

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

TRANSFERENCIA DE MOMENTO ANGULAR DE ELECTRONES RÁPIDOS A NANOPARTÍCULAS

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

JORGE LUIS BRISEÑO GÓMEZ

TUTOR:

DR. ALEJANDRO REYES CORONADO FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

DR. RUBÉN GERARDO BARRERA Y PÉREZ INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM DR. RAÚL PATRICIO ESQUIVEL SIRVENT INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, JULIO DE 2023

A Any.
A mi madre, a Tita y a Robin.

 $\ ^{*}But\ still\ try,\ for\ who\ knows\ what\ is\ possible?\ ^{*}$ Michael Faraday.

«De ilusiones así va uno viviendo.» Julio Cortázar.

Índice general

Agradecimientos		5
\mathbf{R}_{0}	sumen	7
\mathbf{A}	stract	g
1.	Introducción	11
2.	Teoría y métodos	15
	2.1. Conservación del momento angular en electrodinámica	15
	2.2. Transferencia de momento angular de un electrón rápido a una nanopartícula	22
	2.3. Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula	24
3.	Resultados y discusión	27
	3.1. Desarrollo de las densidades espectrales de la transferencia de momento angular	27
	3.2. Cálculo semi-analítico de las integrales necesarias para la transferencia de momento angutotal	
	3.3. Transferencia de momento angular total	
C	nclusiones y trabajo a futuro	33
	3.4. Conclusiones	33
	3.5. Trabajo a futuro	34
$\mathbf{A}_{]}$	éndice A Método de los potenciales escalares	35
		•

Apéndice B	
Transferencia de momento angular debida al campo externo	41
Referencias	43

Agradecimientos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie 6 AGRADECIMIENTOS

ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Resumen

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie 8 RESUMEN

ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Abstract

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie

10 Abstract

ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Etiam lobortis facilisis sem. Nullam nec mi et neque pharetra sollicitudin. Praesent imperdiet mi nec ante. Donec ullamcorper, felis non sodales commodo, lectus velit ultrices augue, a dignissim nibh lectus placerat pede. Vivamus nunc nunc, molestie ut, ultricies vel, semper in, velit. Ut porttitor. Praesent in sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Duis fringilla tristique neque. Sed interdum libero ut metus. Pellentesque placerat. Nam rutrum augue a leo. Morbi sed elit sit amet ante lobortis sollicitudin. Praesent blandit blandit mauris. Praesent lectus tellus, aliquet aliquam, luctus a, egestas a, turpis. Mauris lacinia lorem sit amet ipsum. Nunc quis urna dictum turpis accumsan semper.

Introducción

Desde mediados del siglo pasado, se han propuesto diversas técnicas para manipular objetos en la escala micro y nanométrica [1–7]. Las pinzas ópticas, basadas en las fuerzas electromagnéticas producidos por haces de luz enfocados, han sido ampliamente utilizadas para atrapar y mover microobjetos, incluyendo virus y bacterias, lo que ha tenido un gran impacto en el desarrollo tecnológico y médico [1–3].

En 2004, Javier García de Abajo publicó un trabajo sobre la posibilidad de manipular nanoobjetos mediante microscopios electrónicos de transmisión (TEMs por sus siglas en inglés) [8]. Desde entonces, se ha demostrado experimentalmente que los TEM pueden usarse para inducir movimiento y rotación en nanopartículas (NPs) [9, 10], lo que ha llevado al desarrollo de una técnica de manipulación llamada «pinzas electrónicas» [11–13].

En diversos estudios experimentales sobre pinzas electrónicas, se ha observado que la transferencia de momento angular y lineal del haz de electrones a la NP depende tanto de la velocidad del haz de electrones como del parámetro de impacto, que es la distancia efectiva entre la trayectoria del haz de electrones y el centro de la NP [9–11, 13–15]. Al modificar el parámetro de impacto, se puede inducir una interacción atractiva o repulsiva entre el haz de electrones y la NP, y también es posible modificar la dirección del giro inducido sobre la NP [11, 13, 14].

El microscopio electrónico de transmisión de barrido (STEM por sus siglas en inglés) forma imágenes mediante haces enfocados de electrones que barren el área de interés, utilizando los electrones esparcidos por la muestra [11]. En la Fig. 1.1 se muestra un par de NPs de oro, una grande y una pequeña, siendo escaneada por el haz de un STEM, dentro de la región con contorno blanco. Durante el barrido, el haz de electrones permanece detenido el 20 % del tiempo al inicio de cada una de las líneas a escanear, lo que produce una corriente neta de electrones que viajan fuera de la NP. Esta corriente se ilustra como una región sombreada en azul en la Fig. 1.1. Por lo tanto, aunque el haz de electrones barre toda la muestra que se observa en el STEM, hay un parámetro de impacto efectivo respecto a la superficie de la NP.

En la Fig. 1.2, se presentan algunos de los resultados reportados en la Ref. [11], que muestran seis imágenes de STEM de una NP de oro de 1.5 nm en presencia de otra de 5 nm, a diferentes tiempos. En todas las imágenes de la Fig. 1.2, el parámetro de impacto efectivo se encuentra a la izquierda de la NP (cerca del borde izquierdo de la imagen). Las tres imágenes superiores de la Fig. 1.2, tomadas con un parámetro de impacto efectivo de 4.5 nm, muestran una interacción atractiva entre el haz y la NP,

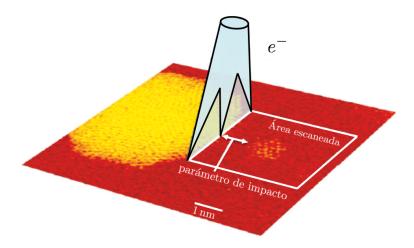


Figura 1.1: Esquema de la interacción dentro de un STEM, entre un haz de electrones con un par de nanopartículas de oro, reproducido y adaptado de la Ref [11].

ya que se puede observar que la NP se acerca al borde izquierdo de las imágenes, atravesando la línea punteada blanca colocada como ayuda visual. Por el contrario, en las imágenes inferiores de la Fig. 1.2, cuyo parámetro de impacto efectivo es de 1 nm, se observa que la NP se aleja del haz, atravesando la línea punteada blanca en dirección opuesta y acercándose al borde derecho de la imagen, lo que indica una interacción repulsiva. Utilizando las líneas guía que se han trazado en las facetas de la NP grande, que forman un polígono, se puede apreciar que en las tres imágenes superiores la NP gira en sentido horario, mientras que en las inferiores, al cambiar el parámetro de impacto, gira en sentido antihorario.

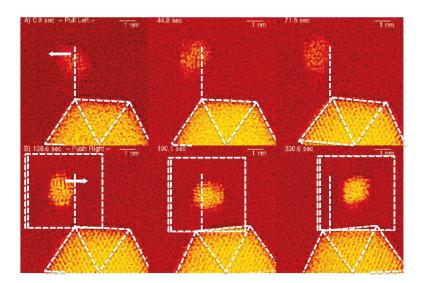


Figura 1.2: Resultados reproducidos y adaptados de la Ref. [11], donde se observa transferencia de momento angular y lineal de un haz de electrones STEM a nanopartículas de oro, suspendidas en un sustrato de carbono.

Para desarrollar la técnica de pinzas electrónicas, es necesario un entendimiento teórico del problema. Los haces electrónicos en un STEM pueden alcanzar 400 keV de energía cinética, con una corriente eléctrica del orden de pA, lo que equivale a un pulso de electrones rápidos viajando a velocidad constande alcanzando velocidades de hasta v = 0.83c (donde c es la velocidad de la luz). De lo anterior, se deduce que el tiempo de emisión de cada electrón es de 10^{-8} s. Como la vida media de las excitaciones dentro de

Introducción 13

un metal es de $\sim 10^{-14}$ [25], se puede asumir que la NP interactúa con un electrón a la vez [21, 26, 27]. Además, los haces de electrones en estudios de STEM se desvían a ángulos del orden de miliradianes [27–29], por lo que se puede considerar que se mueven en línea recta, siempre y cuando los electrones viajen fuera de la NP. Por lo anterior, se puede modelar la trayectoria del electrón rápido como $\vec{\mathbf{r}}(t) = (b, 0, vt)$, donde v es la velocidad del electrón y b es la distancia entre el centro de la NP y la trayectoria del electrón, denominada como parámetro de impacto, como se muestra en la Fig. 1.3. La respuesta electromagnética de la NP, se puede modelar mediante su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$.

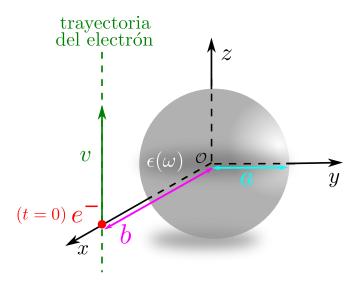


Figura 1.3: Nanopartícula de radio a, centrada en el origen de coordenadas, modelada mediante una función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ en vacío. La trayectoria del electrón (punto marrón), con parámetro de impacto b y viajando a velocidad constante v, se muestra como una línea punteada de color verde.

La interacción entre haces de electrones y NPs esféricas ha sido abordado desde la perspectiva de la electrodinámica clásica [8, 15–18]. Los trabajos citados anteriormente se han centrado en el cálculo de transferencia de momento lineal mediante la solución de las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. Para ello, se ha utilizado una expansión multipolar que permite separar la contribución eléctrica y magnética de la interacción, así como la contribución de cada orden multipolar. Sin embargo, es necesario tener precaución al elegir la función dieléctrica para modelar la respuesta de las NPs. Dado que experimentalmente se mide la función dieléctrica en un rango finito de frecuencias, es necesario extrapolarla e interpolarla para realizar la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell en todo el espacio de frecuencias. Si no se tiene cuidado suficiente, este proceso puede dar como resultado una función dieléctrica no causal, que no satisface las relaciones de Kramers-Kronig. A pesar de que los trabajos citados en las Refs. [8, 15–18] han logrado reproducir el comportamiento atractivo y repulsivo de la interacción, estudios recientes han mostrado que dichos trabajos obtuvieron resultados no físicos al modelar la respuesta electromagnética de la NP mediante funciones dieléctricas no causales [19, 20]. En estos trabajos, se muestra que si se elimina el comportamiento no causal de las funciones dieléctricas, no aparece la interacción repulsiva reportada experimentalmente. En la Ref. [20] se resuelve de forma semi-analítica las integrales en el espacio de frecuencia, que previamente se resolvían de forma numérica en las Refs. [8, 15–18]. Lo anterior permite conocer de manera exacta la contribución en el espacio de frecuencias de cada multipolo, eléctrico o magnético, a la transferencia de momento lineal, logrando así calcular la transferencia de momento lineal de electrones rápidos a NPs grandes (de hasta a = 50 nm de radio).

La técnica de pinzas electrónicas también requiere un estudio detallado de la transferencia de momento angular (TMA). En trabajos previos se ha discutido la dinámica angular de forma somera (ver por ejemplo la Ref. [21]), pero estudios recientes han permitido calcularla en NPs pequeñas de hasta a=5 nm de radio utilizando dos métodos distintos. El primer método modela la respuesta electromagnética de la NP como un dipolo puntual $\vec{\mathbf{p}}$, mediante el tensor de polarizabilidad, lo que es válido únicamente para NPs pequeñas [23]. El segundo método resuelve numéricamente las integrales de superficie del tensor de esfuerzos de Maxwell[22, 24] en el espacio de frecuencias. Sin embargo, el cálculo numérico limita el tamaño de las NPs que se pueden estudiar (menores a 5 nm), debido al tiempo de cómputo necesario, como se ha reportado en las Refs. [22–24]. Por lo tanto, los métodos mencionados solo permiten el cálculo de la TMA en nanopartículas pequeñas, de hasta a=5 nm de radio.

Se ha demostrado que existen términos en el tensor de esfuerzos de Maxwell que corresponden a los campos externos producidos por el electrón y que no contribuyen a la TMA total. Por lo tanto, se ha demostrado que la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell que contiene solo a los campos electromagnéticos del electrón debe anularse. Además, se ha demostrado que el término de interacción en el tensor de esfuerzos, que incluye tanto a los campos electromagnéticos del electrón como a los campos esparcidos por la nanopartícula, es el que más contribuye a la transferencia de momento, y que el término que incluye únicamente los campos esparcidos por la nanopartícula, aunque es pequeño, no se anula [20, 22].

En este trabajo se presenta un estudio teórico de la TMA de electrones rápidos a NPs, utilizando un enfoque de electrodinámica clásica. En el capítulo Capítulo 2 se desarrollan la teoría y métodos necesarios para discutir la deducción de los campo electromagnéticos producidos por un electrón relativista en movimiento rectilíneo uniforme, así como los campos electromagnéticos esparcidos por una NP centrada en el origen cuya respuesta electromagnética se modela mediante su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$. Además, se enuncia el teorema de conservación de momento angular en electrodinámica y, a partir de ello, se calcula en general la TMA del electrón rápido a la NP mediante una integral del tensor de esfuerzos de Maxwell en el espacio de frecuencias. En el Capítulo 3 se presentan los resultados de esta tesis de maestría, donde se calcula una solución semi-analítica de la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell en el espacio de frecuencias que permite calcular de forma eficiente la TMA. Finalmente, en la sección de Conclusiones, se resumen los resultados más relevantes y sus implicaciones, así como las posibles vías para futuras investigaciones que se derivan de los resultados publicados en esta tesis.

Teoría y métodos

En este capítulo se muestra el enfoque de la electrodinámica clásica empleado para describir la interacción de un electrón rápido y una nanopartícula (NP) esférica. En particular, se analiza la transferencia de momento angular (TMA) del electrón a la NP. Un trabajo de García de Abajo [27] justifica que, bajo las condiciones descritas en la Introducción, no es necesaria una descripción cuántica del fenómeno.

Se presentan las ecuaciones en el Sistema Internacional (SI), indicando en color **negro** la ecuación en SI, y en (magenta y entre paréntesis)¹ el factor necesario para expresar la ecuación en el sistema cgs. Por ejemplo, la fuerza entre dos cargas puntuales q_1 y q_2 separadas una distancia r se escribiría como

$$\vec{\mathbf{F}} = (4\pi\epsilon_0) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r}.$$
 (2.1)

2.1. Conservación del momento angular en electrodinámica

Las ecuaciones de Maxwell son [30]

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = (4\pi\epsilon_0) \frac{\rho_{\text{tot}}}{\epsilon_0}, \qquad \nabla \times \vec{\mathbf{E}} = -\left(\frac{1}{c}\right) \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t},$$

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0, \qquad \nabla \times \vec{\mathbf{B}} = \left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} + (c) \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t}, \qquad (2.2)$$

y pueden ser reescritas en términos de los potenciales ϕ y $\vec{\mathbf{A}}$ como [30]

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t}\right) \phi(\vec{\mathbf{r}}, t) = -\left(4\pi\epsilon_0\right) \frac{\rho_{\text{tot}}}{\epsilon_0} (\vec{\mathbf{r}}, t), \qquad (2.3)$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t}\right) \vec{\mathbf{A}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t\right) = -\left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t\right). \tag{2.4}$$

¹Se utiliza el sistema **Internacional** para expresar las ecuaciones en su forma estándar de libro de texto, sin embargo, las expresiones el sistema (cgs) resultan naturales al realizar una descripción numérica del problema, lo cual se propone como trabajo a futuro.

A lo largo de este trabajo se utilizará la norma de Lorentz, donde se satisface que $\nabla \cdot \vec{\mathbf{A}} + (1/c)\partial_t \phi = 0$. Los campos electromagnéticos, en términos de los potenciales, se escriben como

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},t) = -\nabla\phi(\vec{\mathbf{r}},t) - \left(\frac{1}{c}\right)\frac{\partial}{\partial t}\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}},t), \qquad (2.5)$$

$$\vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \nabla \times \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}},t). \tag{2.6}$$

Se parte de la expresión para la conservación del momento lineal en electrodinámica [30]

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\mathbf{p}}^{\text{mec}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) + \vec{\mathbf{p}}^{\text{em}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \right] = \nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right), \tag{2.7}$$

donde $\vec{\mathbf{p}}^{\text{mec}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la densidad volumétrica de momento lineal mecánico, $\vec{\mathbf{p}}^{\text{em}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la densidad volumétrica de momento lineal electromagnético

$$\vec{\mathbf{p}}^{\text{em}}\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) = \left(\frac{c}{4\pi}\right) \frac{1}{c^2} \vec{\mathbf{E}}\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) \times \vec{\mathbf{B}}\left(\vec{\mathbf{r}},t\right)$$
(2.8)

y $\stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ es el tensor de esfuerzos de Maxwell dado por [30]

$$T_{ij}\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) = \frac{\epsilon_0}{\left(4\pi\epsilon_0\right)} \left[E_i\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) E_j\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) - \frac{\delta_{ij}}{2} E^2\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) \right] + \frac{\mu_0}{\left(4\pi\mu_0\right)} \left[H_i\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) H_j\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) - \frac{\delta_{ij}}{2} H^2\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) \right], \quad (2.9)$$

donde $T_{ij}(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la entrada ij de $\dot{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{r}},t)$, ϵ_0 y μ_0 son la permitividad y permeabilidad del vacío respectivamente, $E_i(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la i-ésima componente del campo eléctrico $\dot{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},t)$, $H_i(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la i-ésima componente del campo $\dot{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ y δ_{ij} es la delta de Kronecker.

De la Ec. (2.7), se puede deducir la conservación de momento angular en electrodinámica de la siguiente manera

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{mec}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) + \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{em}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \right) = \vec{\mathbf{r}} \times \nabla \cdot \stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{T}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right), \tag{2.10}$$

donde $\vec{\boldsymbol{\ell}}^{\mathrm{mec}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}}^{\mathrm{mec}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ y $\vec{\boldsymbol{\ell}}^{\mathrm{em}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}}^{\mathrm{em}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ son las densidades volumétricas de momento angular mecánico y electromagnético respectivamente.

Si se define al tensor $\overrightarrow{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \vec{\mathbf{r}} \times \overrightarrow{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ —o usando notación de índices y convención de suma de Einstein $M_{jk}(\vec{\mathbf{r}},t) = \epsilon_j^{li} r_l T_{ik}(\vec{\mathbf{r}},t)$ —y se calcula la divergencia de $\overrightarrow{\mathbf{M}}$, se obtiene

$$\left(\nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{M}}\right)_{j} = \delta^{nk} \partial_{n} M_{jk} = \delta^{nk} \partial_{n} \epsilon_{j}^{li} r_{l} T_{ik} = \delta^{nk} \epsilon_{j}^{li} \partial_{n} r_{l} T_{ik},$$

$$= \delta^{nk} \epsilon_{j}^{li} \left(\delta_{nl} T_{ik} + r_{l} \partial_{n} T_{ik}\right) = \delta^{nk} \epsilon_{j}^{li} r_{l} \partial_{n} T_{ik},$$

$$= \delta^{nk} \epsilon_{j}^{li} r_{l} \partial_{n} T_{ik} = \epsilon_{j}^{li} r_{l} \partial^{k} T_{ik} = \epsilon_{j}^{li} r_{l} \left(\nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{T}}\right)_{i},$$

$$\left(\nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{M}}\right)_{j} = \left(\overrightarrow{\mathbf{r}} \times \nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{T}}\right)_{j},$$
(2.11)

donde se ha identificado que $\delta^{nk}\delta_{nl} \,\epsilon_j^{\ li} T_{ik} = \epsilon_j^{\ ni} T_{in} = 0$, debido a que el tensor de esfuerzos de Maxwell es simétrico $(T_{in} = T_{ni})$ y el símbolo de Levi-Civita es antisimétirco $\left(\epsilon_j^{\ ni} = -\epsilon_j^{\ in}\right)$.

Teoría y métodos 17

A partir de este resultado se puede escribir la conservación del momento angular como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{mec}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) + \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{em}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \right) = \nabla \cdot \stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{M}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right),$$
(2.12)

qe es una ecuación local. Para escribir la conservación del momento angular de forma global, se debe integrar la Ec. (2.12) sobre un volumen V delimitado por una superficie S de la siguiente manera

Conservación del momento angular global en electrodinámica

$$\frac{d}{dt} \left(\vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}} (t) + \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} (t) \right) = \oint_{S} \vec{\mathbf{M}} (\vec{\mathbf{r}}, t) \cdot d\vec{\mathbf{S}}, \tag{2.13}$$

donde se ha usado el teorema de la divergencia en la última igualdad, y se han definido

$$\vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}}(t) = \int_{V} \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{mec}}(\vec{\mathbf{r}}, t) \ dV, \qquad \qquad \mathbf{y} \qquad \qquad \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}(t) = \int_{V} \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{em}}(\vec{\mathbf{r}}, t) \ dV. \tag{2.14}$$

Es importante mencionar que la superficie de integración S debe contener a la NP pero no debe contener a la trayectoria del electrón, como se observa en la Fig. 2.1.

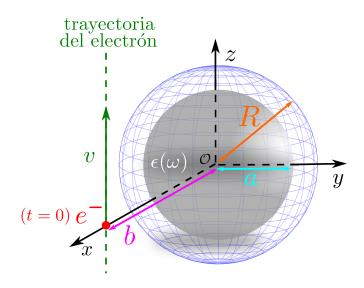


Figura 2.1: Nanopartícula, encerrada por la superficie de integración S de radio R, caracterizada por una respuesta dieléctrica homogénea ϵ (ω) centrada en el origen, junto a la trayectoria del electrón colocada en $\vec{\mathbf{r}} = (0, b, vt)$.

Se define el sistema de estudio como el de una NP caracterizada por una respuesta dieléctrica homogénea $\epsilon\left(\omega\right)$ centrada en el origen, interactuando con un electrón cuya trayectoria se describe a través de $\vec{\mathbf{r}}=(b,0,vt)$, como se muestra en la Fig. 2.1. Para calcular la transferencia de momento angular (TMA) del electrón a la NP $(\Delta \vec{\mathbf{L}})$ se integra la Ec. (2.13) en el tiempo de la siguiente manera

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}}(t) \ dt = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_{S} \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}, t) \cdot d\vec{\mathbf{S}} \ dt - \Delta \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}, \tag{2.15}$$

donde

$$\Delta \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} dt = \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} (t \to \infty) - \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} (t \to -\infty), \tag{2.16}$$

У

$$\vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}(t \to \pm \infty) = \epsilon_0 \mu_0 \int_V \vec{\mathbf{r}} \times \left[\vec{\mathbf{E}} \left(t \to \pm \infty \right) \times \vec{\mathbf{H}} \left(t \to \pm \infty \right) \right] dV, \tag{2.17}$$

donde este último término es nulo porque en el tiempo $t \to -\infty$ el electrón se encuentra infinitamente lejos y no ha interactuado con la NP, razón por la que los campos electromagnéticos son nulos $-\vec{\mathbf{E}}\,(t\to-\infty)=\vec{\mathbf{0}}$ y $\vec{\mathbf{H}}\,(t\to-\infty)=\vec{\mathbf{0}}$; posteriormente, para cuando $t\to\infty$, el electrón se encontrará infinitamente lejos de la NP pero ya habrá interactuado con ella, por lo que se habrá inducido distribuciones de cargas y corrientes eléctricas dentro de la NP, que habrán desaparecido para cuando $t\to\infty$ debido a procesos disipativos. Por tanto $\vec{\mathbf{L}}^{\rm em}\,(t\to\pm\infty)=0$.

Entonces

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_{S} \stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{M}} (\vec{\mathbf{r}}, t) \cdot d\vec{\mathbf{S}} dt, \qquad (2.18)$$

o usando notación de índices

$$\Delta L_i = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \epsilon_i^{\ lj} r_l T_{jk} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) n^k \, dS \, dt, \tag{2.19}$$

donde n_i es la *i*-ésima componente del vector normal a la superficie de S.

Como la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ se presenta usualmente en términos de la frecuencia, resulta conveniente expresar a los campos electromagnéticos en términos de ω . Utilizando la siguiente definición de transformada de Fourier

$$\vec{\mathbf{F}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\mathbf{F}}(t) e^{i\omega t} dt \qquad y \qquad \vec{\mathbf{F}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\mathbf{F}}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$
 (2.20)

donde $\vec{\mathbf{F}} \in \{\vec{\mathbf{B}}, \vec{\mathbf{H}}\}\$ y para que $\vec{\mathbf{F}}(t)$ sea una función de variable real se debe cumplir en el espacio de frecuencias que $\vec{\mathbf{F}}(\omega)^* = \vec{\mathbf{F}}(-w)$, con la convención de expresar al complejo conjugado de un número z como z^* . Además, para calcular la TMA a través de la Ec. (2.19) es importante notar que la dependencia en el tiempo está contenida únicamente en el tensor de esfuerzos de Maxwell $\dot{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{r}},t)$. De esta forma se puede reescribir la integrar en el tiempo de una pareja de campos eléctricos de la siguiente manera

$$\int_{-\infty}^{\infty} E_{i}(\vec{\mathbf{r}},t) E_{j}(\vec{\mathbf{r}},t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) e^{-i\omega t} d\omega \right] \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_{j}(\vec{\mathbf{r}},\omega') e^{-i\omega' t} d\omega' \right] dt,$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega+\omega')t} dt \right] E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{j}(\vec{\mathbf{r}},\omega') d\omega d\omega',$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega + \omega') E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{j}(\vec{\mathbf{r}},\omega') d\omega d\omega',$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{j}(\vec{\mathbf{r}},-\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{j}^{*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) d\omega,$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} \operatorname{Re} \left[E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{j}^{*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) \right] d\omega$$
(2.21)

y se puede realizar el proceso análogo para las componentes del campo $\vec{\mathbf{H}}$.

Teoría y métodos 19

De esta manera se puede reescribir la Ec. (2.19) como

$$\Delta L_i = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \oint_S \epsilon_i^{\ lj} r_l \Im_{jk} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^k \, dS \, d\omega, \tag{2.22}$$

donde se ha definido

$$\dot{\vec{\mathbf{T}}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \operatorname{Re}\left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\vec{\mathbf{E}}^*(\vec{\mathbf{r}},\omega) - \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)}\frac{\vec{\mathbf{I}}}{2}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\cdot\vec{\mathbf{E}}_j^*(\vec{\mathbf{r}},\omega) + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)}\vec{\mathbf{H}}_i(\vec{\mathbf{r}},\omega)\vec{\mathbf{H}}_j^*(\vec{\mathbf{r}},\omega) - \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)}\frac{\vec{\mathbf{I}}}{2}\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\cdot\vec{\mathbf{H}}^*(\vec{\mathbf{r}},t)\right],$$
(2.23)

donde $\stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{I}}$ es el tensor identidad de rango 2. De esta forma se puede definir finalmente la «densidad espectral» de momento angular

$$\mathcal{L}_{i}(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_{S} \epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathfrak{T}_{jk} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} dS.$$
(2.24)

y calcular la TMA a través de

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_0^\infty \vec{\mathcal{L}}(\omega) \ d\omega. \tag{2.25}$$

En coordenadas cartesianas la Ec. (2.24) puede ser escrita como

$$\mathcal{L}_x = \frac{1}{\pi} \left[\oint_S y \, \mathfrak{T}_{zk} \, dS^k - \oint_S z \, \mathfrak{T}_{yk} \, dS^k \right], \tag{2.26}$$

$$\mathcal{L}_{y} = \frac{1}{\pi} \left[\oint_{S} z \, \mathfrak{T}_{xk} \, dS^{k} - \oint_{S} x \, \mathfrak{T}_{zk} \, dS^{k} \right], \tag{2.27}$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{1}{\pi} \left[\oint_S x \, \mathfrak{T}_{yk} \, dS^k - \oint_S y \, \mathfrak{T}_{xk} \, dS^k \right]. \tag{2.28}$$

Debido a que el problema tiene simetría de reflexión con respecto al plano xz, no puede haber componente de momento lineal transferido en la dirección y [16]. De lo anterior se puede concluir que el momento angular transferido a la NP no puede tener componente x ni z [22]. Por tanto, solo la contribución espectral \mathcal{L}_y es diferente de cero. Se puede reescribir la componente espectral en términos de proyecciones esféricas en lugar de cartesianas, de la siguiente manera[22]

Componente espectral que contribuye a la transferencia de momento angular

$$\mathcal{L}_{y} = \frac{1}{\pi} \oint \sin \theta \left[\cos \varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] dS_{r}, \tag{2.29}$$

Componentes espectrales que no contribuyen a la transferencia de momento angular

$$\mathcal{L}_{x} = \frac{1}{\pi} \oint \sin \theta \left[\cos \varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] dS_{r}, \tag{2.30}$$

$$\mathcal{L}_x = \frac{1}{\pi} \oint \sin^2 \theta \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \, dS_r, \tag{2.31}$$

donde se ha asumido una superficie de integración esférica (radial), como se observa en la Fig. 2.1.

Resulta adecuado separar la contribución eléctrica de la magnética a la densidad espectral de la Ec. (2.25). Entonces, se separa el tensor en la Ec. (2.23) en su contribución eléctrica y magnética de la siguiente manera

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}(\vec{\mathbf{r}},\omega) + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{H}(\vec{\mathbf{r}},\omega)$$
(2.32)

con

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}}^{\mathrm{E}} = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \vec{\mathbf{E}}^* (\vec{\mathbf{r}}, \omega) - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{E}}^* (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \right],$$
(2.33)

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}}^{\mathrm{H}} = \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{H}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \vec{\mathbf{H}}^* (\vec{\mathbf{r}}, \omega) - \frac{\dot{\vec{\mathbf{I}}}}{2} \vec{\mathbf{H}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{H}}^* (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \right].$$
(2.34)

Si se elige una esfera como superficie de integración, y se denota a R como el radio de la superficie de integración esférica S y a \hat{r}_i como la i-ésima componente del vector unitario radial, es posible expresar a $\mathcal{L}_i(\omega)$ de la siguiente manera

$$\mathcal{L}_{i}(\omega) = \frac{R^{2}}{\pi} \int_{0}^{4\pi} \left[\epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathcal{T}_{jk}^{E} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} + \epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathcal{T}_{jk}^{H} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} \right] d\Omega, \tag{2.35}$$

donde únicamente falta integral en el ángulo sólido Ω . Se puede separar la contribución eléctrica de la magnética en la Ec. (2.35) de la siguiente manera

$$\mathcal{L}_{i}^{E}(\omega) = \frac{R^{2}}{\pi} \int_{0}^{4\pi} \left[\epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \Upsilon_{jk}^{E} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} \right] d\Omega, \tag{2.36}$$

$$\mathcal{L}_{i}^{\mathrm{H}}(\omega) = \frac{R^{2}}{\pi} \int_{0}^{4\pi} \left[\epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \Upsilon_{jk}^{\mathrm{H}} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} \right] d\Omega. \tag{2.37}$$

Además, se pueden separar a los campos electromagnéticos $\vec{\mathbf{E}}$ y $\vec{\mathbf{H}}$ en sus contribuciones de campo externo (ext) y campo esparcido (scat) como

$$\vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}, \qquad \qquad \qquad \vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{H}}_{\text{scat}}, \tag{2.38}$$

donde $\vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}}$ y $\vec{\mathbf{H}}_{\mathrm{ext}}$ son los campos electromagnéticos externos —es decir, los producidos por el electrón—, y $\vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{scat}}$ y $\vec{\mathbf{H}}_{\mathrm{scat}}$ son los campos esparcidos por la NP. Se puede reescribir la componente eléctrica del tensor

Teoría y métodos 21

de la Ec. (2.23) como

$$\vec{\mathcal{T}}^{E} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \right) \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} \right) - \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \right) \cdot \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} \right) \right],$$

$$= \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} \right) \right],$$

$$- \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} \right) \right],$$

$$(2.39)$$

donde la componente eléctrica del tensor de esfuerzos se escribe como

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E} = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{ss} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{int} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{ee},$$
(2.40)

con

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{T}}^{E}_{ss} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{scat} \vec{\mathbf{E}}_{scat}^{*} - \frac{\dddot{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{scat} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{scat}^{*} \right],$$
(2.41)

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{ee} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{ext} \vec{\mathbf{E}}_{ext}^{*} - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{ext} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{ext}^{*} \right],$$
(2.42)

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{int}^{E} = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{se}^{E} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{es}^{E},$$
(2.43)

y con

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{es} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{ext} \vec{\mathbf{E}}_{scat}^{*} - \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{ext} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{scat}^{*} \right],$$
(2.44)

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{se} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{scat} \vec{\mathbf{E}}_{ext}^{*} - \frac{\vec{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{scat} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{ext}^{*} \right].$$
(2.45)

Análogamente al hacer la sustitución $\epsilon_0 \to \mu_0$ y $\vec{\mathbf{E}} \to \vec{\mathbf{H}}$ en las Ecs. (2.39) a (2.45), se obtiene las contribuciones magnéticas al tensor $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}$, denotadas por $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^H_{ij}$ donde ij pueden tomar los valores {e, s}.

Se puede interpretar a $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{int}$ como la componente que está relacionada con la interacción del campo electromagnético del electrón con las cargas y corrientes inducidas en la NP. En el caso en que no exista NP, nada altera el movimiento del electrón, por lo que no pierde ni cede energía, momento lineal ni momento angular ($\Delta L = 0$) [22]. Al no existir NP, los campos electromagnéticos esparcidos serían nulos, por lo que la única contribución al momento angular proviene de la componente $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ee}$. Por tanto, de manera general, se concluye que la contribución al momento angular transferido debido a $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ee}$ es nula. También vale la pena mencionar que la componente $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ss}$, al depender únicamente de los campos electromagnéticos esparcidos por la NP, está relacionada con la interacción de la NP consigo misma, referida por algunos autores como reacción de radiación [30].

En la siguiente sección se presentan las expresiones analíticas de los campos electromagnéticos externos (producidos por el electrón) y de los esparcidos por la NP, para poder integrarlos dentro de la Ec. (2.35).

2.2. Transferencia de momento angular de un electrón rápido a una nanopartícula

El campo electromagnético externo producido por un electrón rápido, considerado como una partícula puntual de carga q = -e, viajando a velocidad $\vec{\mathbf{v}}$ constante a lo largo del eje z a lo largo de la trayectoria $\vec{\mathbf{r}} = (b, 0, vt)$ (ver Fig. 2.1), se puede obtener mediante una transformación de Lorentz de un sistema de referencia en el que el electrón se encuentra en reposo, a un sistema de referencia en el que el electrón que se mueve a velocidad constante $\vec{\mathbf{v}}$, obteniendo [30]

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},t) = (4\pi\epsilon_0) \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma \left[\vec{\mathbf{R}} + (z - vt)\hat{z}\right]}{\left[R^2 + \gamma^2(z - vt)^2\right]^{3/2}},$$
(2.46)

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},t) = (4\pi) \frac{-e}{4\pi} \frac{\gamma \vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{R}}}{\left[R^2 + \gamma^2 (z - vt)^2\right]^{3/2}},$$
(2.47)

en donde c es la velocidad de la luz, $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$, $\beta = v/c$, $\vec{\mathbf{R}} = (x - b)\hat{x} + y\hat{y}$, $R = \sqrt{(x - b)^2 + y^2}$ y $\vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{R}} = v \left[(x - b)\hat{y} - y\hat{x} \right]$. Se pueden calcular los campos electromagnéticos externos en función de la frecuencia mediante una transformada de Fourier de las Ecs. (2.46) y (2.47) [31]:

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = (4\pi\epsilon_0) \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega}{v^2 \gamma} e^{i\omega(z/v)} \left\{ \text{sign}(\omega) K_1 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma} \right) \hat{R} - \frac{i}{\gamma} K_0 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma} \right) \hat{z} \right\},$$
(2.48)

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = (4\pi) \frac{-e}{4\pi} \frac{2e}{vc\gamma} |\omega| e^{i\omega z/v} K_1 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma}\right) \hat{v} \times \hat{R}, \tag{2.49}$$

que son expresiones cerradas con simetría cilíndrica. Como también se buscan los campos esparcidos por la NP, que tienen simetría esférica, conviene expresar a los campos electromagnéticos del electrón mediante una solución con simetría esférica.

El campo eléctrico producido por el electrón se puede obtener mediante la función de Green dependiente del tiempo [31]

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = e\left(\nabla - i\frac{k\vec{\mathbf{v}}}{c}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) dt, \qquad (2.50)$$

donde la función de Green $G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t)$ está dada por

$$G_0\left(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t\right) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ik|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|}}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|},\tag{2.51}$$

con $k = \omega/c$ el número de onda en el vacío, $\vec{\mathbf{r}}_t = \vec{\mathbf{r}}_0 + \vec{\mathbf{v}}t$ la posición del electrón al tiempo t y $\vec{\mathbf{r}}_0 = (b, 0, 0)$. Al expandir la función de Green en base esférica se obtiene [26]

$$G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) h_{\ell}^+(kr_t) Y_{\ell,m}(\Omega_r) Y_{\ell,m}(\Omega_{r_t})^*, \tag{2.52}$$

Teoría y métodos 23

donde $Y_{\ell,m}$ son los armónicos esféricos escalares, Ω_r es el ángulo sólido del vector $\vec{\mathbf{r}}$, $h_{\ell}^+(x) = \mathrm{i}h_{\ell}^1(x)$ es la función de Hankel esférica de orden ℓ y $j_{\ell}(x)$ es la función esférica de Bessel de orden ℓ [32]. Sustituyendo la Ec. (2.52) en la Ec. (2.50), se obtiene

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \left(\nabla - i\frac{k\vec{\mathbf{v}}}{c}\right) \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \phi_{\ell,m}$$
(2.53)

donde

$$\phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} h_{\ell}^+(kr_t) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}) dt.$$
 (2.54)

En el Apéndice A se muestran los detalles del cálculo analítico de la Ec. (2.54). El campo electromagnético externo en representación multipolar esférica se escribe como:

Expansión multipolar del campo electromagnético externo producido por el electrón

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{er}} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} \hat{\varphi} \right)$$
(2.55)

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{er}} \hat{r} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} \hat{\theta} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} \hat{\varphi} \right)$$
(2.56)

donde

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{er}} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr}, \qquad (2.57)$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} = -e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(kr) P_{\ell}^{m}(\cos\theta) - e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \qquad (2.58)$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} = i e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} j_{\ell}(kr) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + i e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \qquad (2.59)$$

У

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{er}} = e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr}, \qquad (2.60)$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(kr) P_{\ell}^{m}(\cos\theta) - e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \qquad (2.61)$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} = -i e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} j_{\ell}(kr) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + i e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \qquad (2.62)$$

donde P_{ℓ}^m son las funciones asociadas de Legendre, y los coeficientes escalares $C_{\ell,m}^{\rm ext}$ y $D_{\ell,m}^{\rm ext}$ son

$$C_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}},$$

$$D_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}},$$
(2.63)

$$D_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}},$$
(2.64)

 $\text{con } \psi_{\ell,m}^{E,\text{ext}} \neq \psi_{\ell,m}^{M,\text{ext}} \text{ los coeficientes de la representación esférica de los potenciales auxiliares están definidos están defini$ en el Apéndice A.

Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula 2.3.

Como se muestra en el Apéndice A, los campos electromagnéticos satisfacen la ecuación de Helmholtz sin fuentes,

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{0}},\tag{2.65}$$

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{0}}.\tag{2.66}$$

La solución de las Ecs. (2.65) y (2.66) puede ser escrita como [33]

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla \psi^{\mathcal{L}} + \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathcal{M}} - \frac{\mathrm{i}}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathcal{E}}, \tag{2.67}$$

$$\vec{\mathbf{H}} = -\frac{\mathrm{i}}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^M - \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathrm{E}}, \tag{2.68}$$

donde $\vec{\mathbf{L}} = -i\vec{\mathbf{r}} \times \nabla$ es el operador de momento angular orbital y ψ^L , ψ^E y ψ^M son funciones escalares que satisfacen la ecuación escalar de Helmholtz. Como el campo eléctrico externo es un campo solenoidal $(\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 0)$, la función escalar ψ^{L} debe ser nula. Las funciones escalares ψ^{E} y ψ^{M} , del campo externo y del campo esparcido respectivamente, pueden ser expandidas en una base esférica definida a partir del sistema de coordenadas de la Fig. 2.1, como [26]

$$\psi^{\mathrm{E,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\mathrm{E,ext}}, \tag{2.69}$$

$$\psi^{\mathrm{E,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell} (kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\mathrm{E,ext}}, \tag{2.70}$$

$$\psi^{\text{E,scat}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} h_{\ell}^{+}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_{r}) \psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}}, \qquad (2.71)$$

$$\psi^{\text{E,scat}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} h_{\ell}^{+}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_{r}) \psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}}.$$
(2.72)

25 Teoría y métodos

Aplicando las condiciones de frontera de los campos electromagnéticos, para una partícula esférica, se pueden calcular los potenciales escalares electromagnéticos esparcidos por la NP, en función de los potenciales escalares electromagnéticos externos, de la siguiente manera [26]

$$\psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}} = t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \qquad (2.73)$$

$$\psi_{\ell,m}^{\text{M,scat}} = t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}. \qquad (2.74)$$

$$\psi_{\ell,m}^{\text{M,scat}} = t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}. \tag{2.74}$$

Donde los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm E}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm M}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm M}$ y $t_\ell^{\rm M}$, para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes $t_\ell^{\rm M}$ y $t_\ell^{$ cientes de la solución de Mie: [34]

$$t_{\ell}^{E} = \frac{-j_{\ell}(x_{0}) \left[x_{i}j_{\ell}(x_{i})\right]' + \epsilon_{i} j_{\ell}(x_{i}) \left[x_{0}j_{\ell}(x_{0})\right]'}{h^{+}(x_{0}) \left[x_{i}j_{l}(x_{i})\right]' - \epsilon_{i}j_{l}(x_{i}) \left[x_{0}h_{\ell}^{+}(x_{0})\right]'},$$
(2.75)

$$t_{\ell}^{\mathrm{M}} = \frac{x_{i}j_{\ell}(x_{0})j_{\ell}'(x_{i}) + x_{0}j_{\ell}'(x_{0}))j_{\ell}(x_{i})}{x_{i}h_{\ell}^{+}(x_{0})j_{\ell}'(x_{i}) - x_{0}h_{\ell}^{+}'(x_{0})j_{\ell}(x_{i})},$$
(2.76)

donde $x_0 = ka$ y $x_i = ka\sqrt{\epsilon_i}$, con a el radio de la NP y ϵ_i la función dieléctrica de la NP. La prima en las Ecs. (2.75) y (2.76) denota la derivada de la función. Sustituyendo los potenciales escalares esparcidos de las Ecs. (2.73) y (2.74) en las Ecs. (2.67) y (2.68) se obtiene

Expansión multipolar del campo electromagnético esparcido por la NP

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathscr{E}_{\ell,m}^{\text{sr}} \hat{r} + \mathscr{E}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} \hat{\theta} + \mathscr{E}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} \hat{\varphi} \right)$$
(2.77)

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{scat}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{sr}} \hat{r} + \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} \hat{\theta} + \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} \hat{\varphi} \right)$$
(2.78)

donde

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{sr}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} \left(\cos\theta\right) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{0}r}, \tag{2.79}$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\theta} = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{+}(k_{0}r) P_{\ell}^{m}(\cos\theta) - \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m}(\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m}(\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+}(k_{0}r) \right], \tag{2.80}$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\varphi} = \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} h_{\ell}^{+}(k_{0}r) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m}(\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m}(\cos\theta) \right] + \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell}(\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{\ell}r} - h_{\ell+1}^{+}(k_{0}r) \right], \tag{2.81}$$

$$+ i e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin \theta} P_{\ell} (\cos \theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+}(k_{0}r) \right], \qquad (2.81)$$

у

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{sr}} = e^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{0}r}, \tag{2.82}$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\theta} = e^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{+}(k_{0}r) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - e^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+}(k_{0}r) \right], \tag{2.83}$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\varphi} = -\mathrm{i} e^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} h_{\ell}^{+}(k_{0}r) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + \mathrm{i} e^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+}(k_{0}r) \right], \tag{2.84}$$

con los coeficientes escalares $C_{\ell,m}^{\rm scat}$ y $D_{\ell,m}^{\rm scat}$ están dados por

$$C_{\ell,m}^{\text{scat}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}},$$
 (2.85)

$$D_{\ell,m}^{\text{scat}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}.$$
 (2.86)

Una vez calculado el campo electromagnético total, es posible construir el tensor $\stackrel{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}$, dado por la Ec. (2.23), y poder calcular la densidad espectral de TMA, dada por la Ec. (2.24):

$$\mathcal{L}_{i}\left(\omega\right) = \frac{1}{\pi} \oint_{S} \epsilon_{i}^{lj} r_{l} \Upsilon_{jk}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) n^{k} dS.$$

Resultados y discusión

En este capítulo se exponen los resultados de las expresiones analíticas que describen la contribución espectral en la TMA de la interacción entre un electrón rápido y una NP esférica. Se desarrollan los términos de las densidades espectrales de la TMA mediante la transformada de Fourier del tensor de esfuerzos de Maxwell, expandiendo los términos cruzados de los campos electromagnéticos y calculando las integrales analíticamente sobre la superficie esférica S que rodea la NP.

No obstante, cabe mencionar que para obtener una información completa del comportamiento de la NP, estas expresiones deben integrarse en el espacio de frecuencias. Para ello, se utiliza el método de Cuadraturas de Gauss-Kronrod, que permite estimar el error numérico cometido al realizar dicha integración.

3.1. Desarrollo de las densidades espectrales de la transferencia de momento angular

Desarrollando las Ecs. (2.29), (2.30) y (2.31) se obtiene

$$\mathcal{L}_x = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin\theta \left[\sin\varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} + \cos\theta \cos\varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] \, d\varphi \, d\theta, \tag{3.1}$$

$$\mathcal{L}_{y} = \frac{R^{3}}{\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin\theta \left[\cos\varphi \,\mathfrak{T}_{\theta r} - \cos\theta \sin\varphi \,\mathfrak{T}_{\varphi r}\right] \,d\varphi \,d\theta,\tag{3.2}$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \, \Im_{\varphi r} \, d\varphi \, d\theta, \tag{3.3}$$

donde

$$\mathfrak{I}_{\theta r} = \operatorname{Re}\left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} E_{\theta}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_r^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega) + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} H_{\theta}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) H_r^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega)\right],$$
(3.4)

$$\mathfrak{I}_{\varphi r} = \operatorname{Re}\left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} E_{\varphi}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) E_r^*\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} H_{\varphi}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) H_r^*\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right)\right]. \tag{3.5}$$

Se puede separar $E_i = E_i^{\rm e} + E_i^{\rm s}$ y $H_i = H_i^{\rm e} + H_i^{\rm s}$, para desarrollar los términos $E_{\alpha}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \, E_r^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ y $H_{\alpha}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \, H_r^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ en fución de las sumas multipolar expresada en la Ecs. (2.55) y (2.77) de la siguiente manera

$$E_{\alpha}^{\mathbf{a}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{r}^{\mathbf{b}*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \sum_{\ell m} \sum_{\ell' m'} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathbf{a}\alpha} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\mathbf{b}r*}, \tag{3.6}$$

$$H_{\alpha}^{\mathrm{a}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)H_{r}^{\mathrm{b}*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \sum_{\ell m} \sum_{\ell' m'} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\alpha} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*}, \tag{3.7}$$

donde a y b pueden tomar los valores de s (denotando componentes de campo esparcido) o de e (componentes de campo externo), y donde α puede denotar la proyección en $\hat{\theta}$ o en $\hat{\varphi}$.

El término $\mathscr{E}^{\mathrm{a}\theta}_{\ell,m}\mathscr{E}^{\mathrm{br}\,*}_{\ell',m'}$ se puede escribir como

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ -C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0} r} m \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} - D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0} r} \right. \\
\times \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right] \right\} \ell'(\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi}, \tag{3.8}$$

donde $Z_{\ell}^{\rm s}=h_{\ell}^+(k_or)$ para el campo esparcido, y $Z_{\ell}^{\rm e}=j_{\ell}(k_or)$ para el campo externo, y se ha definido:

$$f_{\ell}^{a} = (\ell + 1) \frac{Z_{\ell}^{a}}{k_{0}r} - Z_{\ell+1}^{a}. \tag{3.9}$$

El término $\mathscr{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta}\mathscr{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}\,*}$ se puede escribir como

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}r} m \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} - C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}r} \right. \\
\times \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right] \right\} \ell'(\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi}, \tag{3.10}$$

Análogamente, el término $\mathscr{E}^{a\varphi}_{\ell,m}\mathscr{E}^{br*}_{\ell',m'}$ se puede escribir como

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi}\mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}r} \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (\ell-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}}{\sin \theta} \right] + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} m \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}r} \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right\} i \ell' (\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi},$$
(3.11)

y finalmente el término $\mathscr{H}^{a\varphi}_{\ell,m}\mathscr{H}^{br*}_{\ell',m'}$ se puede escribir como

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi}\mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ -D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}r} \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (\ell-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}}{\sin \theta} \right] + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} m \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}r} \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right\} i \ell' (\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi}.$$
(3.12)

3.2. Cálculo semi-analítico de las integrales necesarias para la transferencia de momento angular total

La integral en φ se puede calcular teniendo en cuenta que

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \cos\varphi \, d\varphi = \pi \left(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'} \right), \tag{3.13}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \sin\varphi \, d\varphi = i\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right), \tag{3.14}$$

y para calcular la integral en θ se definen las siguientes cantidades

$$IM_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) x \, dx, \tag{3.15}$$

$$IU_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}},$$
(3.16)

$$IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx, \tag{3.17}$$

$$IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx, \tag{3.18}$$

que pueden ser calculadas mediante cuadraturas Gaussianas [35], que dan resultados exactos al ser utilizadas para integrar polinomios¹. Se debe tomar en cuenta la relación de ortogonalidad de las funciones asociadas de Legendre [32]

$$\int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m}(x) dx = \Delta_{\ell\ell'} \quad \text{con} \quad \Delta_{\ell\ell'} = \frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'}.$$
 (3.19)

3.3. Transferencia de momento angular total

Las integrales de los términos cruzados de los campos electromagnéticos en las Ecs. (3.1), (3.2) y(3.3) se escriben como

$$\int_{0}^{4\pi} \mathscr{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathscr{E}_{\ell',m'}^{br*} \sin \varphi \, d\Omega = i\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ -C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0} R} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0} R} \right. \\
\times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \tag{3.20}$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathscr{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathscr{H}_{\ell',m'}^{br*} \sin \varphi \, d\Omega = i\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0} R} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0} R} \right.$$

$$\times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \tag{3.21}$$

¹Debe tenerse en cuenta que solo las funciones asociadas de Legendre P_{ℓ}^{m} de orden m par son polinomios, por lo que solo las integrales pares en m se calcularán de forma exacta.

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a,\theta} \mathcal{E}_{\ell,m'}^{br*} \cos \varphi \, d\Omega = \pi \left(\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ -C_{\ell,m}^{a} D_{\ell,m'}^{b**} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell}^{b*}}{k_{0}R} m IU_{\ell,\ell'}^{m,m'} - D_{\ell,m}^{a} D_{\ell,m'}^{b**} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \right. \\ \times \left[(\ell+1) IW_{\ell,\ell''}^{m,m'} - (\ell-m+1) IU_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \mathcal{E}'(\ell'+1), \qquad (3.22)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\theta} \mathcal{H}_{\ell,m'}^{br*} \cos \varphi \, d\Omega = \pi \left(\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ D_{\ell,m}^{a} C_{\ell,m'}^{b**} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} m IU_{\ell,\ell'}^{m,m'} - C_{\ell,m}^{a} C_{\ell,m'}^{b**} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \right. \\ \times \left[(\ell+1) IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) IU_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \mathcal{E}'(\ell'+1), \qquad (3.23)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a,\varphi} \mathcal{E}_{\ell,m'}^{br**} \cos \theta \sin \varphi \, d\Omega = -\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] \right.$$

$$\left. - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right\} + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] \right.$$

$$\left. - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right\} + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] \right.$$

$$\left. - (\ell-m+1) \Delta_{\ell+1,\ell'} \right\} + D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell+1) IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] \right.$$

$$\left. - (\ell-m+1) \Delta_{\ell+1,\ell'} \right\} + D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{k_{0}R} \left[(\ell'+1) IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right] \right.$$

$$\left. - (\ell-m+1) \Delta_{\ell+1,\ell'} \right\} + D_{\ell$$

y definiendo las siguientes cantidades

$$IS_{\ell m\ell'm'}^{a\theta br} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \right) \sin\varphi \, d\Omega, \tag{3.30}$$

$$IC_{\ell m\ell'm'}^{\mathrm{a}\theta\mathrm{br}} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathscr{E}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta} \mathscr{E}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathscr{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta} \mathscr{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*} \right) \cos\varphi \, d\Omega, \tag{3.31}$$

$$ICS_{\ell m\ell'm'}^{a\varphi br} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \right) \cos\theta \sin\varphi \, d\Omega, \tag{3.32}$$

$$ICC_{\ell m\ell'm'}^{a\varphi br} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \right) \cos\theta \cos\varphi \, d\Omega, \tag{3.33}$$

$$IS_{\ell m\ell'm'}^{\mathrm{a}\varphi\mathrm{br}} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}\,*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}\,*} \right) \sin\theta \, d\Omega, \tag{3.34}$$

se pueden reescribir las Ecs. (3.1), (3.2) y (3.3) como

$$\mathcal{L}_x = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \left(I S_{\ell m \ell' m'}^{a\theta br} + I C C_{\ell m \ell' m'}^{a\varphi br} \right), \tag{3.35}$$

$$\mathcal{L}_{y} = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \left(I C_{\ell m \ell' m'}^{a\theta br} - I C S_{\ell m \ell' m'}^{a\varphi br} \right), \tag{3.36}$$

$$\mathcal{L}_z = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} I S_{\ell m \ell' m'}^{\text{a}\varphi \text{br}}.$$
(3.37)

En el Apéndice B se muestra el cálculo de $\Delta L_{\rm ext}$, que corresponde exclusivamente al efecto del campo electromagnético generado por el electrón. Al obtener resultados que se anulan, se fortalece la confianza en la validez de las expresiones semi-analíticas, presentadas en las Ecs. (3.35), (3.36) y (3.37), utilizadas para calcular la TMA. De este modo se respalda la precisión de los resultados obtenidos.

Conclusiones y trabajo a futuro

3.4. Conclusiones

En esta tesis se ha presentado un análisis teórico detallado de la transferencia de momento angular que tiene lugar entre un haz de electrones y nanopartículas esféricas dentro de un microscopio electrónico de transmisión y de barrido (STEM), utilizando un enfoque de electrodinámica clásica. Se ha desarrollado una metodología que permite estudiar la transferencia de momento angular con alta eficiencia computacional. Se han obtenido expresiones semi-analíticas exactas y cerradas de la densidad espectral de transferencia de momento angular, modelando la respuesta electromagnética de la nanopartícula mediante su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$.

Para calcular la transferencia de momento angular $\Delta \vec{\mathbf{L}}$, es necesario integrar la densidad espectral $\mathcal{L}\vec{\mathbf{t}}$ en todo el espacio de frecuencias. La metodología presentada en esta tesis permite estudiar la transferencia de momento angular a nanopartículas de cualquier tamaño en la nanoescala, incluyendo el caso de nanopartículas grandes de hasta 50 nm de radio. Hasta donde tiene conocimiento el autor, no se han realizado cálculos de esta naturaleza con métodos numéricos debido a las limitaciones que provienen de los tiempos de cómputo, en particular, para nanopartículas grandes, de más de 10 nm de radio, caracterizadas por funciones dieléctricas realistas que no se basen en el modelo de Drude.

Además, se ha implementado un código en lenguaje C que calcula la contribución del campo electromagnético externo del electrón a la transferencia de momento angular. Se realizaron los cálculos de $\Delta \vec{\mathbf{L}}$ en función del parámetro de impacto, de la velocidad del electrón y del tamaño de la superficie de integración. Al obtener siempre resultados que se anulan, se ha ganado confianza en la validez de las soluciones semi-analíticas, ya que los términos del tensor de esfuerzos de Maxwell que contienen únicamente al campo electromagnético del electrón $\vec{\mathbf{E}}_{\rm ext}$ no contribuyen a la transferencia de momento angular total.

Con las expresiones de las integrales que contienen también a los campos electromagnéticos esparcidos por las nanopartículas, se puede utilizar el presente trabajo para explorar la dinámica angular en la interacción de haces de electrones con nanopartículas en un amplio rango de tamaños y materiales. En conclusión, el presente trabajo proporciona una herramienta importante para el estudio teórico de la

transferencia de momento angular dentro de un STEM, lo que puede tener importantes aplicaciones en campos como la nanotecnología y la medicina, con el desarrollo de las pinzas electrónicas.

3.5. Trabajo a futuro

En esta tesis se ha investigado la interacción entre el campo electromagnético producido por un electrón rápido y una nanopartícula, aunque aún quedan varios temas por explorar. Con el fin de profundizar en este tema, se pretende extender el código en lenguaje C para calcular tanto los campos electromagnéticos externos del electrón como los esparcidos por la nanopartícula, lo que permitirá programar las integrales necesarias para obtener la transferencia de momento angular total. Esta metodología permite separar la contribución eléctrica de la magnética y estudiar la contribución de distintos órdenes multipolares a la transferencia de momento angular.

En el futuro, se planea utilizar esta metodología para calcular la transferencia de momento angular de electrones rápidos a nanopartículas de diferentes tamaños y materiales (dieléctricos y plasmónicos) en toda la escala nano. Para ello, solo será necesario conocer la función dieléctrica causal del material de la nanopartícula. Una vez obtenidos los resultados, se deben comparar con los publicados previamente para nanopartículas pequeñas, de hasta 5 nm de radio, para corroborar la validez de la solución semi-analítica o corregirla si es necesario. Posteriormente, se podrán extender los resultados para nanopartículas más grandes de hasta 50 nm de radio.

Por último, se propone explorar el comportamiento de la interacción utilizando funciones dieléctricas espacialmente locales y no locales. Esto se debe a que experimentalmente se ha observado una interacción atractiva que aún no ha podido explicarse con los modelos publicados hasta el momento. Es probable que esto se deba a que, cuando el parámetro de impacto es lo suficientemente pequeño, la naturaleza no local de las funciones dieléctricas tenga algún papel importante.

Apéndice A

Método de los potenciales escalares

Para construir la solución buscada se define ahora la transformada de Fourier espaciotemporal como

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{\text{T.E.}} \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}},t) e^{-i(\vec{\mathbf{q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}-\omega t)} d^3 r dt,$$

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{\text{T.E.R.}} \vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) e^{i(\vec{\mathbf{q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}-\omega t)} d^3 q d\omega,$$
(A.1)

donde T.E. significa integrar sobre todo el espacio y T.E.R. significa integrar sobre todo el espacio recíproco.

Si ahora calculamos solo la Transformada de Fourier temporal de las Ecuaciones de Maxwell, Ecs. (2.2), se obtiene

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = (4\pi\epsilon_0) \frac{\rho_{\text{tot}}}{\epsilon_0}, \qquad \nabla \times \vec{\mathbf{E}} = i\omega \left(\frac{1}{c}\right) \vec{\mathbf{B}},$$

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0, \qquad \nabla \times \vec{\mathbf{B}} = \left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} - i\omega \frac{(c)}{c^2} \vec{\mathbf{E}}. \tag{A.2}$$

Al desacoplarlas, aplicando las relaciones constitutivas $\vec{\mathbf{D}} = \epsilon(\omega)\vec{\mathbf{E}}$ y $\vec{\mathbf{B}} = \mu(\omega)\vec{\mathbf{H}}$, y sin considerar las fuentes se obtiene

$$(\nabla^2 + k^2)\vec{\mathbf{E}} = 0,$$

$$(\nabla^2 + k^2)\vec{\mathbf{H}} = 0.$$

en donde $k^2 = (c^{-2})\omega^2 \epsilon(\omega)\mu(\omega)$.

El campo eléctrico $\vec{\mathbf{E}}$ puede ser descrito de la siguiente manera [33]

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla \frac{1}{\nabla^2} \left(\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} \right) + \vec{\mathbf{L}} \frac{1}{L^2} \left(\vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{E}} \right) - \left(\vec{\mathbf{L}} \times \nabla \right) \frac{1}{L^2 \nabla^2} \left[\left(\vec{\mathbf{L}} \times \nabla \right) \cdot \vec{\mathbf{E}} \right], \tag{A.3}$$

en donde $\vec{\mathbf{L}} = -i\vec{\mathbf{r}} \times \nabla$ es el operador de momento angular orbital. A partir de la Ec. (A.3) se pueden definir las funciones escalares: longitudinal, eléctrica y magnética: [33]

$$\psi^{\mathcal{L}} = \frac{1}{\nabla^2} \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}},\tag{A.4}$$

$$\psi^{E} = \frac{-ik}{L^{2}\Delta^{2}} \left(\vec{\mathbf{L}} \times \nabla \right) \cdot \vec{\mathbf{E}}, \tag{A.5}$$

$$\psi^{\mathcal{M}} = \frac{1}{L^2} \vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{E}},\tag{A.6}$$

en donde cada uno satisface la ecuación escalar de Helmholtz sin fuentes:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi^{\{L,E,M\}} = 0.$$
 (A.7)

Por tanto, los campos electromagnéticos se pueden escribir a partir de los potenciales escalares como²

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla \psi^{\mathcal{L}} + \vec{\mathbf{L}}\psi^{\mathcal{M}} - \frac{i}{k}\nabla \times \vec{\mathbf{L}}\psi^{\mathcal{E}},\tag{A.8}$$

$$\vec{\mathbf{H}} = \frac{(c)}{c} \left(-\frac{i}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathrm{M}} - \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathrm{E}} \right). \tag{A.9}$$

En el problema de interés para este trabajo se considera al electrón viajando en vacío y a velocidad constante, por lo que los modos longitudinales no contribuyen $(\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 0)$, es decir, $\psi^L = 0$. Las funciones escalares restantes se pueden expresar en términos de una base esférica de la siguiente manera [26]

$$\psi^{\mathrm{E,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (i)^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\mathrm{E,ext}}, \tag{A.10}$$

$$\psi^{\text{M,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (i)^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \tag{A.11}$$

donde $j_{\ell}(x)$ son las funciones esféricas de Bessel de orden ℓ , $Y_{\ell,m}$ son los armónicos esféricos escalares, (r, Ω_r) son las coordenadas esféricas del vector $\vec{\mathbf{r}}$, y $\psi_{\ell,m}^{\mathrm{E,ext}}$ y $\psi_{\ell,m}^{\mathrm{M,ext}}$ son funciones escalares a determinar. Las Ecs. (A.10) y (A.11) son válidas en la región a < r < b, donde a es el radio de la NP y b es el parámetro de impacto del electrón medido desde el centro de la NP.

Aplicando ahora la transformada de Fourier a las Ecs. (2.3) y (2.4) se obtiene

$$\left(-q^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right)\phi\left(\vec{\mathbf{q}},\omega\right) = -\left(4\pi\epsilon_0\right)\frac{1}{\epsilon_0}\rho_{\text{tot}}\left(\vec{\mathbf{q}},\omega\right),\tag{A.12}$$

$$\left(-q^2 + \frac{\omega^2}{c^2}\right) \vec{\mathbf{A}} \left(\vec{\mathbf{q}}, \omega\right) = -\left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} \left(\vec{\mathbf{q}}, \omega\right), \tag{A.13}$$

²En el trabajo original de García de Abajo, se hace la suposición de que los campos electromagnéticos están en el vacío; i.e. $k = \omega/c$.

y usando el hecho de que $\vec{\mathbf{J}}=\rho\vec{\mathbf{v}}$ y $\mu_0\epsilon_0c^2=1$ se obtiene

$$\phi\left(\vec{\mathbf{q}},\omega\right) = \frac{1}{q^2 - \omega^2/c^2} \frac{\rho_{\text{tot}}\left(\vec{\mathbf{q}},\omega\right)}{\epsilon_0},\tag{A.14}$$

$$\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) = \left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \frac{\mu_0}{q^2 - \omega^2/c^2} \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) = (c) \frac{\vec{\mathbf{v}}}{c^2} \phi(\vec{\mathbf{q}},\omega). \tag{A.15}$$

Ahora, calculando la transformada de Fourier de la Ec. (2.5) se sigue que

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) = -i\vec{\mathbf{k}}\phi(\vec{\mathbf{q}},\omega) + \left(\frac{1}{c}\right)i\omega\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{q}},\omega). \tag{A.16}$$

Sustituyendo la Ec. (A.15) en la Ec. (A.16) resulta que

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{q}}, \omega) = i \left(-\vec{\mathbf{q}} + \frac{\omega}{c^2} \vec{\mathbf{v}} \right) \phi(\vec{\mathbf{q}}, \omega), \qquad (A.17)$$

y calculando la Transformada Inversa de Fourier en el espacio de la expresión anterior, se obtiene

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \left(-\nabla + i\frac{\omega}{c^2}\vec{\mathbf{v}}\right)\phi(\vec{\mathbf{r}},\omega). \tag{A.18}$$

Realizando el proceso análogo para calcular el campo magnético $\vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)$ se derivan:

$$\vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) = i\vec{\mathbf{k}} \times \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{q}},\omega) = (c)i\vec{\mathbf{k}} \times \frac{\vec{\mathbf{v}}}{c^2}\phi(\vec{\mathbf{q}},\omega), \qquad (A.19)$$

$$\vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = (c)\nabla\phi(\vec{\mathbf{r}},\omega) \times \frac{\vec{\mathbf{v}}}{c^2}.$$
(A.20)

Considerando la densidad de carga del electrón en movimiento es $\rho_{tot}(\vec{\mathbf{r}},t) = -e\delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t)$, donde $\vec{\mathbf{r}}_t = (b,0,vt)$ es el vector posición del electrón, y calculando la transformada de Fourier de la Ec. (2.3) se obtiene la Ec. de Helmholtz

$$\nabla^{2} \phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega) + k^{2} \phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = -(4\pi\epsilon_{0}) \frac{e}{\epsilon_{0}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_{t}) dt, \tag{A.21}$$

donde $k = \omega/c$ es el número de onda en el vacío y la solución para $\phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ se escribe como [26, 31, 36]

$$\phi(\vec{\mathbf{r}},\omega) = -e \int_{\text{T.E.}} G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}') \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) dt d^3 r', \tag{A.22}$$

$$= -e \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \int_{TE} G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}') \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) d^3 r' dt, \qquad (A.23)$$

$$= -e \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_0 \left(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t \right) dt, \tag{A.24}$$

con

$$G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ik|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|}}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|},$$
(A.25)

la función de Green de la ecuación de Helmholtz. De esta forma, el campo eléctrico del electrón se puede escribir como

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = e\left(\nabla - i\frac{k\vec{\mathbf{v}}}{c}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) dt.$$
(A.26)

Al reescribir la función de Green en una base esférica se obtiene [26]

$$G_0(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}}_t) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(k\,r) h_{\ell}^{(+)}(k\,r_t) Y_{\ell,m}(\Omega_r) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}), \qquad (A.27)$$

donde $h_{\ell}^{(+)}(x) = \mathrm{i}\,h_{\ell}^{(1)}(x)$ es la función esférica de Hankel de orden ℓ [32]. Sustituyendo la Ec. (A.27) en la Ec. (A.26) se tiene que

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = e\left(\nabla - i\frac{k\vec{\mathbf{v}}}{c}\right) \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(k\,r) Y_{\ell,m}\left(\Omega_r\right) \phi_{\ell,m},\tag{A.28}$$

donde

$$\phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} h_{\ell}^+(kr_t) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}) dt.$$
(A.29)

Para calcular las constantes $\phi_{\ell,m}$ de la Ec. (A.29) se calcula la transformada de Fourier de la función de Green en el espacio de frecuencias [31]

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \frac{e^{ik|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|}}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|} dt = \frac{2}{v} K_0 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma}\right) e^{i\omega z/v}, \tag{A.30}$$

donde $R = \sqrt{(x-b)^2 + y^2}$, v la rapidez de electrón y K_0 la función Bessel modificada del segundo tipo de orden cero. A partir de las Ecs. (A.26), (A.28) y (A.30) se puede obtener la ecuaciación

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(k \, r) Y_{\ell,m} \left(\Omega_r\right) \phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{v} K_0 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma}\right) e^{\mathrm{i}\omega z/v},\tag{A.31}$$

y al usar la ortonormalidad de los armónicos esféricos se obtiene

$$\phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{v j_{\ell}(k r)} \int_0^{4\pi} Y_{\ell,m}^*(\Omega_r) K_0\left(\frac{|\omega|R}{v\gamma}\right) e^{i\omega z/v} d\Omega_r. \tag{A.32}$$

Al realizar la integral de la Ec. (A.32) se obtiene [26]

$$\phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \frac{A_{\ell,m}^+}{\omega} K_m \left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right),\tag{A.33}$$

donde K_m es la función Bessel modificada del segundo tipo de orden m, y los coeficientes $A_{\ell,m}^+$ están dados por

$$A_{\ell,m}^{+} = \frac{1}{\beta^{\ell+1}} \sum_{i=m}^{\ell} \frac{i^{\ell-j} (2\ell+1)!! \alpha_{\ell,m}}{\gamma^{j} 2^{j} (l-j)! [(j-m)/2]! [(j+m)/2]!} I_{j,\ell-j}^{\ell,m}, \tag{A.34}$$

con

$$\alpha_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \quad y \quad \beta = \frac{v}{c}.$$
 (A.35)

Los números $I_{j,\ell-j}^{\ell,m}$ se calculan mediante la siguiente relación de recurrencia

$$(\ell - m)I_{i_1, i_2}^{\ell, m} = (2\ell - 1)I_{i_1, i_2 + 1}^{\ell - 1, m} - (\ell + m - 1)I_{i_1, i_2}^{\ell - 2, m}, \tag{A.36}$$

con los valores iniciales $I_{i_1,i_2}^{m-1,m}=0,\,I_{i_1,i_2}^{m-2,m}=0$ y

$$I_{i_1,i_2}^{m,m} = \begin{cases} (-1)^m (2m-1)!! B\left(\frac{i_1+m+2}{2}, \frac{i_2+1}{2}\right), & \text{si } i_2 \text{ es par} \\ 0, & \text{si } i_2 \text{ es impar} \end{cases}, \tag{A.37}$$

y donde B(x,y) es la función beta [32].

A partir de las Ecs. (A.10), (A.11), (A.28) y (A.33), se obtiene

$$\psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}} = (4\pi\epsilon_0) \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{-2\pi(i)^{\ell-1}k}{c\gamma} \frac{B_{\ell,m}}{\ell(\ell+1)} K_m \left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right), \tag{A.38}$$

$$\psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}} = (4\pi\epsilon_0) \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{-4\pi(i)^{\ell-1}kv}{c^2} \frac{m A_{\ell,m}^+}{\ell(\ell+1)} K_m \left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right), \tag{A.39}$$

con

$$B_{\ell,m} = A_{\ell,m+1}^{+} \sqrt{(\ell+m+1)(\ell-m)} - A_{\ell,m-1}^{+} \sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}.$$
 (A.40)

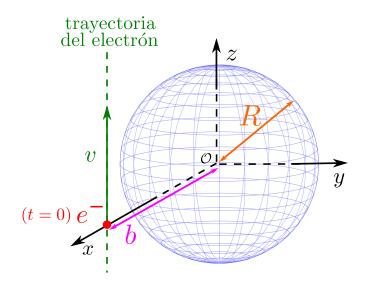
Finalmente, se pueden escribir los campos electromagnéticos externos como

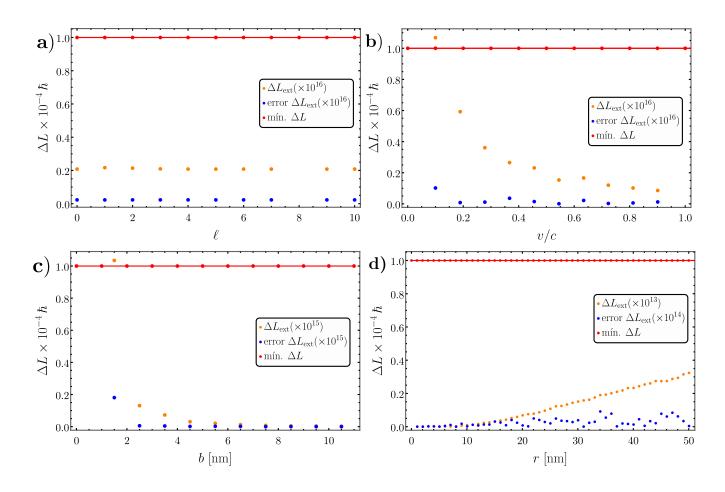
$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathcal{E}_{\ell,m}^{er} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{e\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{e\varphi} \hat{\varphi} \right), \tag{A.41}$$

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathscr{H}_{\ell,m}^{er} \hat{r} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{e\theta} \hat{\theta} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{e\varphi} \hat{\varphi} \right), \tag{A.42}$$

en donde las componentes de los campos externos están mostradas en las Ecs. (2.57)-(2.62) del texto principal.

Apéndice B Transferencia de momento angular debida al campo externo





Referencias

- [1] A. Ashkin. Acceleration and Trapping of Particles by Radiation Pressure. Phys. Rev. Lett., 24(4):156, 1970. [citado en la pág. 11.]
- [2] Arthur Ashkin y James M Dziedzic. Optical trapping and manipulation of viruses and bacteria. *Science*, 235(4795):1517–1520, 1987. [citado en la pág. 11.]
- [3] A. Ashkin. History of optical trapping and manipulation of small-neutral particle, atoms, and molecules. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, 6(6):841–856, 2000. [citado en la pág. 11.]
- [4] O. Custance, R. Perez y S. Morita. Atomic force microscopy as a tool for atom manipulation. *Nat. Nanotechnol.*, 4(12):803–810, 2009. [citado en la pág. 11.]
- [5] K. Dholakia y T. Čižmár. Shaping the future of manipulation. Nat. Photonics, 5(6):335–342, 2011. [citado en la pág. 11.]
- [6] O. M. Maragò, P. H. Jones, P. G. Gucciardi, G. Volpe y A. C. Ferrari. Optical trapping and manipulation of nanostructures. *Nat. Nanotechnol.*, 8(11):807–819, 2013. [citado en la pág. 11.]
- [7] J. M. Romo-Herrera, R. A. Alvarez-Puebla y L. M. Liz-Marzán. Controlled assembly of plasmonic colloidal nanoparticle clusters. *Nanoscale*, 3(4):1304–1315, 2011. [citado en la pág. 11.]
- [8] F. J. G. de Abajo. Momentum transfer to small particles by passing electron beams. *Phys. Rev. B*, 70(11):115422, 2004. [citado en las págs. 11 y 13.]
- [9] P. E. Batson. Motion of Gold Atoms on Carbon in the Aberration-Corrected STEM. *Microsc. Microanal.*, 14(1):89, 2008. [citado en la pág. 11.]
- [10] H. Zheng, U. M. Mirsaidov, L. Wang y P. Matsudaira. Electron Beam Manipulation of Nanoparticles. Nano Lett., 12(11):5644–5648, 2012. [citado en la pág. 11.]
- [11] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua. Plasmonic Nanobilliards: Controlling Nanoparticle Movement Using Forces Induced by Swift Electrons. Nano Lett., 11(8):3388–3393, 2011. [citado en las págs. 11 y 12.]

44 Referencias

[12] V. Oleshko y J. M. Howe. "Electron tweezers" as a Tool for In-situ Manipulation and Processing of Individual Metal Nanoparticles in a Two-Phase Partially Molten Alloy. *Microsc. Microanal.*, 11(S02):1512–1513, 2005. [citado en la pág. 11.]

- [13] V. Oleshko y J. M. Howe. Are electron tweezers possible? *Ultramicroscopy*, 111(11):1599–1606, 2011. [citado en la pág. 11.]
- [14] V. Oleshko y J. M. Howe. Chapter Three Electron Tweezers as a Tool for High-Precision Manipulation of Nanoobjects. volumen 179 de Advances in Imaging and Electron Physics, págs. 203–262. Elsevier, 2013. [citado en la pág. 11.]
- [15] S. Xu, W. Sun, M. Zhang, J. Xu y L. Peng. Transmission electron microscope observation of a freestanding nanocrystal in a Coulomb potential well. *Nanoscale*, 2(2):248–253, 2010. [citado en las págs. 11 y 13.]
- [16] A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, P. E. Batson, P. M. Echenique, A. Rivacoba y J. Aizpurua. Electromagnetic forces on plasmonic nanoparticles induced by fast electron beams. *Phys. Rev. B*, 82(23):235429, 2010. [citado en las págs. 13 y 19.]
- [17] M. J. Lagos, A. Reyes-Coronado, A. Konečná, P. M. Echenique, J. Aizpurua y P. E. Batson. Atto-second and femtosecond forces exerted on gold nanoparticles induced by swift electrons. *Phys. Rev. B*, 93(20):205440, 2016. [citado en la pág. 13.]
- [18] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua. Nanoparticle movement: Plasmonic forces and physical constraints. *Ultramicroscopy*, 123:50–58, 2012. [citado en la pág. 13.]
- [19] J Castrejón-Figueroa, JÁ Castellanos-Reyes y A Reyes-Coronado. Effects of a noncausal electromagnetic response on the linear momentum transfer from a swift electron to a metallic nanoparticle. *Physical Review B*, 104(23):235416, 2021. [citado en la pág. 13.]
- [20] Jesús Castrejón-Figueroa. Transferencia de momento lineal de electrones rápidos a nanopartículas. Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias, UNAM, 2021. [citado en las págs. 13 y 14.]
- [21] F. J. G. de Abajo. Optical excitations in electron microscopy. Rev. Mod. Phys., 82(1):209–275, 2010.
 [citado en las págs. 13 y 14.]
- [22] José Ángel Castellanos-Reyes. Transferencia de momento angular de electrones rápidos a nanopartículas. Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias, UNAM, 2021. [citado en las págs. 14, 19 y 21.]
- [23] J. Á. Castellanos-Reyes, J. Castrejón-Figueroa y A. Reyes-Coronado. Angular dynamics of small nanoparticles induced by non-vortex electron beams. *Ultramicroscopy*, 225:113274, 2021. [citado en la pág. 14.]
- [24] José Ángel Castellanos-Reyes, Jesús Castrejón-Figueroa y Alejandro Reyes-Coronado. Theory and simulations of angular momentum transfer from swift electrons to spherical nanoparticles in scanning transmission electron microscopy. *Physical Review B*, 107(5):054307, 2023. [citado en la pág. 14.]

Referencias 45

[25] M. Quijada, R. D. Muiño, A. G. Borisov, J. A. Alonso y P. M. Echenique. Lifetime of electronic excitations in metal nanoparticles. New J. Phys., 12(5):053023, 2010. [citado en la pág. 13.]

- [26] F. J. García de Abajo. Relativistic energy loss and induced photon emission in the interaction of a dielectric sphere with an external electron beam. *Phys. Rev. B*, 59:3095–3107, Jan 1999. [citado en las págs. 13, 22, 24, 25, 36, 37 y 38.]
- [27] F. J. G. de Abajo y V. D. Giulio. Optical Excitations with Electron Beams: Challenges and Opportunities. ACS Photonics, 8(4):945–974, 2021. [citado en las págs. 13 y 15.]
- [28] A. Rivacoba y P. M. Echenique. Deflection of STEM electrons by dielectric spheres. *Ultramicroscopy*, 26(4):389 392, 1988. [citado en la pág. 13.]
- [29] J. Krehl, G. Guzzinati, J. Schultz, P. Potapov, D. Pohl, J. Martin, J. Verbeeck, A. Fery, B. Büchner y A. Lubk. Spectral field mapping in plasmonic nanostructures with nanometer resolution. *Nat. Commun.*, 9(1):1–6, 2018. [citado en la pág. 13.]
- [30] J. D. Jackson. Classical Electrodynamics. John Wiley & Sons, 2007. [citado en las págs. 15, 16, 21 y 22.]
- [31] C. Maciel-Escudero y A. Reyes-Coronado. Electromagnetic fields produced by a swift electron: A source of white light. Wave Motion, 86:137–149, 2019. [citado en las págs. 22, 37 y 38.]
- [32] M. Abramowitz, I. A. Stegun y R. H. Romer. Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. American Association of Physics Teachers, 1988. [citado en las págs. 23, 29, 38 y 39.]
- [33] F. E. Low. Classical Field Theory: Electromagnetism and Gravitation. John Wiley & Sons, 2008. [citado en las págs. 24, 35 y 36.]
- [34] C. F. Bohren y D. R. Huffman. Absorption and Scattering of Light by Small Particles. John Wiley & Sons, 2008. [citado en la pág. 25.]
- [35] D. Kahaner, C. Moler y S. Nash. Numerical Methods and Software. Prentice-Hall, Inc., 1989. [citado en la pág. 29.]
- [36] György Barton y Gabriel Barton. Elements of Green's functions and propagation: potentials, diffusion, and waves. Oxford University Press, 1989. [citado en la pág. 37.]