}\,,\mathcal{F}\right]\right]+{}\\ +\frac{1}{4}\left[\frac{\beta\mathcal{O}}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}\,,\left[\frac{\beta\mathcal{O}}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}\,,\mathcal{F}\right]\right],\\ \mathcal{O}'=\frac{\beta\mathcal{O}}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}\,\mathcal{F}\frac{\epsilon+m}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}-\frac{\epsilon+m}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}}\,\mathcal{F}\frac{\beta\mathcal{O}}{\sqrt{2\epsilon(\epsilon+m)}},\end{aligned}\tag{6}$$

где

$$\mathcal{F} = \mathcal{E} - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

При выводе гамильтониана в представлении ФВ с определенной точностью по постоянной Планка и записи исходного оператора в формальном виде (3) необходимо использовать следующую априорную информацию. Каждая коммутация оператора $\boldsymbol{p}$ с некоторой функцией $f(\boldsymbol{r})$ от координат (например, со скалярным потенциалом) по сравнению с произведением $\boldsymbol{p}f(\boldsymbol{r})$ добавляет множитель порядка $\hbar/S_0$, где S_0 – некоторая величина, имеющая размерность действия. При выполнении условия $\lambda_{\mathrm{B}} \ll l$ малости длины волны де Бройля $\lambda_{\mathrm{B}} = \hbar/p$ по сравнению с характерным размером l области неоднородности внешнего поля (или области локализации частицы) коммутатор операторов по порядку величины меньше чем их произведение:

$$\frac{\big|[\boldsymbol{p}, f(\boldsymbol{r})]\big|}{\big|pf(\boldsymbol{r})\big|} \sim \frac{\hbar}{lp} = \frac{\lambda_{\mathrm{B}}}{l} \ll 1. \tag{7}$$

Для нахождения порядка величины S_0 используется оценка средних значений соответствующих членов в гамильтониане. Из соотношения (7) следует, что $S_0 = lp$. Для пучков частиц в ускорителях и накопительных кольцах эта величина равна угловому моменту ($S_0 = rp = L$, где r – радиус кольца), и условие $\hbar/S_0 \ll 1$ выполняется автоматически. Разумеется, это условие выполняется не во всех случаях. В частности, оно весьма часто (при $rp \sim \hbar$, где r – радиус орбиты электрона) не выполняется для электронов в атомах. В то же время контактный характер взаимодействия (например, электрослабого), как показывает проведенный в статье [24] анализ, не препятствует корректному описанию релятивистских эффектов при использовании преобразования ФВ.

Еще одной стандартной причиной того, что операторы $\mathcal{O}, \mathcal{E}$ не коммутируют, является некоммутативность различных компонент оператора кинетического импульса $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} - e\boldsymbol{A}$: $[\pi_i, \pi_j] = iee_{ijk}B_k$. В этом случае для релятивистских частиц имеет место следующая оценка:

$$\frac{\big|[\pi_i, \pi_j]\big|}{|\pi_i\pi_j|} \sim \frac{\hbar}{S_0} = \frac{|e|\hbar B}{\epsilon^2},$$

где ϵ – полная кинетическая энергия, включающая энергию покоя. Обычно такое отсутствие коммутации приводит к появлению зависящих от спина слагаемых в операторе Гамильтона в представлении ФВ, а величина $S_0 = \epsilon^2/|e|B$, как правило, значительно больше $\hbar$.

В общем случае порядок величины коммутатора $[\mathcal{O}, \mathcal{E}]$ определяется коммутатором оператора $\boldsymbol{p}$ с функцией от координат или, если оператор $\mathcal{E}$ содержит четные матрицы $\boldsymbol{\Sigma}$, $\boldsymbol{\Pi}$, их коммутаторами с матрицами, содержащимися в операторе $\mathcal{O}$. Например, для частиц со спином 1/2 в однородных электрическом и магнитном полях [3] мы имеем

$$\mathcal{E} = e\Phi - \mu'\boldsymbol{\Pi}\cdot\boldsymbol{B}, \qquad \mathcal{O} = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\pi} + i\mu'\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{E}.$$

В этом случае

$$[\mathcal{O}, \mathcal{E}] = ie\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{E} - 2\beta\gamma^5\mu'\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{B} - 2i\gamma^5{\mu'}^2\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{8}$$

Поскольку $\mu' = (g-2)e\hbar/4mc$, второе слагаемое в правой части равенства (8), обусловленное некоммутативностью матриц $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{\Pi}$, также пропорционально $\hbar$. Если порядок величины $\mathcal{E}$ определяется скалярным потенциалом и $|g-2| \sim 1$, то для данного слагаемого $S_0 = m|\Phi|/B$. При $B \sim E$ для релятивистских частиц оно имеет такой же порядок величины, как и первое слагаемое.

Оператор $\mathcal{O}$, будучи нечетным (не являясь блочно-диагональным), содержит матрицы Дирака γ_1, γ_2, γ_3. В соответствии со свойствами этих матриц многократные коммутаторы вида $[\mathcal{O},[\mathcal{O},\dots[\mathcal{O},\mathcal{E}]\dots]]$ имеют порядок величины $\hbar/S_0$ по отношению к произведению операторов $\mathcal{O}\mathcal{O}\dots\mathcal{O}\mathcal{E}$, причем множитель $\hbar$ появляется уже в результате первой коммутации. В противоположность этому коммутаторы вида $[\mathcal{O}^2,[\mathcal{O},\mathcal{E}]]$, $[\mathcal{O}^2,[\mathcal{O}^2,\mathcal{E}]]$ и $[[\mathcal{O},\mathcal{E}],\mathcal{E}]$ имеют порядок $(\hbar/S_0)^2$ (по отношению к произведению входяших в них операторов). Это свойство является следствием того обстоятельства, что операторы $\mathcal{O}^2$ и $\mathcal{E}$ являются четными и не содержат матрицы Дирака γ_1, γ_2, γ_3, не являющиеся блочно-диагональными.

Определяя порядок величины, мы указываем наименьшую возможную степень по $\hbar$. Например, коммутатор $[\mathcal{O},\mathcal{E}]$, номинально имеющий порядок величины $\hbar/S_0$, может, как в равенстве (8), содержать слагаемые порядка $(\hbar/S_0)^2, (\hbar/S_0)^3, \dots$, иметь порядок величины выше первого по $\hbar/S_0$ (см. раздел 5) или вообще быть равным нулю.

В работе [3] выражения для оператора $\mathcal{H}_{\mathrm{FW}}$ рассчитывались только для конкретных задач и использовалось приближение слабого поля. Однако с помощью общих формул (5), (6) нетрудно определить вид этого оператора с точностью до членов порядка $(\hbar/S_0)^2$:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{FW}} = \beta\epsilon + \mathcal{E} - \frac{1}{8}\left\{\frac{1}{\epsilon(\epsilon+m)}, [\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{F}]]\right\} + \frac{1}{64}\left\{\frac{2\epsilon^2+2\epsilon m+m^2}{\epsilon^4(\epsilon+m)^2}, [\mathcal{O}^2,[\mathcal{O}^2,\mathcal{F}]]\right\} - \\ - \frac{1}{16}\beta\left\{\frac{1}{\epsilon^3}, ([\mathcal{O},\mathcal{F}])^2\right\} + \frac{1}{64}\beta\left\{\frac{1}{\epsilon^5}, ([\mathcal{O}^2,\mathcal{F}])^2\right\}. \tag{9}$$

Для сравнения результатов, получаемых различными методами типа “шаг за шагом”, рассмотрим дираковские частицы в неоднородном электростатическом поле. В этом случае в формуле (9), полученной при использовании метода из работ [3], [18] $\mathcal{E} = e\Phi$ и $\mathcal{O} = \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$, где Φ – скалярный потенциал, $\boldsymbol{\alpha}$ – матрица Дирака. Отметим нетривиальность выражений для операторов $\mathcal{E}$ и $\mathcal{O}$, исключающую возможность случайных совпадений. Уравнение (9) приобретает вид

$$\mathcal{H}_{\mathrm{FW}} = \beta\epsilon' + e\Phi + \frac{e\hbar}{8}\left\{\frac{1}{\epsilon'(\epsilon'+m)}, [\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{E}) - \boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{p}) + \hbar\Delta\Phi]\right\} - \\ - \frac{e\hbar^2}{16}\left\{\frac{2(\epsilon')^2+2\epsilon' m+m^2}{(\epsilon')^4(\epsilon'+m)^2}, (\boldsymbol{p}\cdot\nabla)(\boldsymbol{p}\cdot\nabla)\Phi\right\} + \\ + \frac{e^2\hbar^2}{16}\beta\left\{\frac{1}{(\epsilon')^3}, \boldsymbol{E}^2\right\} - \frac{e^2\hbar^2}{64}\beta\left\{\frac{1}{(\epsilon')^5}, (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E} + \boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{p})^2\right\}, \tag{10}$$

где $\epsilon' = \sqrt{m^2+\boldsymbol{p}^2}$, $\boldsymbol{E} = -\nabla\Phi$.

Приведенный выше результат совпадает с соответствующими выражениями, полученными в работах [17], [22] (в первой из них учитывалось также магнитное поле).

Анализ сравниваемых методов показывает, что такое совпадение является совершенно естественным. Все три сравниваемых метода являются релятивистскими, и преобразование ФВ производится в них по одной и той же схеме. На первом и последующем этапах ("шагах") операторы преобразования выбираются так, чтобы они обращали в нуль суммарный нечетный оператор $(\mathcal{O}, \mathcal{O}', \mathcal{O}'', \ldots)$ при условии, что он коммутирует с суммарным четным оператором $(\mathcal{E}, \mathcal{E}', \mathcal{E}'', \ldots)$, а на втором и последующих этапах – также с оператором ϵ и операторами ϵ' и т. д. В общем случае такая коммутация не имеет места, поэтому получается сходящийся ряд поправок, определяющий трансформированный оператор Гамильтона. Все три метода должны приводить к эквивалентным результатам, поскольку их различие сводится к использованию различных формализмов квантовой механики. В методе, предложенном в работе [17], не используются унитарные преобразования. Он базируется на квантовой механике Мойала (см. работу [25] и цитированную в ней литературу), в которой квантово-механические эрмитовы операторы ассоциируются с "классическим" распределением в фазовом пространстве. Квантово-механическая эволюция описывается с помощью скобок Мойала, соответствующих коммутатору в обычной квантовой механике, а наблюдаемые величины характеризуются функциями в фазовом пространстве. В оригинальном методе, предложенном и примененном в работах [19]–[22], также не используются унитарные преобразования. Гамильтониан квантово-механической системы представляется в виде матрицы $H_0(\boldsymbol{P}, \boldsymbol{R})$, элементы которой являются операторами, зависящими от пары канонических переменных $\boldsymbol{P}$ и $\boldsymbol{R}$. Этот метод определяет процедуру диагонализации, основанную на формальном разложении в ряд по степеням постоянной Планка $\hbar$, и может быть использован для широкого класса гамильтонианов, для которых являются существенными поправки на фазу Берри. В отличие от этих методов, в работах [3], [18] используется обычный вид квантово-механических операторов, а переход к представлению ФВ производится путем унитарных преобразований.

Однако совпадение результатов, получаемых тремя методами, говорит только о том, что в рамках этих методов исходный гамильтониан преобразуется к одному и тому же представлению, но не о том, что это представление есть именно представление ФВ. Отметим, что данное совпадение является дополнительным подтверждением корректности формализмов квантовой механики, которые использованы в статьях [17], [19]–[22].

К правильным результатам при расчете слагаемых нулевого и первого порядков по $\hbar/S_0$ приводят и некоторые другие методы релятивистского преобразования ФВ, в частности предложенный в статьях [24], [26] метод, базирующийся на одном из вариантов метода исключения, разработанном Ахиезером, Берестецким и Ландау [27], [28]. Корректные выражения дает также метод, использованный в работе [29]. В то же время некоторые из релятивистских методов, в том числе предложенных для перехода к представлению ФВ, дают неверные результаты уже в первом порядке по $\hbar/S_0$ (см. приведенные в работе [9] примеры).

Сравнение трех рассматриваемых методов приводит к следующему заключению. Наиболее громоздких вычислений требует метод, предложенный в работах [19]–[22], в то время как использование математического аппарата традиционной квантовой механики (в работах [3], [18]) позволяет перейти к представлению ФВ наиболее простым путем. Запись исходного оператора Гамильтона в виде (3) и применение общей формулы (9) еще более упрощают расчеты. Отметим, что наиболее простой способ вывода релятивистского оператора Гамильтона в рамках традиционного операторного формализма – это расчет по приводимой ниже формуле (15), в которой по сравнению с (9) опущены не вычисляемые с помощью итерационных методов слагаемые порядка $(\hbar/S_0)^2$. Необходимо тем не менее указать, что существенно большее количество вычислений, которые требуются при использовании разработанных в статьях [17], [19]–[22] методов, во многом обусловлено необходимостью переходить от одних формализмов квантовой механики к другим в начальных и конечных выражениях. Следует также отметить важность результатов, полученных в работах [19]–[22], [30] (см. также цитированную в них литературу) при исследовании эффектов, обусловленных фазами Берри.

4. СРАВНЕНИЕ ГАМИЛЬТОНИАНОВ, ПОЛУЧАЕМЫХ МЕТОДОМ ЭРИКСЕНА И МЕТОДАМИ ТИПА “ШАГ ЗА ШАГОМ”

Чтобы определить точность, которую дают методы типа “шаг за шагом”, необходимо сравнить уравнение (9) с получающимся по методу Эриксена разложением для оператора Гамильтона в представлении ФВ по степеням операторов $\mathcal{E}$, $\mathcal{O}$ и их произведений, содержащих достаточно высокие степени. Такое разложение было найдено в работе [16]. Однако результат этой работы, полученный с помощью символьных компьютерных вычислений, представлен в форме, весьма неудобной для проведения указанного сравнения. Редуцирование найденного в [16] оператора Гамильтона путем записи его через многократные коммутаторы приводит к следующему выражению:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathrm{FW}}^{(1)} = \beta\biggl(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} + \frac{\mathcal{O}^6}{16m^5} - \frac{5\mathcal{O}^8}{128m^7}\biggr) + \mathcal{E} - {}\\ - \frac{1}{128m^6}\{(8m^4 - 6m^2\mathcal{O}^2 + 5\mathcal{O}^4), [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]]\} + {}\\ + \frac{1}{512m^6}\{(2m^2 - \mathcal{O}^2), [\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}^2, \mathcal{E}]]\} + {}\\ + \frac{1}{16m^3}\beta\{\mathcal{O}, [[\mathcal{O}, \mathcal{E}], \mathcal{E}]\} - \frac{1}{32m^4}[\mathcal{O}, [[[\mathcal{O}, \mathcal{E}], \mathcal{E}], \mathcal{E}]] + {}\\ + \frac{11}{1024m^6}[\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]]]] + A_{24},\end{aligned} \tag{11}$$

где

$$\begin{aligned}A_{24} = \frac{1}{256m^5}\beta\bigl(24\{\mathcal{O}^2, ([\mathcal{O}, \mathcal{E}])^2\} - 11([\mathcal{O}^2, \mathcal{E}])^2 - {}\\ - 14\{\mathcal{O}^2, [[\mathcal{O}^2, \mathcal{E}], \mathcal{E}]\} - 4[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, [[\mathcal{O}^2, \mathcal{E}], \mathcal{E}]]] + {}\\ + \frac{9}{2}[[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, [\mathcal{O}^2, \mathcal{E}]]], \mathcal{E}] + \frac{5}{2}[\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}, [[\mathcal{O}, \mathcal{E}], \mathcal{E}]]]\bigr).\end{aligned}$$

В обозначении A_{24} первый индекс указывает количество операторов $\mathcal{E}$, второй – количество операторов $\mathcal{O}$ в произведении. Два предыдущих слагаемых в уравнении (11), определяющие оператор A_{32} и часть оператора A_{16}, имеют порядок величины $(\hbar/S_0)^3$ и могут не рассматриваться. Пренебрегая этими операторами, а также слагаемыми третьей степени по $\hbar$ в операторе A_{24}, находим

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\rm FW}^{(1)} = \beta\bigg(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} + \frac{\mathcal{O}^6}{16m^5} - \frac{5\mathcal{O}^8}{128m^7}\bigg) + \mathcal{E} - \\ - \frac{1}{128m^6}\{(8m^4 - 6m^2\mathcal{O}^2 + 5\mathcal{O}^4), [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]]\} + \\ + \frac{1}{512m^6}\{(2m^2 - \mathcal{O}^2), [\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}^2, \mathcal{E}]]\} + \frac{1}{16m^3}\beta\{\mathcal{O}, [[\mathcal{O}, \mathcal{E}], \mathcal{E}]\} + \\ + \frac{1}{256m^5}\beta\big(24\{\mathcal{O}^2, ([\mathcal{O}, \mathcal{E}])^2\} - 11([\mathcal{O}^2, \mathcal{E}])^2 - 14\{\mathcal{O}^2, [[\mathcal{O}^2, \mathcal{E}], \mathcal{E}]\}\big). \quad (12)\end{aligned}$$

Для сравнения с точным решением соотношение (9) необходимо записать для статического случая и также представить в виде ряда релятивистских поправок по степеням операторов $\mathcal{E}/m$, $\mathcal{O}/m$. В этом случае оно приобретает вид

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\rm FW} = \mathcal{H}_{\rm FW}^{(2)} = \beta\bigg(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3} + \frac{\mathcal{O}^6}{16m^5} - \frac{5\mathcal{O}^8}{128m^7}\bigg) + \mathcal{E} - \\ - \frac{1}{128m^6}\{(8m^4 - 6m^2\mathcal{O}^2 + 5\mathcal{O}^4), [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{E}]]\} + \\ + \frac{1}{512m^6}\{(10m^2 - 19\mathcal{O}^2), [\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}^2, \mathcal{E}]]\} - \frac{1}{8m^3}\beta([\mathcal{O}, \mathcal{E}])^2 + \frac{1}{32m^5}\beta([\mathcal{O}^2, \mathcal{E}])^2. \quad (13)\end{aligned}$$

Если рассмотреть нестационарный случай, изменить критерий оценки величины слагаемых в уравнениях (9), (13) и представить эти уравнения в виде разложения по степеням операторов $\mathcal{F}/m$, $\mathcal{O}/m$, ограничиваясь учетом слагаемых до третьего порядка по обратной массе, то указанные соотношения приводят к выражению, совпадающему с полученным в работе [10] классическим методом ФВ [1]:

$$\mathcal{H}_{\rm FW} = \mathcal{H}_{\rm FW}^{(3)} = \beta\bigg(m + \frac{\mathcal{O}^2}{2m} - \frac{\mathcal{O}^4}{8m^3}\bigg) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2}[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \mathcal{F}]] - \frac{1}{8m^3}\beta([\mathcal{O}, \mathcal{F}])^2. \quad (14)$$

Это обстоятельство также демонстрирует согласие результатов, полученных с помощью различных итерационных методов. Отметим, однако, что для слагаемых более высокого порядка по обратной массе в разложении по степеням операторов $\mathcal{F}/m$, $\mathcal{O}/m$ результаты, выведенные с помощью классического метода [1] и релятивистских методов типа “шаг за шагом”, не являются идентичными.

Почленно сравнивая выражения (12) и (13), нетрудно установить, что они не полностью согласуются друг с другом. Полное согласие имеет место только для двух слагаемых, определяющих разложение в ряд оператора $\beta\epsilon$ и первого из антикоммутаторов в уравнении (9), который, в свою очередь, является результом преобразования второго двойного коммутатора в уравнении (6). Указанные слагаемые имеют нулевой и первый порядок по $\hbar/S_0$ соответственно. Последующие слагаемые в уравнениях (12) и (13) не совпадают. Несоответствие имеет место даже для операторов, пропорциональных $[\mathcal{O}^2, [\mathcal{O}^2, \mathcal{E}]]$. Весьма важно, что в формулах (9), (13) соответствующие им операторы появляются в результате уже *первого* шага преобразования, и их необходимо учитывать в рамках приближения слабого поля ($\mathcal{E} \ll m$) при рассмотрении слагаемых порядка $(\hbar/S_0)^2$. Их появление является результом преобразования первого двойного коммутатора в уравнении (6). Член A_{22} в соотношении (12), также имеющий порядок величины $(\hbar/S_0)^2$, можно преобразовать следующим образом:

$$\frac{1}{16m^3}\beta\{\mathcal{O},[[\mathcal{O},\mathcal{E}],\mathcal{E}]\} = \frac{1}{16m^3}\beta[[\mathcal{O}^2,\mathcal{E}],\mathcal{E}] - \frac{1}{8m^3}\beta([\mathcal{O},\mathcal{E}])^2.$$

Очевидным является его существенное отличие от соответствующего слагаемого в уравнении (13), а также различие выражений для операторов A_{24} в двух уравнениях.

Таким образом, использование релятивистских методов типа "шаг за шагом" из работ [3], [17]–[22] позволяет определить правильный релятивистский вид слагаемых нулевого и первого порядков по $\hbar/S_0$, но слагаемые порядка $(\hbar/S_0)^2$ не равны соответствующим слагаемым в представлении ФВ. Их различие определяет, насколько отличается результирующий оператор преобразования, полученный методами типа "шаг за шагом" и равный произведению операторов последовательных преобразований, от точного оператора преобразования ФВ (4). Согласие между операторами Гамильтона, которые получаются методом Эриксена и методами типа "шаг за шагом", отсутствует даже для членов порядка $(\hbar/S_0)^2$. Некоторые члены порядка $(\hbar/S_0)^2$ появляются после первого шага преобразования и пропорциональны первой степени оператора $\mathcal{E}$, т. е. соответствуют приближению слабого поля. Даже для них отсутствует согласие между операторами Гамильтона, получаемыми методом Эриксена и методами типа "шаг за шагом". Такое соответствие существует в том и только в том случае, когда рассматриваемые слагаемые второго и более высоких порядков по $\hbar/S_0$ появляются как результат вычисления оператора $\beta\epsilon$ или первого из антикоммутаторов в уравнении (9). Например, метод Эриксена и итерационные методы приводят к согласующимся результатам при вычислении взаимодействия Дарвина, которое имеет порядок $(\hbar/S_0)^2$. Это взаимодействие определяется пропорциональным $\Delta\Phi$ членом в формуле (10) и появляется в результате вычисления указанного выше антикоммутатора.

По результатам данного исследования можно сделать вывод о прекрасном согласии итерационных методов между собой. Даже нерелятивистский метод, предложенный Фолди и Ваутхойзеном [1], при учете только основных релятивистских поправок дает выражение (14), которое получается также при помощи релятивистских методов типа "шаг за шагом" (для слагаемых более высоких порядков по обратной массе такое согласие не имеет места). Существенно сильнее различаются результаты, найденные при помощи итерационных методов, и результаты по методу Эриксена, который реализует прямое преобразование ФВ.

В соответствии с проведенным анализом для исходного оператора Гамильтона (3) релятивистские методы преобразования ФВ дают следующий вид трансформированного гамильтониана:

$$\mathcal{H}_{\mathrm{FW}} = \beta\epsilon + \mathcal{E} - \frac{1}{8}\left\{\frac{1}{\epsilon(\epsilon+m)},[\mathcal{O},[\mathcal{O},\mathcal{F}]]\right\}. \tag{15}$$

Этот гамильтониан содержит определяемые точно члены нулевого и первого порядков по $\hbar/S_0$. Слагаемые второго и более высоких порядков по $\hbar/S_0$, если они появляются не в результате вычисления гамильтониана (15), не могут быть определены с помощью методов типа "шаг за шагом".

5. ПРИМЕР: РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЧАСТИЦЫ В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В качестве примера, демонстрирующего важность производимого методами типа "шаг за шагом" преобразования ФВ для релятивистских частиц, определим энергетический спектр частиц со спинами 0, 1/2 и 1, движущихся в плоскости, ортогональной однородному магнитному полю. Для частиц с нулевым спином оператор Гамильтона в представлении ФВ равен [31]

$$\mathcal{H}_{\rm FW} = \beta\sqrt{m^2 + \boldsymbol{\pi}^2}, \tag{16}$$

а для частиц со спином 1/2 и аномальным магнитным моментом (АММ) [3], [32], [33] этот оператор имеет вид

$$\mathcal{H}_{\rm FW} = \beta\sqrt{m^2 + \boldsymbol{\pi}^2 - e\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}} - \mu'\boldsymbol{\Pi}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{17}$$

Уравнения (16), (17) являются точными.

Если магнитное поле направлено вдоль оси z, а движение частицы поперечное (собственные значения операторов p_z и π_z равны нулю), то оператор $p_z = -i\hbar(\partial/\partial z)$ коммутирует с оператором Гамильтона и имеет собственные значения $\mathcal{P}_z = \mathrm{const}$. Следовательно, рассмотрение частного случая $\mathcal{P}_z = 0$ является вполне обоснованным [3], [33]. В то же время задачу о движении частицы с произвольным ненулевым собственным значением $\mathcal{P}_z$ можно свести к этому случаю преобразованием системы отсчета.

Энергетический спектр скалярных частиц определяется формулой

$$E = \sqrt{m^2 + (2n+1)|e|\hbar B}, \qquad n = 0, 1, 2, \dots\ . \tag{18}$$

Отметим, что для релятивистских частиц два слагаемых под знаком квадратного корня имеют один и тот же порядок величины, что, как правило, требует выполнения условия $n \gg 1$.

Энергетический спектр и собственные волновые функции частиц с АММ в постоянном и однородном магнитном поле были впервые найдены для представления Дирака [34]. Эта задача была успешно решена и в представлении ФВ [35]. При $\mathcal{P}_z = 0$ формула для энергетического спектра имеет вид

$$E = \sqrt{m^2 + (2n+1)|e|\hbar B - \lambda e\hbar B} - \lambda\mu' B, \qquad n = 0, 1, 2, \dots, \quad \lambda = \pm 1. \tag{19}$$

Соотношения (16)–(19) демонстрируют эффективность релятивистского преобразования ФВ методом типа "шаг за шагом" [3] (в данном случае оно является точным). В противоположность этому метод Эриксена и другие методы прямого преобразования ФВ позволяют представить уравнения для оператора Гамильтона и энергетического спектра только в виде разложения входящих в них квадратных корней по степеням оператора $|\boldsymbol{\pi}|/m$.

Теперь для тех же условий найдем энергетический спектр частиц со спином 1, магнитный момент которых имеет не только нормальную часть $\mu_0 = e\hbar/m$, соответствующую $g = 2$, но и аномальную $\mu' = e\hbar(g-2)/2m$. Исходный оператор Гамильтона в представлении Саката–Такетани [36], выведенный в работе [37] (см. также [38]), в рассматриваемом случае удобнее всего представить следующим образом [39]:

$$
\begin{gathered}
\mathcal{H}=\rho_3\mathcal{M}+\mathcal{E}+\mathcal{O},\\
\rho_3\mathcal{E}=\mathcal{E}\rho_3,\qquad \rho_3\mathcal{O}=-\mathcal{O}\rho_3,\\
\mathcal{M}=m+\frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m}-\frac{e\hbar}{m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B},\qquad \mathcal{E}=-\rho_3\frac{e\hbar(g-2)}{2m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B},\\
\mathcal{O}=i\rho_2\left[\frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m}-\frac{(\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{S})^2}{m}+\frac{e\hbar(g-2)}{2m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}\right].
\end{gathered}
\tag{20}
$$

Здесь оператор Гамильтона действует на шестикомпонентные волновые функции $\Psi=\begin{pmatrix}\phi\\ \psi\end{pmatrix}$, являющиеся аналогами биспиноров, ϕ, χ – трехкомпонентные аналоги спиноров, $\boldsymbol{S}$ – спиновая матрица размера 3×3 для частиц со спином 1, ρ_i – матрицы Паули, а $\rho_i\boldsymbol{S}$ означает прямое произведение матриц, например $\rho_1\boldsymbol{S}\equiv\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{S}\\ \boldsymbol{S} & 0\end{pmatrix}$. В рассматриваемом случае $[\mathcal{M},\mathcal{E}]=[\mathcal{M},\mathcal{O}]=0$, и можно использовать формулы (9), (11) с заменой m на $\mathcal{M}$. В этих формулах матрица Дирака β соответствует прямому произведению ρ_3 и единичной матрицы размера 3×3.

Для частиц, не имеющих АММ, преобразование ФВ является точным, полученный гамильтониан определяется выражением [38]

$$
\mathcal{H}_{\mathrm{FW}}=\rho_3\sqrt{m^2+\boldsymbol{\pi}^2-2e\hbar\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}},
$$

а энергетический спектр имеет вид

$$
E=\sqrt{m^2+(2n+1)|e|\hbar B-2\lambda e\hbar B},\qquad n=0,1,2,\dots,\quad \lambda=-1,0,1.
$$

Для частиц с АММ соответствующий гамильтониан выведен в работах [38], [40] с точностью до линейных по полю слагаемых. Для нахождения спектра при $\mathcal{P}_z=0$ его удобно записать в следующем виде:

$$
\mathcal{H}_{\mathrm{FW}}=\rho_3\sqrt{m^2+\boldsymbol{\pi}^2-2e\hbar\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}}-\rho_3\frac{e\hbar(g-2)}{2m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}.
$$

С указанной точностью энергетический спектр определяется формулой

$$
E=\sqrt{m^2+(2n+1)|e|\hbar B-2\lambda e\hbar B}-\frac{\lambda e\hbar(g-2)}{2m}B,\qquad n=0,1,2,\dots,\quad \lambda=-1,0,1.
$$

В рассматриваемом случае релятивистское преобразование ФВ, хотя и является приближенным, может быть проведено с высокой точностью. Операторы, входящие в формулы (20), удовлетворяют соотношениям

$$
\begin{gathered}
[\mathcal{O}^2,\mathcal{E}]=0,\qquad [\mathcal{O},\mathcal{E}]=\rho_1\frac{e^2\hbar^2(g-1)(g-2)}{2m^2}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B})^2,\\
\{\mathcal{O},[[\mathcal{O},\mathcal{E}],\mathcal{E}]\}=-\frac{e^4\hbar^4(g-1)^2(g-2)^2}{2m^4}B^2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B})^2,\\
([\mathcal{O},\mathcal{E}])^2=\frac{e^4\hbar^4(g-1)^2(g-2)^2}{4m^4}B^2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B})^2.
\end{gathered}
$$

В формулах (20) среди слагаемых, номинально имеющих порядок величины $(\hbar/S_0)^2$, только два, пропорциональных $\{\mathcal{O},[[\mathcal{O},\mathcal{E}],\mathcal{E}]\}$ и $([\mathcal{O},\mathcal{E}])^2$, отличны от нуля и в действительности имеют четвертую степень по $\hbar$ и B. Поскольку в рассматриваемом случае $S_0=\epsilon^2/|e|B\sim m^2/|e|B$, релятивистское преобразование ФВ позволяет определить оператор Гамильтона для частиц со спином 1 с точностью до членов порядка $(|e|\hbar B)^3/m^5$ включительно. При учете таких слагаемых оператор Гамильтона принимает вид

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathrm{FW}}&=\rho_3\epsilon-\rho_3\frac{e\hbar(g-2)}{2m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}+\rho_3\frac{e^2\hbar^2(g-1)(g-2)}{16m^3}\times\\&\quad\times\left\{\frac{1}{\epsilon(\epsilon+m)},\bigl(B^2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\pi})^2-[\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{B})]^2-e\hbar(g-1)B^2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B})\bigr)\right\},\\\epsilon&=\sqrt{m^2+\boldsymbol{\pi}^2-2e\hbar\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}-\frac{e^2\hbar^2g(g-2)}{4m^2}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B})^2}.\end{aligned}$$

Отметим, что указанные во введении эффекты, обусловленные тензорными электрической и магнитной поляризуемостями, определяются зависящими от спина слагаемыми второй степени по $\hbar$ и B. Для таких слагаемых выполняется равенство

$$B^2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\pi})^2+[\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{B})]^2+\boldsymbol{\pi}^2(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B})^2=2(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{B})^2.$$

Член в правой части равенства характеризует скалярную электрическую поляризуемость движущейся частицы.

Определение оператора Гамильтона и энергетического спектра релятивистских частиц со спином 1, имеющих АММ, в однородном магнитном поле также демонстрирует возможности, которые предоставляют релятивистские итерационные методы преобразования ФВ. Ни в представлении Саката–Такетани, ни путем использования других трансформационных методов (см. работы [32], [41]) эта задача не была решена. Более того, в течение многих лет дискутировалась проблема непротиворечивости (consistency) квантовой механики частиц со спином 1 (см. работы [32], [42], [43] и цитированную в них литературу).

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Таким образом, сравнение результатов, получающихся с помощью метода Эриксена и методов типа “шаг за шагом”, приводит к весьма важному и довольно неожиданному выводу. Релятивистские методы преобразования ФВ типа “шаг за шагом” уже после *первого* шага преобразования (тем более в результате последующих шагов) дают выражение для оператора Гамильтона, не согласующееся с точным результатом, который определяется рядом релятивистских поправок, вычисленных методом Эриксена.

Отсутствие согласия между методом Эриксена, позволяющим произвести прямое преобразование ФВ, и методами типа “шаг за шагом” имеет место для слагаемых второго и более высоких порядков по $\hbar/S_0$, если они появляются не в результате вычисления оператора $\beta\epsilon$ или первого из антикоммутаторов в равенстве (9). Только для слагаемых, возникающих в результате вычисления указанных операторов, в том числе для всех членов нулевого и первого порядков по $\hbar/S_0$, точный метод Эриксена и релятивистские методы типа “шаг за шагом” из работ [3], [17]–[22] приводят к полностью согласующимся результатам.

Метод Эриксена позволяет представить трансформированный гамильтониан в виде разложения по степеням операторов $\mathcal{E}/m$, $\mathcal{O}/m$. Поэтому его удобно использовать для решения нерелятивистских задач (например, в атомной физике), когда необходимо учитывать релятивистские поправки. Для релятивистских методов типа "шаг за шагом" операторы $\mathcal{E}$ и $\mathcal{O}$ не считаются малыми, и разложение базируется на предположении, что коммутатор указанных операторов по порядку величины мал по сравнению к их произведением. Справедливость такого предположения зависит от рассматриваемой проблемы. Оно весьма часто не выполняется в атомной физике, но всегда выполняется при квантово-механическом описании пучков частиц в ускорителях, накопительных кольцах и ловушках Пеннинга. С другой стороны, метод Эриксена не только не позволяет вывести компактные релятивистские выражения для оператора Гамильтона в представлении ФВ, но и вообще дает расходящийся ряд релятивистских поправок при $\boldsymbol{p}^2/m^2 \geqslant 1$. Поэтому в настоящее время итерационным методам нет альтернативы при описании релятивистских частиц.

В частности, итерационные методы дают адекватное прецизионное описание спиновых эффектов для релятивистских частиц, включая влияние спина на траекторию движения (определяемое силами Штерна–Герлаха и Матиссона для электромагнитного и гравитационного взаимодействий соответственно [3], [18], [44], [45]). Данные эффекты определяются слагаемыми порядка $\hbar/S_0$. Существуют косвенные аргументы для того, чтобы распространить сделанный вывод на частицы со спином $s \neq 1/2$. Линейные по спину и постоянной Планка слагаемые в операторе Гамильтона в представлении ФВ, выведенные в статье [40] (см. также [38]) методом типа "шаг за шагом" для релятивистских частиц со спином 1, приводят к операторному уравнению движения спина, соответствующему уравнению Томаса–Баргманна–Мишеля–Телегди и, следовательно, корректно описывающему спиновые эффекты. Эффективность использования итерационных методов продемонстрирована в разделе 5 на примере релятивистских частиц со спинами 0, 1/2 и 1 в однородном магнитном поле. С помощью полученных в настоящей работе результатов определена точность, которую обеспечивают методы типа "шаг за шагом" для данного случая.

В общем случае проблема корректности определения вкладов в гамильтониан, которые обусловлены квадрупольным взаимодействием и тензорными электрической и магнитной поляризуемостями частиц со спином $s > 1/2$ и имеют порядок величины $(\hbar/S_0)^2$, с помощью методов типа "шаг за шагом" требует отдельного рассмотрения. Необходимость дополнительного анализа обусловлена тем обстоятельством, что исходное уравнение Прока–Корбена–Швингера и подобные уравнения для частиц с высшими спинами характеризуют бесструктурные точечные частицы.

Сравнение трех методов типа "шаг за шагом" [3], [17]–[22], имеющих наиболее фундаментальное обоснование, демонстрирует принципиальную общность используемых в них подходов. На каждом шаге выбирается оператор преобразования, который производил бы точное преобразование при условии коммутации четных и нечетных операторов. Указанная общность приводит и к совпадению результатов, которые получаются тремя методами. Однако существенное различие формализмов квантовой механики, применяющихся в данных методах, приводит к различию в объеме вычислений, необходимых для получения конечных результатов. Наиболее простой способ вывода оператора Гамильтона – это использование традиционного операторного формализма и унитарных преобразований [3], [18] с расчетом по формуле (15) и оценкой точности расчета путем вычисления (или определения порядка величины) отбрасываемых слагаемых по формуле (12). Пример такого подхода приведен в разделе 5, и этот пример также демонстрирует возможность применения метода для частиц со спином, отличным от $1/2$.

Оценка точности позволяет увидеть отличие итерационных методов от формального разложения гамильтониана Эриксена и показывает границы их применимости. Отметим, что расчет по формуле (15) требует гораздо меньших вычислений, чем использование двух других анализируемых итерационных методов. Тем не менее метод, развитый и примененный в работах [19]–[22], [30], наилучшим образом подходит при исследовании эффектов, обусловленных фазами Берри. Отметим также успешное использование подобного ему метода в работе [29] также при анализе фаз Берри.

Благодарности. Автор выражает глубокую признательность профессору К. А. Свешникову за сделанные замечания. Настоящая работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф12Д-002).

Список литературы

[1] L. L. Foldy, S. A. Wouthuysen, *Phys. Rev.* (2), **78**:1 (1950), 29–36.
[2] T. D. Newton, E. P. Wigner, *Rev. Modern Phys.*, **21**:3 (1949), 400–406.
[3] A. J. Silenko, *J. Math. Phys.*, **44**:7 (2003), 2952–2966.
[4] J. P. Costella, B. H. J. McKellar, *Amer. J. Phys.*, **63**:12 (1995), 1119–1121.
[5] А. Я. Силенко, *Письма в ЭЧАЯ*, **10** (2013), 144–148.
[6] V. G. Baryshevsky, *J. Phys. G*, **35**:3 (2008), 035102, 23 pp.
[7] A. J. Silenko, *Phys. Rev. C*, **80**:4 (2009), 044315, 5 pp.
[8] V. G. Baryshevsky, A. J. Silenko, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **295**:1 (2011), 012034, 5 pp., arXiv: 1011.2352.
[9] V. P. Neznamov, A. J. Silenko, *J. Math. Phys.*, **50**:12 (2009), 122302, 15 pp., arXiv: 0906.2069.
[10] E. Eriksen, M. Korlsrud, *Nuovo Cimento Suppl.*, **18** (1960), 1–39.
[11] E. Eriksen, *Phys. Rev.* (2), **111**:3 (1958), 1011–1016.
[12] F. Hausdorff, *Ber. über die Verhandlungen der Königl. Sächs. Ges. der Wiss. zu Leipzig. Math.-phys. Klasse*, **58** (1906), 106–169.
[13] S. Stephani, *Ann. Phys. (Berlin)*, **470**:1–2 (1965), 12–16.
[14] В. П. Незнамов, *ВАНТ. Сер. теор. прикл. физ.*, **2** (1988), 21–27.
[15] В. П. Незнамов, *ЭЧАЯ*, **37**:1 (2006), 151–182, arXiv: hep-th/0411050.
[16] E. de Vries, J. E. Jonker, *Nucl. Phys. B*, **6**:3 (1968), 213–225.
[17] E. I. Blount, *Phys. Rev.* (2), **128**:5 (1962), 2454–2458.
[18] A. J. Silenko, *Phys. Rev. A*, **77**:1 (2008), 012116, 7 pp., arXiv: 0710.4218.
[19] P. Gosselin, A. Bérard, H. Mohrbach, *Europ. Phys. J. B*, **58**:2 (2007), 137–148.
[20] P. Gosselin, A. Berard, H. Mohrbach, *Phys. Lett. A*, **368**:5 (2007), 356–361, arXiv: hep-th/0604012.
[21] P. Gosselin, J. Hanssen, H. Mohrbach, *Phys. Rev. D*, **77**:8 (2008), 085008, 11 pp., arXiv: cond-mat/0611628.
[22] P. Gosselin, H. Mohrbach, *Europ. Phys. J. C*, **64**:3 (2009), 495–527, arXiv: 0801.0940.
[23] E. de Vries, *Fortsch. Phys.*, **18**:4 (1970), 149–182.
[24] А. Я. Силенко, *ТМФ*, **112**:1 (1997), 161–169.

[25] T. A. Osborn, F. H. Molzahn, *Ann. Phys.*, **241**:1 (1995), 79–127, arXiv: hep-th/9409120.

[26] А. Я. Силенко, *ТМФ*, **105**:1 (1995), 46–54.

[27] В. Б. Берестецкий, Л. Д. Ландау, *ЖЭТФ*, **19** (1949), 673–679.

[28] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, М., 1969.

[29] K. Y. Bliokh, *Europhys. Lett.*, **72**:1 (2005), 7–13; *Phys. Lett. A*, **351**:3 (2006), 123–124, arXiv: cond-mat/0507499.

[30] P. Gosselin, A. Berard, H. Mohrbach, S. Ghosh, *Europ. Phys. J. C*, **59**:4 (2009), 883–889.

[31] K. M. Case, *Phys. Rev.*, **95**:5 (1954), 1323–1328.

[32] W. Tsai, *Phys. Rev. D*, **7**:6 (1973), 1945–1948.

[33] А. Я. Силенко, *ЖЭТФ*, **114** (1998), 448–457.

[34] И. М. Тернов, В. Г. Багров, В. Ч. Жуковский, *Вестн. Моск. ун-та. Сер.* 3. *Физ., астр.*, **7**:1 (1966), 30–36.

[35] A. J. Silenko, *Письма в ЭЧАЯ*, **5**:6 (2008), 842–850.

[36] M. Taketani, S. Sakata, *Proc. Phys. Math. Soc. Japan*, **22** (1940), 757–770.

[37] J. A. Young, S. A. Bludman, *Phys. Rev.*, **131**:5 (1963), 2326–2334.

[38] A. J. Silenko, *Europ. Phys. J. C*, **57**:3 (2008), 595–599, arXiv: 0803.3577.

[39] A. J. Silenko, *Analysis of wave equations for spin-*1 *particles interacting with an electromagnetic field*, arXiv: hep-th/0404074.

[40] А. Я. Силенко, *ЖЭТФ*, **123**:5 (2003), 883–890.

[41] W. Tsai, A. Yildiz, *Phys. Rev. D*, **4**:12 (1971), 3643–3648; T. Goldman, W. Tsai, *Phys. Rev. D*, **4**:12 (1971), 3648–3651; W. Tsai, *Phys. Rev. D*, **4**:12 (1971), 3652–3657.

[42] T. Goldman, W. Tsai, A. Yildiz, *Phys. Rev. D*, **5**:8 (1972), 1926–1930.

[43] B. Vijayalakshmi, M. Seetharaman, P. M. Mathews, *J. Phys. A*, **12**:5 (1979), 665–677.

[44] Y. N. Obukhov, A. J. Silenko, O. V. Teryaev, *Phys. Rev. D*, **80**:6 (2009), 064044, 10 pp.

[45] Y. N. Obukhov, A. J. Silenko, O. V. Teryaev, *Phys. Rev. D*, **84**:2 (2011), 024025, 10 pp., arXiv: 1106.0173.

Поступила в редакцию 9.01.2013,
после доработки 17.03.2013