#### Teoría Cuántica de la Radiación

#### Pablo D. Fainstein

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro

9 de octubre de 2007

- Gerente de Física (GAIyANN-CNEA)
- Profesor Adjunto Instituto Balseiro
- Responsable Maestría en Física Médica (IB)
- Investigador Independiente (CONICET)



#### Teoría Cuántica de la Radiación

#### Programa

- Electrodinámica Clasica
  - Ecuaciones de Maxwell
  - Variables Normales
- Formulación Lagrangiana
  - Formalismo Lagrangiano y Hamiltoniano
  - Cuantificación en el Gauge de Coulomb
- Electrodinámica en presencia de campos externos
- Interacción de un átomo con el campo electromagnético
  - Teoria de perturbaciones dependientes del tiempo
  - Procesos radiativos a primer orden
  - Vida media de un estado excitado y ancho de línea
- Dispersión de la luz por átomos
- Átomos en un campo laser intenso

#### Teoría Cuántica de la Radiación

#### Bibliografía

- B. H. Bransden y C. J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules
- C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc y G. Grynberg, Introduction a l'Électrodynamique Quantique
- C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc y G. Grynberg, Processus d'Interaction entre Photons et Atoms
- H. Friedrich, Theoretical Atomic Physics
- W. Heitler, The Quantum Theory of Radiation
- M. H. Mittleman, Theory of Laser-Atom Interactions
- J. J. Sakurai, Advanced Quantum Mechanics

Las ecuaciones que describen la evolución acoplada de un conjunto de partículas cargadas y el campo electromagnético son:

#### Ecuaciones de Maxwell

$$\begin{split} & \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{\varepsilon_0} \, \rho(\mathbf{r},t) \\ & \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= 0 \\ & \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t} \\ & \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{c^2} \, \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \, \mathbf{j}(\mathbf{r},t) \end{split}$$

#### Ecuaciones de Newton-Lorentz

$$m_{\alpha} \frac{d^{2} \mathbf{r}_{\alpha}(t)}{dt^{2}} = q_{\alpha} \left[ \mathbf{E}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \mathbf{v}_{\alpha}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right] \qquad (v_{\alpha} \ll c)$$

donde  $\mathbf{r}_{\alpha}$  es el vector posición de la partícula  $\alpha$ , de carga  $q_{\alpha}$  y velocidad  $\mathbf{v}_{\alpha}$ .



De las ecuaciones de Maxwell podemos deducir que:

### Conservación de la Carga

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0$$

#### Ecuación para las Fuentes

$$\begin{array}{lcl} \rho(\mathbf{r},t) & = & \displaystyle\sum_{\alpha} \, q_{\alpha} \, \, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \\ \\ \mathbf{j}(\mathbf{r},t) & = & \displaystyle\sum_{\alpha} \, q_{\alpha} \, \, \mathbf{v}_{\alpha}(t) \, \, \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \end{array}$$

A un instante  $t_0$  dado, el estado del sistema está determinado por  $\{\mathbf{E}(\mathbf{r},t_0),\mathbf{B}(\mathbf{r},t_0),\mathbf{r}_{\alpha}(t_0),\mathbf{v}_{\alpha}(t_0)\}$ . Los campos  $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$  y  $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$  no son variables independientes ya que estan acoplados por las ecuaciones de Maxwell. El objetivo de este repaso del Electromagnetismo Clásico es entonces encontrar las coordenadas generalizadas que describen el estado del campo electromagnético.

#### Constantes de Movimiento

A partir de las ecuaciones de Maxwell y de las expresiones para las fuentes podemos demostrar que las siguientes cantidades son constantes:

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}^{2}(t) + \frac{\varepsilon_{0}}{2} \int d\mathbf{r} \left[ \mathbf{E}^{2}(\mathbf{r}, t) + c^{2} \mathbf{B}^{2}(\mathbf{r}, t) \right]$$

Energía

$$\mathbf{P} = \sum m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}(t) + \varepsilon_0 \int d\mathbf{r} \ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$$

Impulso

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}(t) \times m_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}(t) + \varepsilon_{0} \int d\mathbf{r} \ \mathbf{r} \times \left[ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right]$$

Momento Angular

#### **Potenciales**

A partir de las ecuaciones de Maxwell definimos:

$$\begin{split} \mathbf{B}(\mathbf{r},t) &= \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}(\mathbf{r},t) & \mathbf{A}(\mathbf{r},t) & \text{Potencial Vector} \\ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) &= -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla} U(\mathbf{r},t) & U(\mathbf{r},t) & \text{Potencial Escalar} \end{split}$$

$$\begin{array}{rcl} \nabla^2 U(\mathbf{r},t) & = & -\frac{1}{\varepsilon_0} \; \rho(\mathbf{r},t) - \boldsymbol{\nabla} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r},t)}{\partial t} \\ \\ \left( \frac{1}{c^2} \; \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A}(\mathbf{r},t) & = & \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \; \mathbf{j}(\mathbf{r},t) - \boldsymbol{\nabla} \left( \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c^2} \; \frac{\partial U(\mathbf{r},t)}{\partial t} \right) \end{array}$$

A un instante  $t_0$  dado, el estado del sistema está determinado por  $\{\mathbf{A}(\mathbf{r},t_0), \partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r},t_0), \mathbf{r}_{\alpha}(t_0), \mathbf{v}_{\alpha}(t_0)\}.$ 

### Invariancia de Gauge

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r},t) & \longrightarrow & \mathbf{A}'(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \boldsymbol{\nabla} F(\mathbf{r},t) \\ U(\mathbf{r},t) & \longrightarrow & U'(\mathbf{r},t) = U(\mathbf{r},t) - \frac{\partial F(\mathbf{r},t)}{\partial t} \end{aligned}$$

donde  $F(\mathbf{r},t)$  es una función arbitraria. Diferentes potenciales pueden describir el mismo campo electromagnético.

Gauge de Lorentz 
$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial U(\mathbf{r},t)}{\partial t} = 0 \longrightarrow \begin{cases} \Box U(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{r},t) \\ \Box \mathbf{A}(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \mathbf{j}(\mathbf{r},t) \end{cases}$$

Estas expresiones son explicitamentes covariantes.

Gauge de Coulomb 
$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r},t) = 0 \longrightarrow \left\{ \begin{array}{ll} \nabla^2 U(\mathbf{r},t) & = -\frac{1}{\varepsilon_0} \ \rho(\mathbf{r},t) \\ \Box \mathbf{A}(\mathbf{r},t) & = \frac{1}{\varepsilon_0 c^2} \ \mathbf{j}(\mathbf{r},t) - \frac{1}{c^2} \ \nabla \frac{\partial U(\mathbf{r},t)}{\partial t} \end{array} \right.$$

#### Transformada de Fourier

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \ \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{k} \ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \ \boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t)$$

Notemos que mientras  $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \in \mathbb{R}$ ,  $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) \in \mathbb{C}$ . Resulta entonces que  $\boldsymbol{\mathcal{E}}^*(\mathbf{k},t) = \boldsymbol{\mathcal{E}}(-\mathbf{k},t)$ .

#### Propiedades:

$$\int d\mathbf{r} \ F^*(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} \ \mathcal{F}^*(\mathbf{k}) \mathcal{G}(\mathbf{k}) \qquad \qquad \text{Teorema de Parseval}$$
 
$$\mathcal{F}(\mathbf{k}) \mathcal{G}(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \int d\mathbf{r}' \ F(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \qquad \qquad \text{Producto de Convolución}$$

Aplicaciones:

$$oldsymbol{
abla} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \quad 
ightarrow \quad i\mathbf{k} \cdot oldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) \\ oldsymbol{
abla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \quad 
ightarrow \quad i\mathbf{k} \times oldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t)$$

#### Ecuaciones de Maxwell

$$\begin{split} i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) &= \frac{1}{\varepsilon_0}\,\rho(\mathbf{k},t) \\ i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) &= 0 \\ i\mathbf{k}\times\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) &= -\partial_t\boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) \\ i\mathbf{k}\times\boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) &= \frac{1}{c^2}\,\partial_t\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) + \frac{1}{\varepsilon_0c^2}\,\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{k},t) \end{split}$$

#### Conservación de la Carga

$$\partial_t \rho(\mathbf{k}, t) + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{k}, t) = 0$$

#### **Potenciales**

$$\begin{split} \mathcal{B}(\mathbf{k},t) &= i\mathbf{k} \times \mathcal{A}(\mathbf{k},t) \\ \mathcal{E}(\mathbf{k},t) &= -\partial_t \mathcal{A}(\mathbf{k},t) - i\mathbf{k} \, \mathcal{U}(\mathbf{k},t) \end{split}$$

### Campos Vectoriales Longitudinales y Transversales

 ${\sf Campo \ vectorial \ longitudinal:} \qquad {\bf \nabla}\times{\bf V}_{\parallel}({\bf r},t)=0 \ \forall {\bf r} \qquad \Longrightarrow \quad i{\bf k}\times{\bf V}_{\parallel}({\bf k},t)=0 \ \forall {\bf k}$ 

Campo vectorial transversal:  $\nabla \cdot \mathbf{V}_{\perp}(\mathbf{r},t) = 0 \ \forall \mathbf{r} \implies i\mathbf{k} \cdot \mathbf{V}_{\perp}(\mathbf{k},t) = 0 \ \forall \mathbf{k}$ 

En el espacio recíproco la definición de campos longitudinales y transversales no tiene ninguna ambigüedad, ya que significa claramente que el campo correspondiente esta en la dirección de o perpendicular al vector  $\mathbf k$ . Dichas componentes del campo vectorial son ortogonales. Entonces:

$$\mathbf{V}(\mathbf{k},t) = \mathbf{V}_{\parallel}(\mathbf{k},t) + \mathbf{V}_{\perp}(\mathbf{k},t)$$

Esta separación del campo en una parte longitudinal y otra transveral no es invariante relativista.

### Campos Longitudinales

$$\begin{split} i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}(\mathbf{k},t) &= \frac{1}{\varepsilon_0}\;\rho(\mathbf{k},t) &\implies \quad \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\parallel}(\mathbf{k},t) = -\frac{i}{\varepsilon_0}\;\rho(\mathbf{k},t)\frac{\mathbf{k}}{k^2} \\ i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) &= 0 &\implies \quad \boldsymbol{\mathcal{B}}_{\parallel}(\mathbf{k},t) = 0 \end{split}$$

### Campos Longitudinales en el Espacio de Coordenadas

$$\mathbf{E}_{\parallel}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{\alpha} q_{\alpha} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}(t)|^3}$$

$$\mathbf{B}_{\parallel}(\mathbf{r},t) = 0$$

### Energía e Impulso de los Campos Longitudinales

$$\begin{array}{lcl} H_{\mathrm{long}} & = & V_{\mathrm{Coul}} = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\mathrm{Coul}}^{\alpha} + \frac{1}{8\pi\varepsilon_{0}} \sum_{\alpha\neq\beta} \frac{q_{\alpha}\,q_{\beta}}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} \\ \\ \varepsilon_{\mathrm{Coul}}^{\alpha} & = & \frac{q_{\alpha}^{2}}{2\varepsilon_{0}(2\pi)^{3}} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{k^{2}} \qquad (k \leq c) \qquad \text{Energía propia} \\ \\ \mathbf{P}_{\mathrm{long}} & = & \sum_{\alpha} q_{\alpha}\,\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) \end{array}$$

### Campos Transversales

$$\partial_t \mathbf{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = ic^2 \mathbf{k} \times \mathbf{\mathcal{B}}(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{\mathcal{J}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$$
$$\partial_t \mathbf{\mathcal{B}}(\mathbf{k}, t) = -i\mathbf{k} \times \mathbf{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$$

Para obtener los campos transversales tenemos que resolver un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas.

A un instante  $t_0$  dado, el estado del sistema está determinado por  $\{\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r},t_0),\mathbf{B}(\mathbf{r},t_0),\mathbf{r}_{\alpha}(t_0),\mathbf{v}_{\alpha}(t_0)\}$ 

#### **Potenciales**

La invariancia de Gauge nos permite fijar el valor de  ${f \nabla}\cdot{f A}({f r},t)$ , o sea el valor de  ${f A}_{\parallel}({f k},t)$ . Como:

$$k^2 U(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{k}, t) + ik \partial_t \mathcal{A}_{\parallel}(\mathbf{k}, t)$$

resulta entonces que el potencial escalar esta determinado por la componente longitudinal del potencial vector, que esta fijado por la condición de Gauge. Por el contrario la componente transversal del potencial vector determina el campo magnético.

Recordando la expresión de la invariancia de Gauge en el espacio recíproco:

$$\mathcal{A}(\mathbf{k},t) \longrightarrow \mathcal{A}'(\mathbf{k},t) = \mathcal{A}(\mathbf{k},t) + i\mathbf{k}F(\mathbf{k},t)$$

y teniendo en cuenta que el último término está en la dirección longitudinal, resulta entonces que:

$$\mathbf{A}'_{\perp}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r},t)$$

o sea que la componente transversal del potencial vector es invariante de Gauge.

A un instante  $t_0$  dado, el estado del sistema está determinado por  $\{\mathcal{E}_{\perp}(\mathbf{k},t_0), \mathcal{A}_{\perp}(\mathbf{k},t_0), \mathbf{r}_{\alpha}(t_0), \mathbf{v}_{\alpha}(t_0)\}$ 

#### Variables Normales

Usando que  ${\bf A} \times ({\bf B} \times {\bf C}) = {\bf B}({\bf A} \cdot {\bf C}) - {\bf C}({\bf A} \cdot {\bf B})$ , podemos escribir las ecuaciones de Maxwell de la forma:

$$\partial_t \mathbf{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t) = ic^2 \mathbf{k} \times \mathbf{\mathcal{B}}(\mathbf{k}, t)$$
  
$$\mathbf{k} \times \partial_t \mathbf{\mathcal{B}}(\mathbf{k}, t) = ik^2 \mathbf{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$$

donde suponemos por simplicidad que  $\mathcal{J}_{\perp}(\mathbf{k},t)=0$ . Sumando/restando obtenemos:

$$\partial_t \left( \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k},t) \mp \frac{c}{k} \; \mathbf{k} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) \right) = \mp i \omega \left( \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k},t) \mp \frac{c}{k} \; \mathbf{k} \times \boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) \right)$$

donde  $\omega=ck$ . Vemos entonces que las cantidades entre paréntesis desacoplan las ecuaciones para los campos transversos. Definimos entonces una nueva variable:

$$\alpha(\mathbf{k},t) = -\frac{i}{2\mathcal{N}(k)} \left( \mathbf{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k},t) - \frac{c}{k} \ \mathbf{k} \times \mathbf{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) \right) \quad \text{donde} \quad \mathcal{N}(k) = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\varepsilon_0}}$$

que denominamos variables normales del campo electromagnético.

A un instante  $t_0$  dado, el estado del sistema está determinado por  $\{\alpha(\mathbf{k},t_0),\mathbf{r}_{\alpha}(t_0),\mathbf{v}_{\alpha}(t_0)\}$ 



#### Variables Normales

Las variables normales son variables independientes del campo electromagnético. Podemos escribir los campos transversales como función de ellas:

$$\begin{split} \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\perp}(\mathbf{k},t) &= i\mathcal{N}(k)\left(\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k},t) - \boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k},t)\right) \\ \boldsymbol{\mathcal{B}}(\mathbf{k},t) &= \frac{i\mathcal{N}(k)}{ck}\left(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k},t) + \mathbf{k}\times\boldsymbol{\alpha}^*(-\mathbf{k},t)\right) \end{split}$$

La ecuación de evolución para el campo  $oldsymbol{lpha}(\mathbf{k},t)$ , equivalente a las ecuaciones de Maxwell, resulta:

$$\partial_t \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) + i\omega \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) = \frac{i}{2\varepsilon_0 \mathcal{N}(k)} \boldsymbol{\mathcal{J}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)$$

que podemos identificar con la ecuación de un oscilador armónico forzado. Esta ecuación esta todavia acoplada a la ecuación de Newton-Lorentz.

Si  $\mathcal{J}_{\perp}(\mathbf{k},t)=0$  (Campo Libre), resulta:

$$\alpha(\mathbf{k},t) = \alpha(\mathbf{k})e^{-i\omega t}$$

lo que representa una oscilación armónica de un modo normal de vibración del campo libre.

#### Vector Polarización

El campo  $\alpha({\bf k},t)$  es transversal. Introducimos entonces un par de vectores unitarios  $\varepsilon$  y  $\varepsilon'$  ortogonales y perpendiculares al versor  $\kappa={\bf k}/k$ . Esta terna de versores verifica las siguientes relaciones:

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\kappa} = 1$$
  
 $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varepsilon}' \cdot \boldsymbol{\kappa} = 0$ 

Podemos escribir entonces que:

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k},t) = \boldsymbol{\varepsilon} \, \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k},t) + \boldsymbol{\varepsilon}' \, \alpha_{\varepsilon'}(\mathbf{k},t) = \sum_{\varepsilon} \boldsymbol{\varepsilon} \, \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k},t) \qquad \text{donde} \qquad \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k},t) = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k},t)$$

El conjunto  $\{\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k},t)\}\ \ \, \forall (\mathbf{k},\varepsilon)$  forma un conjunto completo de variables independientes que describen el campo electromagnético.

### Campos Transversales en el Espacio de Coordenadas

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} i \mathcal{E}_{\omega} \left( \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k},t) \, \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k},t) \, \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} i \mathcal{B}_{\omega} \left( \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k},t) \, \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k},t) \, \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right)$$

En el caso del campo libre:

$$\begin{split} \mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r},t) &= \int \mathrm{d}\mathbf{k} \; \sum_{\varepsilon} i \mathcal{E}_{\omega} \left( \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}) \; \boldsymbol{\varepsilon} \; e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \right) \\ \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r},t) &= \int \mathrm{d}\mathbf{k} \; \sum_{\varepsilon} \mathcal{A}_{\omega} \left( \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}) \; \boldsymbol{\varepsilon} \; e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + c.c. \right) \quad \mathcal{A}_{\omega} = \mathcal{B}_{\omega}/k \end{split}$$

### Energía e Impulso de los Campos Transversales

$$H_{\text{trans}} = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} \frac{\hbar \omega}{2} \left( \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}, t) \right)$$

$$\mathbf{P}_{\text{trans}} = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} \frac{\hbar \mathbf{k}}{2} \left( \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}, t) \right)$$

#### Energía Total

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})]^{2} + V_{\text{Coul}} + \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} \frac{\hbar \omega}{2} \left( \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) + \alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}, t) \alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}, t) \right)$$

Vemos que la energía y todas las magnitudes físicas se expresan en función de  $\mathbf{r}_{\alpha}, \mathbf{p}_{\alpha}, \alpha_{\varepsilon}, \alpha_{\varepsilon}^{*}$ .

### Formulación Lagrangiana

Consideremos un sistema con N grados de libertad. Conociendo las coordenandas generalizadas  $x_1, x_2, \ldots, x_N$  y las velocidades correspondientes  $\dot{x}_1, \dot{x}_2, \ldots, \dot{x}_N$  a un dado tiempo  $t_0$ , podemos determinar la evolución posterior del sistema  $\forall t$ .

En el formalismo Lagrangiano postulamos que existe una función  $L(x_j,\dot{x}_j,t)$ , llamada Lagrangiano, tal que la integral:

$$\int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \ L(x_j, \dot{x}_j, t) \qquad j = 1, \dots, N$$

denominada Acción es un extremo cuando los  $x_j(t)$  corresponden a la evolución real del sistema entre  $t_1$  y  $t_2$ . Este postulado se denomina Principio de Mínima Acción. Para un sistema de partículas L=T-V. Minimizando la Acción obtenemos las ecuaciones de movimiento:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_j} = 0 \qquad j = 1, \dots, N$$

que se denominan ecuaciones de Lagrange.

#### Formulación Hamiltoniana

Definimos el momento conjugado a la coordenada generalizada  $x_j$ :

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_j}$$

Alternativamente podemos utilizar como variables dinámicas del sistema a las N coordenadas generalizadas y a los N momentos conjugados. Definimos entonces la función:

$$H(x_j, p_j, t) = \sum_j \dot{x}_j p_j - L$$

denominada Hamiltoniano. Las ecuaciones de movimiento en función de estas 2N variables dinámicas resultan:

$$\dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}$$
  $j = 1, ..., N$   
 $\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial x_j}$   $j = 1, ..., N$ 

que se denominan ecuaciones de Hamilton.

#### Coordenadas Generalizadas Complejas

Supongamos que definimos la siguiente coordenada generalizada  $X=(x_1+ix_2)/\sqrt{2}$ . Como el Lagrangiano es una función real resulta evidente que deberá depender de X y  $X^*$ . Las ecuaciones de evolución se obtienen de las ecuaciones de Lagrange para X y  $X^*$ . Si por simetría queremos que el momento conjugado P de X este dado por  $P=(p_1+ip_2)/\sqrt{2}$ , resulta entonces que el momento conjugado debe estar definido por la relación:

$$P = \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{X}}\right)^* = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}^*}$$

Es también fácil mostrar que el Hamiltoniano resulta:

$$H = \dot{X}P^* + \dot{X}^*P - L \implies H \in \mathbb{R}$$

#### Sistema con un Continuo de Grados de Libertad

Consideramos como coordenadas generalizadas a los campos  $A_j(\mathbf{r},t)$  con  $j=1,\ldots,N$ . Supongamos que el Lagrangiano se puede escribir de la forma:

$$L = \int d\mathbf{r} \, \mathcal{L}(A_j, \partial_t A_j, \partial_i A_j, t)$$
  $j = 1, \dots, N$   $i = x, y, z$ 

donde  $\mathcal L$  se denomina densidad de Lagrangiano y depende en general de los campos y sus derivadas respecto al tiempo y a las coordenadas. Si escribimos la Acción y aplicamos el Principio de Mínima Acción obtenemos las correspondientes ecuaciones de Lagrange:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j} \right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_j} - \sum_i \partial_i \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial_i A_j} \right) \qquad j = 1, \dots, N$$

#### Sistema con un Continuo de Grados de Libertad

Definimos los momentos conjugados  $\Pi_j$  de las coordenadas generalizadas  $A_j$  por la relación:

$$\Pi_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}_j}$$

y el Hamiltoniano resulta:

$$H = \int d\mathbf{r} \sum_{j} \Pi_{j} \dot{A}_{j} - L = \int d\mathbf{r} \, \mathcal{H}(A_{j}, \Pi_{j}, t)$$

donde  ${\mathcal H}$  se denomina densidad de Hamiltoniano. Las ecuaciones de Hamilton resultan:

$$\begin{array}{lcl} \dot{A}_{j} & = & \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Pi_{j}} \\ \\ \dot{\Pi}_{j} & = & -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial A_{j}} + \sum_{i} \partial_{i} \left( \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial_{i} A_{j}} \right) \end{array}$$

### Lagrangiano Estándard

Supongamos que tomamos como coordenadas generalizadas del campo electromagnético al potencial vector  ${\bf A}({\bf r},t)$  y al potencial escalar  $U({\bf r},t)$ . El Lagrangiano:

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^{2} + \frac{\varepsilon_{0}}{2} \int d\mathbf{r} \left( \mathbf{E}^{2}(\mathbf{r}) - c^{2} \mathbf{B}^{2}(\mathbf{r}) \right) + \sum_{\alpha} \left( q_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) - q_{\alpha} U(\mathbf{r}_{\alpha}) \right)$$

denominado *Lagrangiano Estándard*, permite obtener las ecuaciones de Maxwell y de Newton-Lorentz. Utilizando la definición de la densidad de carga y la corriente podemos escribir el Lagraniano en la forma:

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^{2} + \int d\mathbf{r} \, \mathcal{L}(\mathbf{r})$$

donde

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \mathbf{E}^2(\mathbf{r}) - c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{r}) \right) + \mathbf{j}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}) U(\mathbf{r})$$

es la densidad Langrangiana.



#### Lagrangiano Estándard

Utilizando la identidad de Parseval podemos escribir el Lagrangiano Estándard en función de los campos y potenciales en el espacio recíproco:

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^{2} + \frac{\varepsilon_{0}}{2} \int d\mathbf{k} \left( \boldsymbol{\mathcal{E}}^{2}(\mathbf{k}) - c^{2} \boldsymbol{\mathcal{B}}^{2}(\mathbf{k}) \right) + \int d\mathbf{k} \left( \boldsymbol{\mathcal{J}}^{*}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}(\mathbf{k}) - \rho^{*}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\mathcal{U}}(\mathbf{k}) \right)$$

- Como el Lagrangiano no depende de  $\mathcal{U}(\mathbf{k})$ , entonces  $\mathcal{U}(\mathbf{k})$  es una coordenada cíclica. Esto quiere decir que puede ser expresada en función de otras variables dinámicas mediante una relación algebraica.
- Se puede demostrar que el Lagrangiano no depende de  $\mathcal{A}_{\parallel}(\mathbf{k})$ , por lo cual este campo tampoco es una variable dinámica. Esto es consecuencia de la propiedad de invariancia de Gauge, la cual nos permite elegir  $\mathcal{A}_{\parallel}(\mathbf{k})$  arbitrariamente sin que cambie la dinámica del sistema.

### Cuantificación en el Gauge de Coulomb

Por simplicidad, y porque es el formalismo que se utiliza comunmente en Física Atómica, nos limitamos a considerar la Cuantificación del Campo Electromagnético en el Gauge de Coulomb. Usando que  ${f \nabla}\cdot{f A}=0$  obtenemos el Lagrangiano en el Gauge de Coulomb:

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^{2} - V_{\text{Coul}} + \int d\mathbf{r} \, \mathcal{L}_{C}(\mathbf{r})$$

con

$$\mathcal{L}_C(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_0}{2} \left( \dot{\mathbf{A}}^2 - c^2 (\mathbf{\nabla} \times \mathbf{A})^2 \right) + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}$$

Ya vimos que es más conveniente trabajar con los campos en el espacio recíproco. Transformando los campos obtenemos el Lagrangiano:

$$L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha}^2 - V_{\text{Coul}} + \int_{>} d\mathbf{k} \, \mathcal{L}_{C}(\mathbf{k})$$

con

$$\mathcal{L}_C(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \left( \dot{\mathcal{A}}_{\perp}^* \cdot \dot{\mathcal{A}}_{\perp} - c^2 k^2 \mathcal{A}_{\perp}^* \cdot \mathcal{A}_{\perp} \right) + \mathcal{J}_{\perp}^* \cdot \mathcal{A}_{\perp} + \mathcal{J}_{\perp} \cdot \mathcal{A}_{\perp}^*$$

donde usamos que  $\mathbf{A}_{\parallel}(\mathbf{k}) = 0$ .

### Cuantificación en el Gauge de Coulomb

Los momentos canónicos conjugados resultan:

$$\mathbf{p}_{\alpha} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})$$

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{0} \dot{\mathbf{A}}_{\perp}(\mathbf{k})$$

a partir de los cuales podemos escribir el Hamiltoniano en el Gauge de Coulomb:

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp} (\mathbf{r}_{\alpha})]^{2} + V_{\text{Coul}} + \varepsilon_{0} \int_{\mathbf{0}} d\mathbf{k} \left( \frac{1}{\varepsilon_{0}^{2}} \mathbf{\Pi}^{*} \cdot \mathbf{\Pi} + c^{2} k^{2} \mathbf{A}_{\perp}^{*} \cdot \mathbf{A}_{\perp} \right)$$

La cuantificación consiste en asociar operadores a las magnitudes físicas e imponer a estos operadores las relaciones de conmutación para coordenadas y momentos canónicos conjugados. Con las coordenadas generalizadas utilizadas y los momentos conjugados obtenidos resultan las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{split} & \left[ (\mathbf{r}_{\alpha})_{i}, (\mathbf{p}_{\beta})_{j} \right] &= i\hbar \, \delta_{ij} \, \delta_{\alpha\beta} \\ & \left[ \mathcal{A}_{\varepsilon}(\mathbf{k}), \Pi_{\varepsilon'}(\mathbf{k}') \right] &= 0 \\ & \left[ \mathcal{A}_{\varepsilon}(\mathbf{k}), \Pi_{\varepsilon'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \right] &= i\hbar \, \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \, \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{split}$$

### Operadores del Campo Electromagnético

Debemos ahora asociar operadores a los campos  $\mathcal{A}_{\varepsilon}(\mathbf{k})$  y  $\Pi_{\varepsilon}(\mathbf{k})$ . Resulta más conveniente trabajar con las variables normales, que podemos escribir en función de estos campos obteniendo:

$$\alpha_{\varepsilon}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{0}}{2\hbar\omega}} \left[ \omega \mathcal{A}_{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \frac{i}{\varepsilon_{0}} \Pi_{\varepsilon}(\mathbf{k}) \right] \qquad \Longrightarrow \quad a_{\varepsilon}(\mathbf{k})$$

$$\alpha_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{0}}{2\hbar\omega}} \left[ \omega \mathcal{A}_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}) - \frac{i}{\varepsilon_{0}} \Pi_{\varepsilon}^{*}(\mathbf{k}) \right] \qquad \Longrightarrow \quad a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k})$$

Usando las reglas de conmutación para las coordenadas y los momentos conjugados del campo electromagnético podemos demostrar que los operadores de campo  $a_\varepsilon$  y  $a_\varepsilon^\dagger$  verifican las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} \left[ a_{\varepsilon}(\mathbf{k}), a_{\varepsilon'}(\mathbf{k}') \right] &= 0 \\ \left[ a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}), a_{\varepsilon'}(\mathbf{k}') \right] &= 0 \\ \left[ a_{\varepsilon}(\mathbf{k}), a_{\varepsilon'}^{\dagger}(\mathbf{k}') \right] &= \delta_{\varepsilon\varepsilon'} \ \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned}$$

#### Operadores del Campo Electromagnético

Definimos el operador de número:

$$N_\varepsilon(\mathbf{k}) = a_\varepsilon^\dagger(\mathbf{k}) a_\varepsilon(\mathbf{k}) \quad \text{tal que} \quad N_\varepsilon(\mathbf{k}) | n_\varepsilon(\mathbf{k}) > = n | n_\varepsilon(\mathbf{k}) >, n = 0, 1, 2, \dots$$

Los autovectores de  $N_{\varepsilon}(\mathbf{k})$  corresponden a un estado con n fotones en el modo  $(\mathbf{k}, \varepsilon)$ . Como los operadores de número correspondientes a distintos modos conmutan entre si, podemos escribir:

$$|n_{\varepsilon_1}(\mathbf{k}_1) \; n_{\varepsilon_2}(\mathbf{k}_2) \cdots \rangle = |n_{\varepsilon_1}(\mathbf{k}_1) \rangle |n_{\varepsilon_2}(\mathbf{k}_2) \rangle \dots$$

El particular, el estado:

$$|0>=|0_{\varepsilon_1}(\mathbf{k}_1)>|0_{\varepsilon_2}(\mathbf{k}_2)>\dots$$

corresponde al estado del vacío. Finalmente, se puede demostrar que:

$$|n_{\varepsilon_1}(\mathbf{k}_1) n_{\varepsilon_2}(\mathbf{k}_2) \cdots \rangle = \prod_{\mathbf{k}_i, \varepsilon_i} \frac{\left(a_{\varepsilon_i}^{\dagger}(\mathbf{k}_i)\right)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle$$

Vemos entonces que  $a_{\varepsilon}^{\dagger}$  y  $a_{\varepsilon}$  son los operadores de creación y aniquilación de fotones en el modo  $(\mathbf{k}, \varepsilon)$ .

### Energía e Impulso

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[ \mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) \right]^{2} + V_{\text{Coul}} + \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} \hbar \omega \left( a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{\alpha} \mathbf{p}_{\alpha} + \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} \hbar \mathbf{k} a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\varepsilon}(\mathbf{k})$$

#### Expresión de los Campos

$$\mathbf{E}_{\perp}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} i \mathcal{E}_{\omega} \left( a_{\varepsilon}(\mathbf{k}) \, \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}) \, \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} i \mathcal{B}_{\omega} \left( a_{\varepsilon}(\mathbf{k}) \, (\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon}) \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}) \, (\boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{\varepsilon}) \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right)$$

$$\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} \sum_{\varepsilon} \mathcal{A}_{\omega} \left( a_{\varepsilon}(\mathbf{k}) \, \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}) \, \boldsymbol{\varepsilon} \, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right)$$

### Propiedades y Limitaciones

- Componentes Longitudinales y Transversales
- El Formalismo no es Covariante
- El Formalismo no es Relativista

#### Campos Externos

Supongamos que existe un sistema de cargas  $\rho_e(\mathbf{r},t)$  y corrientes  $\mathbf{j}_e(\mathbf{r},t)$ , independientes del movimiento de las partículas, que dan origen a los campos externos  $\mathbf{A}_e(\mathbf{r},t)$  y  $U_e(\mathbf{r},t)$ . Las partículas evolucionarán bajo la acción simultánea del campo propio y del campo externo. Podemos escribir entonces:

$$\mathbf{A}_{t}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}_{e}(\mathbf{r},t) + \mathbf{A}(\mathbf{r},t)$$

$$U_{t}(\mathbf{r},t) = U_{e}(\mathbf{r},t) + U(\mathbf{r},t)$$

Debido a la linealidad de las ecuaciones de Maxwell, los campos  $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$  y  $U(\mathbf{r},t)$  estan determinados unicamente por la densidad de carga y las corrientes asociadas a las partículas. Por el contrario, en la ecuación de Newton-Lorentz tenemos que considerar la acción del campo total sobre las partículas.

### Cuantificación en el Gauge de Coulomb

Tenemos que proponer un Lagrangiano del cual podamos deducir las ecuaciones de Maxwell y la de Newton-Lorentz. Luego calcular los momento conjugados de las variables dinámicas y por último escribir el Hamiltoniano que, en el Gauge de Coulomb, resulta:

$$\begin{split} H &=& \sum_{\alpha} \frac{1}{2 \; m_{\alpha}} \left[ \mathbf{p}_{\alpha} - q_{\alpha} (\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \mathbf{A}_{e}(\mathbf{r}_{\alpha}, t)) \right]^{2} + V_{\mathrm{Coul}} \\ &+& \sum_{\alpha} q_{\alpha} U_{e}(\mathbf{r}_{\alpha}, t) + \int \mathrm{d}\mathbf{k} \; \sum_{\varepsilon} \hbar \omega \left( a_{\varepsilon}^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\varepsilon}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right) \end{split}$$

La diferencia que aparece respecto del caso sin campo externo es que:

$$\mathbf{p}_{\alpha} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} (\mathbf{A}_{\perp} (\mathbf{r}_{\alpha}) + \mathbf{A}_{e} (\mathbf{r}_{\alpha}, t))$$

### Aproximación de Grandes Longitudes de Onda

Supongamos que la interacción entre las partículas esta bien representada por el potencial Coulombiano y que podemos despreciar el efecto del campo transverso. Esta aproximación es buena cuando las partículas estan próximas entre si, como en el caso de un átomo o una molécula. En esta aproximación el Hamiltoniano resulta entonces:

$$H_L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[ \mathbf{p}_{\alpha L} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t) \right]^2 + V_{\text{Coul}} + \sum_{\alpha} q_{\alpha} U_e(\mathbf{r}_{\alpha}, t)$$

donde  $\mathbf{p}_{\alpha L} = m_{\alpha} \dot{\mathbf{r}}_{\alpha} + q_{\alpha} \mathbf{A}_{e}(\mathbf{r}_{\alpha},t)$ . En la representación de coordenadas:  $\mathbf{p}_{\alpha L} = -i\hbar \boldsymbol{\nabla}_{\alpha}$ . Supongamos que el conjunto de cargas está localizado cerca del origen tal que  $\sum_{\alpha} q_{\alpha} = 0$  y que la extensión espacial es pequeña respecto a la longitud de onda de los campos externos. Podemos entonces desarrollar los potenciales externos en serie de Taylor alrededor del origen y retener los términos de más bajo orden. Obtenemos finalmente que:

$$H_L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[ \mathbf{p}_{\alpha L} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right]^2 + V_{\text{Coul}} + \mathbf{d} \cdot \nabla U_e(\mathbf{0}, t)$$

donde  $\mathbf{d} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}$  se denomina *momento dipolar eléctrico*.

### Transformación de Göppert-Mayer

Queremos simplificar la expresión del Hamiltoniano. Para ello hacemos una transformación de Gauge de manera que en la nueva representación el potencial vector es nulo. Recordando las transformaciones de Gauge:

$$\mathbf{A}_{e}(\mathbf{r},t) \longrightarrow \mathbf{A}'_{e}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}_{e}(\mathbf{r},t) + \nabla F(\mathbf{r},t)$$

$$U_{e}(\mathbf{r},t) \longrightarrow U'_{e}(\mathbf{r},t) = U_{e}(\mathbf{r},t) - \frac{\partial F(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

y eligiendo  $\mathbf{A}'_e(\mathbf{0},t)=0$ , tenemos que  $F(\mathbf{r},t)=-\mathbf{r}\cdot\mathbf{A}_e(\mathbf{0},t)$ . Por otra parte podemos demostrar que  $\mathbf{\nabla} U'_e(\mathbf{0},t)=-\mathbf{E}_e(\mathbf{0},t)$ . Obtenemos finalmente que:

$$H_{L'} = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha L'}^2 + V_{\text{Coul}} - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_e(\mathbf{0}, t)$$

La representación L se denomina Gauge de Velocidad, mientras que la representación L' se denomina Gauge de Longitud. En la mayoría de los casos de interés tenemos que  $U_e(\mathbf{r},t)=0$ . Resulta entonces:

$$H_L = \sum_{\alpha} \frac{1}{2 m_{\alpha}} \left[ \mathbf{p}_{\alpha L} - q_{\alpha} \mathbf{A}_e(\mathbf{0}, t) \right]^2 + V_{\text{Coul}}$$