

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					
R	Resumen Abstract				
\mathbf{A}					
In	\mathbf{trod}	ucción	11		
1.	Teo	ría y métodos	15		
	1.1.	Conservación del momento angular en electrodinámica	15		
	1.2.	Transferencia de momento angular de un electrón rápido a una nanopartícula	22		
	1.3.	Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula	24		
2.	. Resultados y discusión				
	2.1.	Desarrollo de las densidades espectrales de la transferencia de momento angular	27		
	2.2.	Cálculo semi-analítico de las integrales necesarias para la transferencia de momento angular	29		
	2.3.	Transferencia de momento angular total	30		
3.	Con	aclusiones y trabajo a futuro	33		
	3.1.	Conclusiones	33		
	3.2.	Trabajo a futuro	34		
$\mathbf{A}_{]}$		ice A			
	Mét	todo de los potenciales escalares	35		
$\mathbf{A}_{\mathbf{j}}$	pénd	ice B			

3

Transferencia de momento angular debida al campo externo	41
Referencias	43

	Resumen

Abstract

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 producidas 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 alusión a las pinzas ópticas.

En diversos estudios experimentales sobre pinzas electrónicas, se ha observado que la transferencia de momento angular y lineal del haz de electrones a una NP depende tanto de la velocidad del haz de electrones como del parámetro de impacto —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 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. Por lo tanto, aunque el haz de electrones barre toda la muestra que se observa en el STEM, se puede considerar un parámetro de impacto efectivo respecto a la superficie de la NP.

En la Fig. 2, se presentan resultados reportados en la Ref. [11] que muestran seis imágenes de STEM de una NP de oro de 1.5 nm de diámetro en presencia de otra de 5 nm de diámetro, a diferentes tiempos.

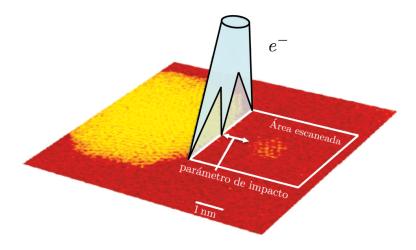


Figura 1: Esquema de la interacción dentro de un STEM entre un haz de electrones con un par de nanopartículas de oro, reproducido y adaptado de la Ref. [11].

En todas las imágenes de la Fig. 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. 2, tomadas con un parámetro de impacto efectivo de 4.5 nm, muestran una interacción atractiva entre el haz y la NP, 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. 2, el parámetro de impacto efectivo es de 1 nm y se observa que la NP se aleja del haz, atravesando la línea punteada blanca en dirección opuesta, y por tanto 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.

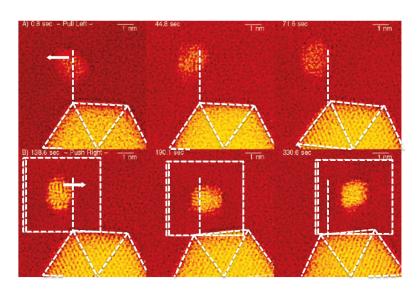


Figura 2: Resultados reproducidos y adaptados de la Ref. [11] donde se observa transferencia de momento angular y lineal de un haz de electrones en un STEM a nanopartículas de oro, soportadas en un sustrato de carbono amorfo.

Para un desarrollo pleno de la técnica de pinzas electrónicas, es conveniente 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 constante alcanzando velocidades de hasta v=0.83c (donde c es la rapidez de la luz). De lo anterior, se deduce que el tiempo de emisión de cada electrón es de $\sim 10^{-8}$ s. Dado que la vida media de las excitaciones dentro de un metal es típicamente $\sim 10^{-14}$ [16], se puede asumir que la NP interactúa con un electrón a la vez [17–19]. Se ha observado que los haces de electrones en estudios de STEM se desvían de una trayectoria recta por ángulos del orden de miliradianes [19–21], 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 rapidez del electrón y b es la distancia entre el centro de la NP y la trayectoria del electrón (parámetro de impacto), como se muestra en la Fig. 3. La respuesta electromagnética de la NP, se puede modelar mediante su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$.

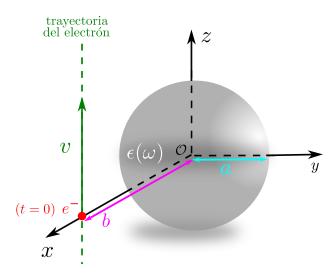


Figura 3: Nanopartícula de radio a, centrada en el origen de coordenadas, modelada mediante una función dieléctrica $\epsilon(\omega)$, en vacío. La trayectoria del electrón (punto marrón), con parámetro de impacto b y viajando a rapidez constante v, se muestra como una línea punteada de color verde.

En la Ref. [19], se aborda la interacción entre haces de electrones y NPs esféricas desde el punto de vista de la mecánica cuántica, concluyendo que una descripción clásica, en lugar de cuántica, del problema es suficiente, siempre y cuando se cumplan las condiciones previamente mencionadas. La interacción entre haces de electrones y NPs esféricas también ha sido estudiada desde la perspectiva de la electrodinámica clásica en trabajos anteriores [8, 15, 22–24]. 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 de la magnética en 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 el cuidado suficiente, este proceso puede dar como resultado una función dieléctrica no causal, es decir, que no satisface las relaciones de Kramers-Kronig. Aunque en las Refs. [8, 15, 22–24] se 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 [25, 26]. En estos trabajos recientes, se muestra que si se elimina el comportamiento no causal de las funciones dieléctricas, no aparece la interacción repulsiva reportada experimentalmente. Es interesante notar que en la Ref. [26] se resuelven de forma semi-analítica las integrales en el espacio de frecuencia, que previamente se resolvían de forma numérica en las Refs. [8, 15, 22–24]. 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 se verían beneficiadas al realizar un estudio teórico 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. [18]), 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 $\vec{\bf p}$, mediante el tensor de polarizabilidad, lo que es válido únicamente para NPs pequeñas [27]. El segundo método resuelve numéricamente las integrales de superficie del tensor de esfuerzos de Maxwell [28, 29] 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. [27–29]. 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, correspondientes a los campos externos producidos por el electrón, 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 [26, 29].

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 1 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 $\epsilon(\omega)$. Posteriormente, 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, partiendo de la conservación de momento angular en electrodinámica. En el Capítulo 2 se presentan los resultados de la tesis, en la que 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 presentan los resultados más relevantes y sus implicaciones, así como el trabajo a futuro que se deriva de los resultados obtenidos.

Teoría y métodos

En este capítulo se emplea el enfoque de la electrodinámica clásica 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. En un trabajo previo de García de Abajo [19] justifica que, bajo las condiciones descritas en la Introducción, no es necesaria una descripción cuántica del fenómeno.

Durante el desarrollo matemático, se presentarán las ecuaciones en el Sistema Internacional (SI) en color **negro**, 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 escribirá como

$$\vec{\mathbf{F}} = (4\pi\epsilon_0) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{r}.$$
 (1.1)

1.1. Conservación del momento angular en electrodinámica

Las ecuaciones de Maxwell son [30]

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

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0, \qquad \nabla \times \vec{\mathbf{B}} = \left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} + (c) \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t}, \qquad (1.2)$$

dende $\vec{\mathbf{E}}$ es el campo eléctrico, $\vec{\mathbf{B}}$ es el campo magnético, $\rho_{\rm tot}$ la densidad de carga total, $\vec{\mathbf{J}}_{\rm tot}$ es la densidad de corriente total, c es la rapidez de la luz, ϵ_0 es la permitivadad del vacío y μ_0 es la permeabilidad del vacío. Pueden ser reescritas en términos de los potenciales ϕ y $\vec{\mathbf{A}}$ como [30]

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t}\right) \phi(\vec{\mathbf{r}}, t) = -\left(4\pi\epsilon_0\right) \frac{\rho_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{r}}, t)}{\epsilon_0},\tag{1.3}$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t}\right) \vec{\mathbf{A}} (\vec{\mathbf{r}}, t) = -\left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} (\vec{\mathbf{r}}, t).$$
(1.4)

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

Durante el desarrollo teórico se utilizará la norma de Lorentz, $\nabla \cdot \vec{\mathbf{A}} + (1/c)\partial_t \phi = 0$, de modo que los campos electromagnéticos, en términos de los potenciales, se escriben como

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},t) = -\nabla\phi(\vec{\mathbf{r}},t) - \left(\frac{1}{c}\right)\frac{\partial}{\partial t}\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}},t), \qquad (1.5)$$

$$\vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \nabla \times \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{r}},t). \tag{1.6}$$

La expresión para la conservación del momento lineal en electrodinámica es [30]

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\mathbf{p}}^{\text{mec}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) + \vec{\mathbf{p}}^{\text{em}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \right] = \nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right), \tag{1.7}$$

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

$$\vec{\mathbf{p}}^{\text{em}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \left(\frac{c}{4\pi}\right) \frac{1}{c^2} \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},t) \times \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}},t)$$
(1.8)

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

$$T_{ij}\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) = \frac{\epsilon_0}{\left(4\pi\epsilon_0\right)} \left[E_i\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) E_j\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) - \frac{\delta_{ij}}{2} E^2\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) \right] + \frac{\mu_0}{\left(4\pi\mu_0\right)} \left[H_i\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) H_j\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) - \frac{\delta_{ij}}{2} H^2\left(\vec{\mathbf{r}},t\right) \right], \quad (1.9)$$

donde $T_{ij}(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la entrada ij de $\overrightarrow{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{r}},t)$, $E_i(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la i-ésima componente del campo eléctrico $\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},t)$, $H_i(\vec{\mathbf{r}},t)$ es la i-ésima componente del campo $\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}},t)$ y δ_{ij} es la delta de Kronecker.

De la Ec. (1.7) se puede deducir la conservación de momento angular en electrodinámica de la siguiente manera

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{mec}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) + \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{em}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \right] = \vec{\mathbf{r}} \times \nabla \cdot \stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{T}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right), \tag{1.10}$$

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

Si se define el 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

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

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

$$= \delta^{nk} \epsilon_{j}^{li} r_{l} \partial_{n} T_{ik} = \epsilon_{j}^{li} r_{l} \partial^{k} T_{ik} = \epsilon_{j}^{li} r_{l} \left(\nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{T}}\right)_{i},$$
(1.11)

de modo que

$$\left(\nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{M}}\right)_{j} = \left(\overrightarrow{\mathbf{r}} \times \nabla \cdot \overrightarrow{\mathbf{T}}\right)_{j}, \tag{1.12}$$

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 antisimétrico $\left(\epsilon_j^{\ ni} = -\epsilon_j^{\ in}\right)$.

Teoría y métodos 17

De las Ecs. (1.10) y (1.12) se escribe la conservación del momento angular como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{mec}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) + \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{em}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \right) = \nabla \cdot \stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{M}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right), \tag{1.13}$$

que es una ecuación local. Para escribir la conservación del momento angular de forma global, se integra la Ec. (1.13) sobre un volumen V delimitado por una superficie S de la siguiente manera

Conservación del momento angular global en electrodinámica clásica

$$\frac{d}{dt} \left[\vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}} (t) + \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} (t) \right] = \oint_{S} \stackrel{\leftrightarrow}{\mathbf{M}} (\vec{\mathbf{r}}, t) \cdot d\vec{\mathbf{S}}, \tag{1.14}$$

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

$$\vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}}(t) = \int_{V} \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{mec}}(\vec{\mathbf{r}}, t) \ dV, \qquad \qquad \mathbf{y} \qquad \qquad \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}(t) = \int_{V} \vec{\boldsymbol{\ell}}^{\text{em}}(\vec{\mathbf{r}}, t) \ dV. \tag{1.15}$$

Es importante mencionar que la superficie de integración S contiene a la NP pero no interseca a la trayectoria del electrón, como se muestra en la Fig. 1.1.

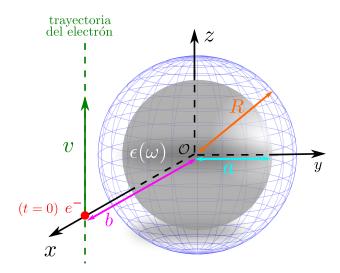


Figura 1.1: Nanopartícula centrada en el origen caracterizada por una respuesta dieléctrica homogénea $\epsilon(\omega)$, encerrada por la superficie de integración S de radio R, junto a la trayectoria del electrón colocada en $\vec{\mathbf{r}} = (0, b, vt)$.

El sistema de estudio consiste en una NP caracterizada por una respuesta dieléctrica homogénea $\epsilon\left(\omega\right)$ centrada en el origen, interactuando con un electrón rápido cuya trayectoria se describe a través de $\vec{\mathbf{r}}=(b,0,vt)$, como se muestra en la Fig. 1.1. Para calcular la transferencia de momento angular (TMA) del electrón a la NP $(\Delta\vec{\mathbf{L}})$, se integra la Ec. (1.14) a lo largo de toda la trayectoria del electrón, o de manera equivalente en el tiempo de la siguiente manera

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}}(t) \ dt = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_{S} \vec{\mathbf{M}} (\vec{\mathbf{r}}, t) \cdot d\vec{\mathbf{S}} \ dt - \Delta \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}, \tag{1.16}$$

donde

$$\Delta \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} dt = \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} (t \to \infty) - \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}} (t \to -\infty). \tag{1.17}$$

El término

$$\vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}(t \to \pm \infty) = \epsilon_0 \mu_0 \int_V \vec{\mathbf{r}} \times \left[\vec{\mathbf{E}} \left(t \to \pm \infty \right) \times \vec{\mathbf{H}} \left(t \to \pm \infty \right) \right] dV, \tag{1.18}$$

es nulo porque en el tiempo $t \to -\infty$ el electrón se encuentra infinitamente lejos y no ha interactuado con la NP, lo que significa que los campos electromagnéticos totales $\{\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{H}}\}$, conformados por la suma de los campos externos $\{\vec{\mathbf{E}}_{\rm ext}, \vec{\mathbf{H}}_{\rm ext}\}$ y esparcidos por la NP $\{\vec{\mathbf{E}}_{\rm scat}, \vec{\mathbf{H}}_{\rm scat}\}$, son nulos $-\vec{\mathbf{E}}(t \to -\infty) = \vec{\mathbf{0}}$ y $\vec{\mathbf{H}}(t \to -\infty) = \vec{\mathbf{0}}$. Por otro lado, para $t \to \infty$, el electrón se encontrará también infinitamente lejos, pero ya habrá interactuado con la NP, lo que resultará en la inducción de distribuciones de cargas y corrientes eléctricas dentro de la NP. Sin embargo, estas distribuciones habrán desaparecido para $t \to \infty$ debido a procesos disipativos. Por tanto $\vec{\mathbf{L}}^{\rm em}(t \to \pm \infty) = 0$.

Entonces

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_{S} \overrightarrow{\mathbf{M}} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) \cdot d\vec{\mathbf{S}} dt, \tag{1.19}$$

o usando notación de índices

$$\Delta L_i = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_{S} \epsilon_i^{\ lj} r_l T_{jk} \left(\vec{\mathbf{r}}, t \right) n^k \, dS \, dt, \tag{1.20}$$

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

Para el cálculo de la transferencia de momento angular es conveniente expresar los campos electromagnéticos en el espacio de frecuencias. Utilizando la siguiente definición de transformada de Fourier

$$\vec{\mathbf{F}}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\mathbf{F}}(t) e^{i\omega t} dt \qquad y \qquad \vec{\mathbf{F}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{\mathbf{F}}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \tag{1.21}$$

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 $\vec{\mathbf{F}}(\omega)^* = \vec{\mathbf{F}}(-\omega)$, donde * denota complejo conjugado. Para calcular la TMA a través de la Ec. (1.20) es importante notar que la dependencia en el tiempo está contenida únicamente en el tensor de esfuerzos de Maxwell $\dot{\vec{\mathbf{T}}}(\vec{\mathbf{r}},t)$. De esta forma, se puede reescribir la integral en el tiempo del producto de campos eléctricos de la siguiente manera

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

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

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

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

$$= \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} \operatorname{Re} \left[E_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{j}^{*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) \right] d\omega. \tag{1.22}$$

Para las componentes del campo $\vec{\mathbf{H}}$ se requiere un proceso análogo.

Teoría y métodos 19

De esta manera se puede reescribir la Ec. (1.20) como

$$\Delta L_i = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \oint_S \epsilon_i^{\ lj} r_l \Im_{jk} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^k \, dS \, d\omega, \tag{1.23}$$

donde se ha definido

$$\dot{\vec{\mathbf{T}}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \operatorname{Re}\left[\frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\vec{\mathbf{E}}^{*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) - \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})}\frac{\vec{\mathbf{I}}}{2}\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\cdot\vec{\mathbf{E}}_{j}^{*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) + \frac{\mu_{0}}{(4\pi\mu_{0})}\vec{\mathbf{H}}_{i}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\vec{\mathbf{H}}_{j}^{*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) - \frac{\mu_{0}}{(4\pi\mu_{0})}\frac{\vec{\mathbf{I}}}{2}\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)\cdot\vec{\mathbf{H}}^{*}(\vec{\mathbf{r}},t)\right],$$
(1.24)

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

$$\mathcal{L}_{i}(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_{S} \epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathfrak{T}_{jk}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) n^{k} dS.$$
 (1.25)

por lo que la TMA se calcula de la siguiente forma

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_0^\infty \vec{\mathcal{L}}(\omega) \ d\omega. \tag{1.26}$$

En coordenadas cartesianas la Ec. (1.25) puede ser escrita como

$$\mathcal{L}_x = \frac{1}{\pi} \left[\oint_S y \, \mathfrak{T}_{zk} \, dS^k - \oint_S z \, \mathfrak{T}_{yk} \, dS^k \right], \tag{1.27}$$

$$\mathcal{L}_y = \frac{1}{\pi} \left[\oint_S z \, \Im_{xk} \, dS^k - \oint_S x \, \Im_{zk} \, dS^k \right], \tag{1.28}$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{1}{\pi} \left[\oint_S x \, \mathfrak{T}_{yk} \, dS^k - \oint_S y \, \mathfrak{T}_{xk} \, dS^k \right]. \tag{1.29}$$

Debido a que el problema de interacción de un electrón rápido interactuando con una NP esférica presenta simetría de reflexión con respecto al plano xz, no puede haber componente de momento lineal transferido en la dirección y [22]. De lo anterior se puede concluir que el momento angular transferido a la NP no puede tener componente x ni z [29]. Por tanto, resulta que solamente 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 [29]

Componente espectral que contribuye a la transferencia de momento angular

$$\mathcal{L}_{y} = \frac{1}{\pi} \oint \sin \theta \left[\cos \varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] dS_{r}, \tag{1.30}$$

Componentes espectrales que no contribuyen a la transferencia de momento angular

$$\mathcal{L}_{x} = \frac{1}{\pi} \oint \sin \theta \left[\cos \varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] dS_{r}, \tag{1.31}$$

$$\mathcal{L}_x = \frac{1}{\pi} \oint \sin^2 \theta \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \, dS_r, \tag{1.32}$$

donde se ha asumido una superficie de integración esférica, como se muestra en la Fig. 1.1.

Dado que los campos $\vec{\mathbf{E}}$ y $\vec{\mathbf{H}}$ que aparecen en la Ec. (1.24) corresponden a los campos totales, suma del campo producido por el electrón y el esparcido por la NP, es posible separar la contribución eléctrica de la magnética en la densidad espectral de momento angular en la Ec. (1.26), de modo que se puede separar el tensor de la siguiente forma

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{T}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{T}}^{E}(\vec{\mathbf{r}},\omega) + \overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{T}}^{H}(\vec{\mathbf{r}},\omega), \qquad (1.33)$$

donde

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{I}}^{E} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \vec{\mathbf{E}}^{*} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) - \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{E}}^{*} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \right]$$
(1.34)

У

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}}^{\mathrm{H}} = \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{H}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \vec{\mathbf{H}}^* (\vec{\mathbf{r}}, \omega) - \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{H}} (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{H}}^* (\vec{\mathbf{r}}, \omega) \right].$$
(1.35)

Dado que se está considerando una superficie s de integración esférica de radio R y a \hat{r}_i como la i-ésima componente del vector unitario radial, la densidad espectral de momento angular $\mathcal{L}_i(\omega)$ se puede escribir como

$$\mathcal{L}_{i}(\omega) = \frac{R^{2}}{\pi} \int_{0}^{4\pi} \left[\epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathcal{T}_{jk}^{E} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} + \epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathcal{T}_{jk}^{H} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} \right] d\Omega, \tag{1.36}$$

donde únicamente falta integrar en el ángulo sólido Ω . En la Ec. (1.36) se observa que la contribución eléctrica está separada de la magnética, de modo que se pueden definir ambas contribuciones como

$$\mathcal{L}_{i}^{E}(\omega) = \frac{R^{2}}{\pi} \int_{0}^{4\pi} \left[\epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathcal{T}_{jk}^{E} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} \right] d\Omega, \tag{1.37}$$

$$\mathcal{L}_{i}^{\mathrm{H}}(\omega) = \frac{R^{2}}{\pi} \int_{0}^{4\pi} \left[\epsilon_{i}^{\ lj} r_{l} \mathcal{T}_{jk}^{\mathrm{H}} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} \right] d\Omega. \tag{1.38}$$

Dado que 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

$$\vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}, \qquad \qquad \mathbf{y} \qquad \qquad \vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{H}}_{\text{scat}}, \tag{1.39}$$

donde $\vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}}$ y $\vec{\mathbf{H}}_{\mathrm{ext}}$ son los campos electromagnéticos externos —producidos por el electrón—, y $\vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{scat}}$ y $\vec{\mathbf{H}}_{\mathrm{scat}}$ son los campos esparcidos por la NP. Se reescribe la componente eléctrica del tensor de la Ec. (1.24)

Teoría y métodos 21

como

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

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

$$- \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} \right) \right], \tag{1.40}$$

donde la componente eléctrica del tensor de esfuerzos se escribe como

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E} = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{ss} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{int} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{E}_{ee}, \tag{1.41}$$

con

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathfrak{I}}^{E}_{ss} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{scat} \vec{\mathbf{E}}_{scat}^{*} - \frac{\dot{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{scat} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{scat}^{*} \right],$$
(1.42)

$$\mathring{\mathbf{T}}^{\mathrm{E}}_{\mathrm{ee}} = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}}^* - \frac{\dot{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}}^* \right],$$
(1.43)

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{\text{int}}^{E} = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{\text{se}}^{E} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{\text{es}}^{E}, \tag{1.44}$$

donde

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{J}}^{\mathrm{E}}_{\mathrm{es}} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{scat}}^{*} - \frac{\overrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\mathrm{scat}}^{*} \right], \tag{1.45}$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{\text{se}}^{E} = \frac{\epsilon_{0}}{(4\pi\epsilon_{0})} \operatorname{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} - \frac{\dot{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^{*} \right].$$
(1.46)

Análogamente, al hacer la sustitución $\epsilon_0 \to \mu_0$ y $\vec{\mathbf{E}} \to \vec{\mathbf{H}}$ en las Ecs. (1.40)-(1.46), se obtienen las contribuciones magnéticas al tensor $\dot{\vec{T}}$, denotadas por $\dot{\vec{T}}_{ij}^H$ donde ij toman los valores {e, s}.

Se puede interpretar a \mathring{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 existiera NP, nada alteraría el movimiento del electrón, por lo que no perdería ni cedería energía, momento lineal ni momento angular ($\Delta L = 0$) [29]. En este caso los campos electromagnéticos esparcidos serían nulos, por lo que la única contribución al momento angular provendría de la componente \mathring{T}_{ee} . Por tanto, de manera general, se concluye que la contribución al momento angular transferido debido a \mathring{T}_{ee} es nula. También es conveniente mencionar que la componente \mathring{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), así como de los esparcidos por la NP.

1.2. 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. 1.1), 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]

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},t) = (4\pi\epsilon_0) \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma \left[\vec{\mathbf{R}} + (z - vt)\hat{z}\right]}{\left[R^2 + \gamma^2 (z - vt)^2\right]^{3/2}},$$
(1.47)

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},t) = (4\pi) \frac{-e}{4\pi} \frac{\gamma \vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{R}}}{\left[R^2 + \gamma^2 (z - vt)^2\right]^{3/2}},\tag{1.48}$$

en donde c es la rapidez 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 $\vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{R}} = v \left[(x - b)\hat{y} - y\hat{x} \right]$. También se pueden calcular los campos electromagnéticos externos en función de la frecuencia mediante una transformada de Fourier de las Ecs. (1.47) y (1.48) [31]:

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = (4\pi\epsilon_0) \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega}{v^2 \gamma} e^{i\omega(z/v)} \left\{ \text{sign}(\omega) K_1 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma} \right) \hat{R} - \frac{i}{\gamma} K_0 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma} \right) \hat{z} \right\},$$
(1.49)

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = (4\pi) \frac{-e}{4\pi} \frac{2e}{vc\gamma} |\omega| e^{i\omega z/v} K_1 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma}\right) \hat{v} \times \hat{R}, \tag{1.50}$$

que son expresiones cerradas con simetría cilíndrica. Dado que para el cálculo de la TMA son necesarios 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]

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = e\left(\nabla - i\frac{k\vec{\mathbf{v}}}{c}\right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) dt, \tag{1.51}$$

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

$$G_0\left(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t\right) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ik|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|}}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t|},\tag{1.52}$$

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 [17]

$$G_0(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) h_{\ell}^+(kr_t) Y_{\ell,m}(\Omega_r) Y_{\ell,m}(\Omega_{r_t})^*, \tag{1.53}$$

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. (1.53) en la Ec. (1.51), se obtiene

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}},t) = \left(\nabla - i\frac{k\vec{\mathbf{v}}}{c}\right) \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \phi_{\ell,m}, \tag{1.54}$$

donde

$$\phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} h_{\ell}^+(kr_t) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}) dt.$$
 (1.55)

En el Apéndice A se muestran los detalles del cálculo analítico de la Ec. (1.55). Entonces, el campo electromagnético externo en representación multipolar esférica se escribe como:

Expansión multipolar del campo electromagnético externo producido por el electrón

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{er}} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} \hat{\varphi} \right), \tag{1.56}$$

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{er}} \hat{r} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} \hat{\theta} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} \hat{\varphi} \right), \tag{1.57}$$

donde

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{er}} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr}, \qquad (1.58)$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} = -e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(kr) P_{\ell}^{m}(\cos\theta) - e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \qquad (1.59)$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} = i e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} j_{\ell}(kr) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + i e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \qquad (1.60)$$

У

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{er}} = e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr}, \tag{1.61}$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(kr) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \tag{1.62}$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} = -i e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} j_{\ell}(kr) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + i e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \tag{1.63}$$

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

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

$$D_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}},$$
(1.64)

$$D_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}},$$
(1.65)

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

Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula 1.3.

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

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{0}},\tag{1.66}$$

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{0}}.\tag{1.67}$$

La solución de las Ecs. (1.66) y (1.67) puede ser escrita como [33]

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla \psi^{\mathcal{L}} + \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathcal{M}} - \frac{\mathrm{i}}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathcal{E}}, \tag{1.68}$$

$$\vec{\mathbf{H}} = -\frac{\mathrm{i}}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^M - \vec{\mathbf{L}} \psi^{\mathrm{E}}, \tag{1.69}$$

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 mostrado en la Fig. 1.1, como [17]

$$\psi^{\text{E,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}},$$
(1.70)

$$\psi^{\text{E,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell} (kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \qquad (1.71)$$

$$\psi^{\text{E,scat}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} h_{\ell}^{+}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_{r}) \psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}}, \tag{1.72}$$

$$\psi^{\text{E,scat}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} h_{\ell}^{+}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_{r}) \psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}}.$$
(1.73)

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 Teoría y métodos 25

escalares electromagnéticos externos de la siguiente manera [17]

$$\psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}} = t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \qquad (1.74)$$

$$\psi_{\ell,m}^{\text{M,scat}} = t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \qquad (1.75)$$

$$\psi_{\ell,m}^{\text{M,scat}} = t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \tag{1.75}$$

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 $t_\ell^{\rm M}$ 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]

$$t_{\ell}^{E} = \frac{-j_{\ell}(x_{0}) \left[x_{i} j_{\ell}(x_{i})\right]' + \epsilon_{i} j_{\ell}(x_{i}) \left[x_{0} j_{\ell}(x_{0})\right]'}{h^{+}(x_{0}) \left[x_{i} j_{l}(x_{i})\right]' - \epsilon_{i} j_{l}(x_{i}) \left[x_{0} h_{\ell}^{+}(x_{0})\right]'},$$
(1.76)

$$t_{\ell}^{\mathrm{M}} = \frac{x_{i}j_{\ell}(x_{0})j_{\ell}'(x_{i}) + x_{0}j_{\ell}'(x_{0}))j_{\ell}(x_{i})}{x_{i}h_{\ell}^{+}(x_{0})j_{\ell}'(x_{i}) - x_{0}h_{\ell}^{+'}(x_{0})j_{\ell}(x_{i})},$$
(1.77)

donde $x_0 = ka$ y $x_i = ka\sqrt{\epsilon_i}$, con a el radio y ϵ_i la función dieléctrica de la NP, respectivamente. La prima en las Ecs. (1.76) y (1.77) denota la derivada de la función respecto de su argumento. Sustituyendo los potenciales escalares esparcidos de las Ecs. (1.74) y (1.75) en las Ecs. (1.68) y (1.69) se obtiene

Expansión multipolar del campo electromagnético esparcido por la NP

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathscr{E}_{\ell,m}^{\text{sr}} \hat{r} + \mathscr{E}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} \hat{\theta} + \mathscr{E}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} \hat{\varphi} \right), \tag{1.78}$$

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{scat}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{sr}} \hat{r} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} \hat{\theta} + \mathscr{H}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} \hat{\varphi} \right), \tag{1.79}$$

donde

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{sr}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{+} (k_{0}r)}{k_{0}r}, \tag{1.80}$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\theta} = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{+} (k_{0}r) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+} (k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+} (k_{0}r) \right], \tag{1.81}$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\varphi} = \mathrm{i} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} h_{\ell}^{+} (k_{0}r) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + \mathrm{i} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+} (k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+} (k_{0}r) \right], \tag{1.82}$$

у

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{sr}} = e^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{+} (k_{0}r)}{k_{0}r}, \tag{1.83}$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\theta} = e^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{+} (k_{0}r) P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - e^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+} (k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+} (k_{0}r) \right], \tag{1.84}$$

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{s}\varphi} = -\mathrm{i} e^{\mathrm{i}m\varphi} D_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} h_{\ell}^{+} (k_{0}r) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^{m} (\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^{m} (\cos\theta) \right] + \mathrm{i} e^{\mathrm{i}m\varphi} C_{\ell,m}^{\mathrm{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell} (\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+} (k_{0}r)}{k_{0}r} - h_{\ell+1}^{+} (k_{0}r) \right], \tag{1.85}$$

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

$$C_{\ell,m}^{\text{scat}} = \mathrm{i}^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\mathrm{M}} \psi_{\ell,m}^{\mathrm{M,ext}},$$
 (1.86)

$$D_{\ell,m}^{\text{scat}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}.$$
 (1.87)

Una vez calculado el campo electromagnético total, se puede calcular el tensor $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}$ dado por la Ec. (1.24), y así calcular la densidad espectral de TMA, dada por la Ec. (1.25):

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

Resultados y discusión

En este capítulo se presentan los resultados de las expresiones analíticas que describen la contribución espectral de la transferencia de momento angular (TMA) en la interacción entre un electrón rápido y una NP esférica. En particular, 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 encierra la NP.

Cabe mencionar que para obtener información completa del comportamiento de la NP, las expresiones mostradas al final de la sección en las Ecs. (2.37)-(2.39) 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 la integración [35].

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

A partir de la conservación de momento angular en electrodinámica, Ec. (1.19), transformando al espacio de frecuencias se obtiene la Ec. (1.23)

$$\Delta L_{i} = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} \oint_{S} \epsilon_{i}^{lj} r_{l} \Im_{jk} \left(\vec{\mathbf{r}}, \omega \right) n^{k} dS d\omega,$$

donde se ha definido la densidad espectral de momento angular en la Ec. (1.25) como

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

dando como resultado la TMA en términos de la densidad espectral \mathcal{L} (1.26)

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

Desarrollando las componentes x, y y z de la densidad espectral \mathcal{L} , escritas en las Ecs. (1.30), (1.31)

y(1.32), se obtiene

$$\mathcal{L}_x = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin\theta \left[\sin\varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} + \cos\theta \cos\varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] \, d\varphi \, d\theta, \tag{2.1}$$

$$\mathcal{L}_{y} = \frac{R^{3}}{\pi} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin \theta \left[\cos \varphi \, \mathfrak{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \, \mathfrak{T}_{\varphi r} \right] \, d\varphi \, d\theta, \tag{2.2}$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \, \Im_{\varphi r} \, d\varphi \, d\theta, \tag{2.3}$$

donde

$$\mathfrak{I}_{\theta r} = \operatorname{Re}\left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} E_{\theta}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) E_r^*\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} H_{\theta}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) H_r^*\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right)\right],\tag{2.4}$$

$$\mathfrak{I}_{\varphi r} = \operatorname{Re}\left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} E_{\varphi}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) E_r^*\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} H_{\varphi}\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right) H_r^*\left(\vec{\mathbf{r}},\omega\right)\right].$$
(2.5)

Se puede separar $E_i = E_i^{\text{ext}} + E_i^{\text{scat}}$ y $H_i = H_i^{\text{ext}} + H_i^{\text{scat}}$, 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 función de las sumas multipolares expresadas en la Ecs. (1.56) y (1.78), de la siguiente manera

$$E_{\alpha}^{\mathrm{a}}(\vec{\mathbf{r}},\omega) E_{r}^{\mathrm{b}*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\alpha} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*}, \tag{2.6}$$

$$H_{\alpha}^{\mathrm{a}}(\vec{\mathbf{r}},\omega)H_{r}^{\mathrm{b}*}(\vec{\mathbf{r}},\omega) = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\alpha} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*}, \tag{2.7}$$

donde a y b pueden tomar los valores de «scat» (denotando componentes de campo esparcido) o de «ext» (componentes de campo externo), y donde α corresponde a 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

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ -C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} m \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} - D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} \right. \\
\times \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right] \right\} \ell'(\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi}, \quad (2.8)$$

donde $k = \omega/c$, P_{ℓ}^m es la función asociada de Legendre de grado ℓ y orden m, los coeficientes $C_{\ell,m}^a$ y $D_{\ell,m}^a$ están definidos en las Ecs. (1.64), (1.65), (1.86) y (1.87), $Z_{\ell}^s = h_{\ell}^+(kr)$ para el campo esparcido, y $Z_{\ell}^e = j_{\ell}(kr)$ para el campo externo, y se ha definido:

$$f_{\ell}^{a} = (\ell+1)\frac{Z_{\ell}^{a}}{kr} - Z_{\ell+1}^{a}.$$
 (2.9)

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

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} m \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} - C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} \right. \\
\times \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right] \right\} \ell'(\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi}. \tag{2.10}$$

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

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi}\mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (\ell-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}}{\sin \theta} \right] + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b**} m \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right\} i \ell'(\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi},$$
(2.11)

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

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi}\mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} = \left\{ -D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} \left[(\ell+1) \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (\ell-m+1) \frac{P_{\ell+1}^{m} P_{\ell'}}{\sin \theta} \right] + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b**} m \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kr} \frac{P_{\ell}^{m} P_{\ell'}^{m'}}{\sin \theta} \right\} i \ell'(\ell'+1) e^{i(m-m')\varphi}.$$
(2.12)

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

Las integrales en φ se pueden calcular teniendo en cuenta que

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \cos\varphi \, d\varphi = \pi \left(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'} \right), \tag{2.13}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \sin\varphi \, d\varphi = i\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right), \tag{2.14}$$

donde $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker y para calcular las integrales en θ se definen las siguientes cantidades

$$IM_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) x \, dx, \tag{2.15}$$

$$IU_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}},$$
(2.16)

$$IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx, \qquad (2.17)$$

$$IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} = \int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx, \qquad (2.18)$$

que se pueden calcular mediante cuadraturas Gaussianas [35], que dan resultados exactos al ser utilizadas para integrar polinomios¹. Para el caso particular en el que solo se integran dos funciones asociadas de Legendre, se utiliza la relación de ortogonalidad [32]

$$\int_{-1}^{1} P_{\ell}^{m}(x) P_{\ell'}^{m}(x) dx = \Delta_{\ell\ell'} \quad \text{con} \quad \Delta_{\ell\ell'} = \frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!} \delta_{\ell\ell'}.$$
 (2.19)

2.3. Transferencia de momento angular total

Para obtener la TMA, es necesario integrar la densidad espectral \mathcal{L} sobre el espacio de frecuencias. Para calcular la densidad espectral, es necesario resolver las integrales de superficie sobre el cascarón esférico S que encierra a la NP (ver Ecs. (2.1)-(2.3)). Por tanto, se requiere calcular la integral de superficie de las componentes $\mathcal{T}_{\theta r}$ y $\mathcal{T}_{\varphi r}$, descritos en las Ecs. (2.4) y (2.5). Al sustituir las Ecs. (2.6) y (2.7) en las Ecs. (2.4) y (2.5) se obtiene

$$\mathfrak{I}_{\theta r} = \sum_{a,b} \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \operatorname{Re} \left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathscr{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathscr{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathscr{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathscr{H}_{\ell',m'}^{br*} \right],$$
(2.20)

$$\mathfrak{I}_{\varphi r} = \sum_{a,b} \sum_{\ell m} \sum_{\ell' m'} \operatorname{Re} \left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathscr{E}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathscr{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathscr{H}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathscr{H}_{\ell',m'}^{br*} \right],$$
(2.21)

donde la suma sobre a, b considera las interacciones \mathcal{T}_{ss} , \mathcal{T}_{ee} , \mathcal{T}_{es} y \mathcal{T}_{se} , descritas en las Ecs. (1.42)-(1.46).

Las integrales de los términos cruzados en la contribución multipolar al tensor $\dot{\mathcal{T}}$ de los campos electromagnéticos mostrada en en las Ecs. (2.20) y (2.21) se escriben como

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} \sin \varphi \, d\Omega = i\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ -C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\
\times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.22)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \sin \varphi \, d\Omega = i\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\
\times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.23)$$

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

$$\times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.24)$$

¹Debe tenerse en cuenta que solo las funciones asociadas de Legendre P_{ℓ}^{m} de orden m par son polinomios, debido al factor $(1-x^2)^{m/2}$ que las acompaña. Por lo anterior, solo las integrales pares en m se calcularán de forma exacta.

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,0} \mathcal{H}_{\ell,m'}^{br*} \cos \varphi \, d\Omega = \pi \left(\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ D_{\ell,m}^{a} C_{\ell,m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - C_{\ell,m}^{a} C_{\ell,m'}^{b*} \frac{f_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\ \times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.25)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{E}_{\ell,m'}^{br*} \cos \theta \sin \varphi \, d\Omega = -\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell,m'}^{b*} \frac{Z_{\ell}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \left[(\ell+1) I V_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) I W_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.26)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{b*} \cos \theta \sin \varphi \, d\Omega = -\pi \left(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ -D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.27)$$

$$- (\ell-m+1) I W_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right\} + C_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.27)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{b*} \cos \theta \cos \varphi \, d\Omega = i \pi \left(\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.28)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{b*} \cos \theta \cos \varphi \, d\Omega = i \pi \left(\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ -D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.28)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{b*} \cos \theta \cos \varphi \, d\Omega = i \pi \left(\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'} \right) \left\{ -D_{\ell,m}^{a} C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.28)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{b*} \sin \theta \, d\Omega = i 2\pi \, \delta_{mm'} \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \left[(\ell+1) I M_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell'-\ell'+1), \qquad (2.29)$$

$$\int_{0}^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a,\omega} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{b*} \sin \theta \, d\Omega = i 2\pi \, \delta_{mm'} \left\{ C_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \left[(\ell+1) I M_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell'(\ell'+1), \qquad (2.29)$$

$$- (\ell-m+1) \Delta_{\ell+1,\ell'} \right] + D_{\ell,m}^{a} D_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_{\ell'}^{a} Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \Delta_{\ell'} \right\} \ell'(\ell'+1), \qquad (2.30)$$

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

y definiendo las siguientes cantidades

$$IS_{\ell m\ell'm'}^{\mathrm{a}\theta\mathrm{br}} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*} \right) \sin\varphi \, d\Omega, \tag{2.32}$$

$$IC_{\ell m\ell'm'}^{\mathrm{a}\theta\mathrm{br}} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}\,*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}\,*} \right) \cos\varphi \, d\Omega, \tag{2.33}$$

$$ICS_{\ell m\ell'm'}^{\text{a}\varphi\text{br}} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{a}\varphi} \mathcal{E}_{\ell,m'}^{\text{br}*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{a}\varphi} \mathcal{H}_{\ell,m'}^{\text{br}*} \right) \cos\theta \sin\varphi \, d\Omega, \tag{2.34}$$

$$ICC_{\ell m\ell'm'}^{a\varphi br} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \right) \cos\theta \cos\varphi \, d\Omega, \tag{2.35}$$

$$IS_{\ell m\ell'm'}^{\mathrm{a}\varphi\mathrm{br}} = \frac{R^3}{\pi} \int_0^{4\pi} \left(\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathscr{E}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\varphi} \mathscr{E}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathscr{H}_{\ell,m}^{\mathrm{a}\varphi} \mathscr{H}_{\ell',m'}^{\mathrm{br}*} \right) \sin\theta \, d\Omega, \tag{2.36}$$

se pueden reescribir las Ecs. (2.1), (2.2) y (2.3) como

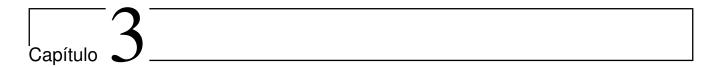
$$\mathcal{L}_x = \sum_{\ell m} \sum_{\ell' m'} \left(I S_{\ell m \ell' m'}^{a\theta br} + I C C_{\ell m \ell' m'}^{a\varphi br} \right), \tag{2.37}$$

$$\mathcal{L}_{y} = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \left(I C_{\ell m \ell' m'}^{a\theta br} - I C S_{\ell m \ell' m'}^{a\varphi br} \right), \tag{2.38}$$

$$\mathcal{L}_z = \sum_{\ell m} \sum_{\ell' m'} I S_{\ell m \ell' m'}^{\text{a}\varphi \text{br}}.$$
 (2.39)

Para verificar que las Ecs. (2.37)-(2.39) son correctas, se comprueba su validez en el caso que solo intervienen los campos electromagnéticos del electrón, los cuales deben dar como resultado cero para la TMA. En el Apéndice B se detalla el cálculo de $\Delta L_{\rm ext}$, que corresponde exclusivamente al efecto del campo electromagnético generado por el electrón, de manera que solo intervienen los campos externos en el cálculo. Al obtener resultados que se anulan, se fortalece la confianza en la validez de las expresiones semi-analíticas, presentadas en las Ecs. (2.37)-(2.39), utilizadas para calcular la TMA.

Las Ecs. (2.37)-(2.39) proporcionan expresiones cerradas y exactas para las densidades espectrales \mathcal{L} , las cuales se calculaba anteriormente de forma numérica. Al contar con soluciones analíticas, se pueden integrar las Ecs. (2.37)-(2.39) en el espacio de frecuencias para calcular la TMA. Aunque la integral de frecuencias se realice numéricamente, por ejemplo, mediante la cuadratura de Gauss-Kronrod, esta metodología ha demostrado ser suficiente para realizar cálculos para NPs de hasta 50 nm de radio en el caso de la transferencia de momento lineal. Por tanto, se espera que esta metodología resulte adecuada para realizar cálculos análogos para el caso angular.



Conclusiones y trabajo a futuro

3.1. Conclusiones

En esta tesis se ha presentado un análisis teórico detallado de la transferencia de momento angular (TMA) de un haz de electrones a una nanopartícula (NP) esférica 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 $\vec{\mathcal{L}}$ en todo el espacio de frecuencias. Anteriormente, empleando otra metodología de cálculo numérico basado en cubaturas, solamente se ha podido estudiar la TMA para NPs de hasta 10 de radio para NPs modeladas a partir de una función dieléctrica dada por el modelo de Drude, o bien de hasta 5 nm de radio para NPs hechas de materiales plasmónicos como oro, bismuto y plata. Se estima que la metodología presentada en esta tesis permitirá 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.

También se ha implementado un código en lenguaje C que calcula la contribución del campo electromagnético externo del electrón a la transferencia de momento angular (la cual es cero), a modo de prueba de las expresiones obtenidas. Se realizaron los cálculos de $\Delta \vec{\mathbf{L}}$ en función del parámetro de impacto, de la rapidez del electrón y del radio de la superficie esférica de integración. Al obtener siempre resultados que se anulan, se ha ganado confianza en las soluciones semi-analíticas.

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 poderosa 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.

3.2. Trabajo a futuro

En esta tesis se ha llevado a cabo una investigación teórica sobre la interacción entre el campo electromagnético generado por un electrón rápido y una nanopartícula. Como resultado de esta investigación, se han obtenido expresiones semi-analíticas que permitirán el cálculo eficiente de la TMA del haz de electrones a la NP. Estas expresiones podrán utilizarse para el cálculo de la TMA en nanopartículas grandes, de hasta 50 nm de radio, compuestas por materiales plasmónicos y dieléctricos. Se pretende ampliar el código en lenguaje C para calcular tanto los campos electromagnéticos externos generados por el electrón como los campos esparcidos por la nanopartícula. Esto permitirá programar las integrales necesarias para obtener la TMA total, que incluye distintas contribuciones, como la interacción ext-ext (producida solo por el campo electromagnético del electrón), la interacción electrón-NP y la reacción de radiación (originada solo por el campo esparcido por la nanopartícula).

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 que caracterice la respuesta electromagnética del material del que está hecha la nanopartícula. Para poner a prueba el nuevo código, se pueden comparar los resultados con los obtenidos previamente para el caso de NPs pequeñas, de hasta 5 nm de radio, para diferentes materiales. Posteriormente, se podrán extender los resultados para nanopartículas más grandes de hasta 50 nm de radio, analizando la TMA en función de los parámetros relevantes del problema: parámetro de impacto y rapidez de los electrones..

Por último, se propone explorar el comportamiento de la TMA utilizando funciones dieléctricas espacialmente no locales. Esto se debe a que experimentalmente se ha observado una interacción atractiva que aún no ha podido explicarse con los modelos con los que se cuentan 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 un papel importante.

Apéndice A

Método de los potenciales escalares

En el Capítulo 1 se aborda la teoría y los métodos utilizados para calcular la transferencia de momento angular (TMA) de un electrón rápido a una nanopartícula (NP) esférica. Debido a la simetría esférica de la respuesta de la NP, es necesario expresar los campos electromagnéticos del electrón en términos de una solución en base esférica. En este contexto, se presenta el método de los potenciales escalares, el cual se basa en una identidad vectorial para el campo electromagnético, la implementación de tres operadores diferenciales vectoriales y la definición de tres funciones escalares para construir dicha solución.

Para obtener la solución buscada, se define 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. (1.2), se obtiene

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

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

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]

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

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

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

en donde cada potencial 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 como¹

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

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

En el problema de interés para este trabajo se considera un 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 eléctrica y magnética se pueden expresar en términos de una base esférica de la siguiente manera [17]

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

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

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

¹En el trabajo original de García de Abajo, se hace la suposición de que los campos electromagnéticos están en el vacío; i.e. $k = \omega/c$.

parámetro de impacto del electrón medido desde el centro de la NP.

Aplicando ahora la transformada de Fourier a las Ecs. (1.3) y (1.4) se obtiene

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

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

y usando el hecho de que $\vec{\mathbf{J}} = \rho \vec{\mathbf{v}}$ y $\mu_0 \epsilon_0 c^2 = 1$ se obtiene

$$\phi(\vec{\mathbf{q}},\omega) = (4\pi\epsilon_0) \frac{1}{q^2 - \omega^2/c^2} \frac{\rho_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{q}},\omega)}{\epsilon_0},$$
(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. (1.5) 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 que 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. (1.3) se obtiene la siguiente ecuación

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

donde $k = \omega/c$ es el número de onda en el vacío y la solución para $\phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ se escribe como [17, 31, 36]

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

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

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

con

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

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 [17]

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

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 ecuación

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

y al usar la ortonormalidad de los armónicos esféricos

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

Al realizar la integral de la Ec. (A.32) se obtiene [17]

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

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

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

donde el doble signo de admiración!! corresponde al doble factorial y donde

$$\alpha_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \quad y \quad \beta = \frac{v}{c}.$$
 (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 corresponden las Ecs. (1.58)-(1.63) del texto principal.

Apéndice B Transferencia de momento angular debida al campo externo

Este apéndice presenta los resultados de la transferencia de momento angular (TMA) debida exclusivamente al campo electromagnético de un electrón rápido, sin ninguna nanopartícula (NP) presente. En la Fig. B.1 se muestra el sistema de estudio, que consta de una superficie de integración esférica S que encierra vacío, junto con la trayectoria del electrón colocada en $\vec{\bf r}=(b,0,vt)$.

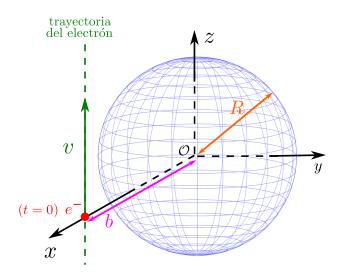


Figura B.1: Superficie de integración S de radio R, junto a la trayectoria del electrón colocada en $\vec{\mathbf{r}} = (0, b, vt)$.

Para comparar los órdenes de magnitud, se utilizará el valor más pequeño reportado para la TMA $(\Delta L_{\rm min} \sim 10^{-4}\hbar)$ [27–29], el cual se usará como referencia en la TMA debida al campo externo calculada en este apéndice. También se compararán los resultados obtenidos con el error numérico de la cuadratura de Gauss-Kronrod [35].

En la Fig. B.2a) se presenta la TMA en función del orden multipolar ℓ , manteniendo constante el radio de la NP a=1 nm, el parámetro de impacto b=5.5 nm y la rapidez del electrón $v=0.5\,c$. Los puntos se unen con una línea continua para una mejor visualización. Se observa que la TMA es considerablemente más pequeña que el valor mínimo reportado ($\Delta L_{\rm min} \sim 10^{-4}\hbar$) por 16 órdenes de magnitud, y que el error numérico es 17 órdenes de magnitud más pequeño que $\Delta L_{\rm min}$, lo que se equipara a la TMA en este caso. En las subfiguras subsecuentes se consideraron hasta el orden multipolar $\ell=10$ para realizar los cálculos.

La Fig. B.2b) muestra la TMA en función de la rapidez del electrón, manteniendo constante el radio de la NP a=1 nm y el parámetro de impacto b=5.5 nm. Se puede observar que, para velocidades pequeñas, la TMA crece abruptamente, pero sigue siendo 16 órdenes de magnitud más pequeña que ΔL_{\min} en cualquier velocidad. Además, el error numérico nuevamente está muy cercano al valor de ΔL . En la Fig. B.2c) se presenta la TMA en función del parámetro de impacto, manteniendo constante el radio de la NP a=1 nm y la rapidez del electrón $v=0.5\,c$. Para parámetros de impacto pequeños, la TMA crece abruptamente, pero sigue siendo 15 órdenes de magnitud más pequeña que ΔL_{min} sin importar la cercanía del electrón a la NP. También se observa que el error numérico está muy cerca del valor de ΔL .

Por último, en la Fig. B.2d) se muestra la TMA en función del radio R de la superficie de integración S, manteniendo constante el radio de la NP a=1 nm, el parámetro de impacto b=5.5 nm y la rapidez del electrón $v=0.5\,c$. Se puede observar que para velocidades pequeñas la TMA crece abruptamente, pero sigue siendo 16 órdenes de magnitud más pequeña que ΔL_{min} en cualquier velocidad y el error numérico permanece cercano al valor de ΔL .

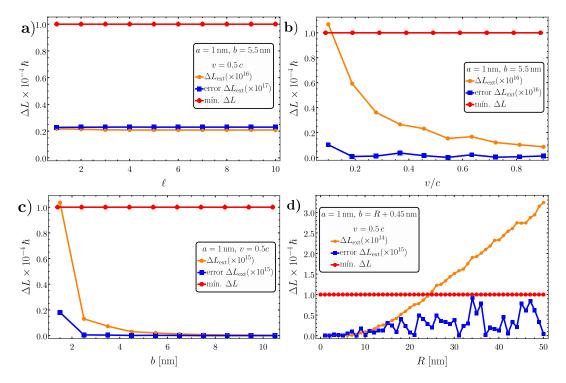


Figura B.2: Resultados del cálculo de la transferencia de momento angular, debida al campo externo del electrón, unidos por una línea continua como ayuda visual **a**) en función de el orden multipolar ℓ , con a=1 nm y b=5.5 nm; **b**) en función de la rapidez del electrón v, con a=1 nm y b=5.5 nm; **c**) en función del parámetro de impacto, con a=1 nm y v=0.5 c nm; y **d**) en función del radio R de la superficie de integración S, con a=1 nm y b=R+0.45 nm, donde se ha tenido cuidado de que la superficie de integración no contenga la trayectoria del electrón.

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, 13 y 14.]
- [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, 13 y 14.]
- [16] 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.]
- [17] 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, 38 y 39.]
- [18] 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.]
- [19] 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.]
- [20] A. Rivacoba y P. M. Echenique. Deflection of STEM electrons by dielectric spheres. *Ultramicroscopy*, 26(4):389 392, 1988. [citado en la pág. 13.]
- [21] 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.]
- [22] 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, 14 y 19.]
- [23] 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 las págs. 13 y 14.]
- [24] 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 las págs. 13 y 14.]
- [25] 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. 14.]

Referencias 45

[26] Jesús Castrejón-Figueroa. Transferencia de momento lineal de electrones rápidos a nanopartículas. Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias, UNAM, 2021. [citado en la pág. 14.]

- [27] 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 las págs. 14 y 41.]
- [28] 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 las págs. 14 y 41.]
- [29] 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, 21 y 41.]
- [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 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, 30, 38 y 39.]
- [33] F. E. Low. Classical Field Theory: Electromagnetism and Gravitation. John Wiley & Sons, 2008. [citado en las págs. 24 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 las págs. 27, 30 y 41.]
- [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. 38.]