



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS**

**TRANSFERENCIA DE MOMENTO LINEAL DE  
ELECTRONES RÁPIDOS A NANOPARTÍCULAS  
DIELÉCTRICAS**

**TESIS**

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

**PRESENTA:**

**JOSÉ ÁNGEL CASTELLANOS REYES**

**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 2017**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**

**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



*A Brenda, Milo y Kenji,  
los amores de mi vida*



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>9</b>
<b>Resumen</b>	<b>11</b>
<b>Abstract</b>	<b>13</b>
<b>1. Introducción y antecedentes</b>	<b>15</b>
1.1. Antecedentes . . . . .	16
<b>2. Teoría</b>	<b>23</b>
2.1. Cálculo de la transferencia de momento lineal . . . . .	24
2.2. Campos electromagnéticos producidos por un electrón viajando con velocidad constante . . . . .	29
2.3. Campos electromagnéticos esparcidos por una nanopartícula esférica . .	30
2.3.1. Solución de Mie extendida . . . . .	30
<b>3. Resultados y discusión</b>	<b>35</b>
3.1. MgO y SiC . . . . .	38
3.2. Resultados y discusión . . . . .	41
3.3. Metales vs dieléctricos . . . . .	46
<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>49</b>

**Apéndice A****Paridad del integrando en la TML** **51****Apéndice B****Solución de Mie extendida** **55****Apéndice C****Parámetros del cálculo del campo esparcido** **61****Bibliografía** **64**

## Índice de figuras

3.9. Densidad espectral de TML y TML de un electrón rápido a una NP metálica tipo Drude como función del parámetro de impacto . . . . .	47
3.10. Densidad espectral de TML y TML de un electrón rápido a una NP de oro como función del parámetro de impacto . . . . .	48
3.11. TML de un electrón rápido a una NP metálica tipo Drude como función de la velocidad del electrón . . . . .	48
C.1. Mallado de la NP y la esfera S de integración para el cálculo numérico .	61

# Agradecimientos

Agradezco a mi tutor, el Dr. Alejandro Reyes Coronado, y a mi comité tutor, el cual, además de mi tutor, incluye al Dr. Rubén Gerardo Barrera y Pérez y al Dr. Raúl Patricio Esquivel Sirvent, por su apoyo, su guía y sus consejos durante mi maestría y en el trabajo de investigación que ha permitido la escritura de esta tesis.

A los integrantes del jurado: Dra. Ana Lilia González Ronquillo, Dra. Citlali Sánchez Aké, Dr. Carlos Ramírez Ramos y Dr. Alejandro Vásquez Arzola, por el tiempo que dedicaron a la revisión de mi tesis y por sus valiosos comentarios y sugerencias.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por otorgarme una beca para la realización de mis estudios de maestría.

A la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), el Posgrado en Ciencias Físicas (PCF) de la UNAM, la Facultad de Ciencias (FC) de la UNAM y el Instituto de Física de la UNAM, por todo el apoyo que me han brindado. En particular, agradezco al Programa de Apoyo a los Estudios de Posgrado y a los proyectos PAPIIT IA105015 y IA105917, por el apoyo económico para llevar a cabo una estancia de investigación en el Donostia International Physics Center (DIPC) y el Centro de Física de Materiales (CFM) de la Universidad del País Vasco en San Sebastián, España, en la cual obtuve gran parte de los resultados presentados en este trabajo, y a la FC por apoyarme con una licencia de seis meses con goce de sueldo para la escritura de este trabajo.

Al CFM, el DIPC y el Centro de Cálculo del DIPC, por el apoyo para realizar la mencionada estancia de investigación. En particular, agradezco al Dr. Javier Aizpurua, al Dr. Pedro M. Echenique y al Dr. Alberto Rivacoba por su apoyo, su colaboración y las discusiones durante dicha estancia, y a Txomin Romero, Belén Isla, Carmen Martín, Luz Fernández, Diego Lasa, Daniel Franco, Garbiñe Egaña Cruz e Íñigo Aldazabal Mensa, por todo su apoyo en cuestiones informáticas.

Al Dr. Alberto Rivacoba, por proporcionarnos la extrapolación de la función dieléctrica del óxido de magnesio, y a Carlos Gael Ortíz Solano, por la construcción de la extrapolación para la función dieléctrica del carburo de silicio.

A los profesores del PCF por sus excelentes clases y su apoyo. En particular agradezco al Dr. Pier Mello, al Dr. Luis Mochán, al Dr. Rafael Pérez Pascual y al Dr. Víctor Romero Rochín, cuyos cursos, además de ser excelentes, me permitieron acreditar los exámenes predoctorales del PCF.

A Íñigo Medrano, Thomas Lavoisier y sus respectivas familias, por su amistad, apoyo y compañía durante la estancia en San Sebastián.

A Brenda Paola Martínez Vázquez por su gran amor, su apoyo y por compartir la vida conmigo.

Finalmente, agradezco a todos mis amigos y mis compañeros por su gran apoyo en esta etapa. En particular, estoy muy agradecido con Alessio Palavicini, por su gran amistad y apoyo, y con Carlos Maciel, Adrián Bartolo, Natalia Sánchez, Rafael Díaz y Jaime Fernández por su amistad, las discusiones y el trabajo en equipo.

## Resumen

En este trabajo se presenta un estudio sobre la transferencia de momento lineal (TML) de un electrón relativista a una nanopartícula (NP) dieléctrica esférica, en función de la velocidad del electrón y de la distancia más próxima de la trayectoria del electrón a la superficie de la NP (parámetro de impacto), en el marco de la electrodinámica clásica. El electrón viaja en línea recta sin intersecar a la NP, con una velocidad relativista, como los típicamente empleados en microscopios electrónicos de barrido y transmisión (STEM por sus siglas en inglés, *Scanning Transmission Electron Microscope*) estándares, y la NP esférica de radio  $a$  se considera hecha de óxido de magnesio (MgO) o bien de carburo de silicio (SiC).

El MgO resulta de interés debido a que ha sido estudiado mediante STEMs desde hace algunas décadas. En particular, se ha observado la generación de radiación Cherenkov durante la interacción del MgO con el haz de electrones del STEM. Así mismo, el SiC, además de ser un material polarítónico con resonancias en la región de los THz, resulta de interés práctico debido a su alto índice de refracción.

Anteriormente se ha estudiado la TML de electrones relativistas a NPs metálicas, tanto teórica como experimentalmente, observándose la existencia de una transición de interacción atractiva a repulsiva para parámetros de impacto suficientemente pequeños o velocidades del electrón suficientemente altas, dando pie a posibles aplicaciones tecnológicas de manipulación controlada a la nanoscala, bautizadas como *pinzas electrónicas* en alusión a las pinzas ópticas.

En este trabajo se calculó la TML de electrones relativistas a NPs de MgO y SiC, encontrándose que la TML en la dirección longitudinal (paralela a la trayectoria del electrón) es siempre positiva en ambos materiales –tanto en función de la velocidad del electrón como en función del parámetro de impacto–, i.e., existe una interacción atractiva entre el electrón y la NP (el electrón arrastra a la NP), en acuerdo con los

resultados obtenidos para el caso de partículas metálicas y el hecho de que la componente longitudinal de la TML está relacionada con espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS por sus siglas en inglés, *Electron Energy Loss Spectroscopy*). Para la componente transversal (perpendicular a la trayectoria del electrón) de la TML, se encontró que, para NPs hechas de MgO, existe una transición de interacción atractiva a repulsiva para velocidades del electrón suficientemente altas, así como para parámetros de impacto suficientemente pequeños, lo cual indica que el efecto repulsivo entre un electrón y una NP no es exclusivo de NPs plasmónicas. En contraste, para el caso de una NP hecha de SiC, no se encontró ninguna transición para el rango de parámetros considerados, tanto de la velocidad del electrón como del parámetro de impacto.

Lo anterior sugiere la posibilidad de manipulación controlada de NPs por medio de microscopios STEMs no sólo para NPs metálicas, sino también para algunas NPs dieléctricas, lo cual amplía el margen de operación de la posible tecnología de pinzas electrónicas.

## Abstract

In this work we present a study on the linear momentum transfer (TML for its spanish acronym, *Transferencia de Momento Lineal*) from a relativistic electron to a dielectric nanoparticle (NP), as a function of the electron's velocity and the shortest distance from the electron's trajectory to the NP's surface (impact parameter), in the context of classical electrodynamics. The electron travels in a straight line without intersecting the NP, with a relativistic velocity, as those typically used in standard scanning transmission electron microscopes (STEM), and the spherical NP of radius  $a$  is considered to be made of magnesium oxide (MgO) or silicon carbide (SiC).

The interest in MgO comes from the fact that it has been studied with STEMs since some decades. In particular, the production of Cherenkov radiation has been observed during the interaction between MgO and a STEM's electron beam. Likewise, SiC, besides being a polaritonic material with resonances in the THz region, is an interesting material due to its high refractive index.

Previously, the TML from relativistic electrons to metallic NPs has been experimentally and theoretically studied, noticing the existence of a transition from attractive to repulsive interaction for small enough impact parameters and high enough electron's velocities, leading to possible technological applications of nanoscale controlled manipulation, named *electronic tweezers*, making reference to optical tweezers.

In this work it was found that the longitudinal TML (parallel to the electron's trajectory) to MgO and SiC NPs is always positive for both materials –as a function of electron's velocity and impact parameter–, i.e., there is an attractive interaction between the electron and the NP (the electron drags the NP), in agreement with the obtained results for metallic NPs and the fact that the longitudinal component of the TML is associated with electron energy loss spectroscopy (EELS). For the transversal

TML (perpendicular to the electron's trajectory), it was found that for MgO NPs there is an attractive-repulsive interaction transition for high enough electron's velocities and for small enough impact parameters, which indicates that the repulsive effect between an electron and a NP is not exclusive of plasmonic NPs. In contrast, for SiC NPs, no transition was observed within the considered values of the electron's velocity nor the impact parameter.

The foregoing suggests that the controlled manipulation of NPs with STEMs is possible not just for metallic NPs, but also for some dielectric NPs, broadening the operation range of the possible technology of electronic tweezers.

# Introducción y antecedentes

Desde sus albores, la humanidad ha empleado la luz –y en general la radiación electromagnética (EM)– para estudiar a la naturaleza. En particular, la radiación EM se ha utilizado para el estudio de los materiales, los cuales a su vez han sido utilizados para estudiar la radiación EM. Además, los campos EM poseen propiedades dinámicas (energía, momento lineal y momento angular) que pueden transferirse a la materia [1], lo cual ha permitido el desarrollo de diversas técnicas de caracterización [2] y manipulación [3] de materiales.

Una de las fuentes de radiación EM son los haces de electrones. Un ejemplo de su implementación son los microscopios electrónicos de barrido y transmisión (STEM, por sus siglas en inglés *Scanning Transmission Electron Microscope*), que han probado su utilidad en el estudio de estructuras nanométricas, alcanzando resoluciones atómicas menores a 1 Å con energías del haz de electrones de hasta 400 keV, i.e. con electrones con velocidades relativistas [4]-[9]<sup>1</sup>. Sin embargo, se ha observado que el haz de electrones del STEM puede transferir momento lineal y angular a nanopartículas (NPs) metálicas, provocando traslaciones y rotaciones de las mismas [11]-[13]. En particular, se ha observado que, para ciertas condiciones, la transferencia de momento lineal (TML) transversal (perpendicular a la trayectoria del haz de electrones) de electrones relativistas a NPs metálicas exhibe una transición de interacción atractiva a repulsiva (TAR) para parámetros de impacto suficientemente pequeños [12], [15], o bien para

---

<sup>1</sup>La fórmula relativista de la energía cinética  $T$  de una partícula puntual que se mueve con una rapidez  $v$  está dada por [1]

$$T = (\gamma - 1) mc^2,$$

en donde  $c$  es la rapidez de la luz,  $m$  es la masa de la partícula y  $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$  es el factor de Lorentz. Un electrón con una energía cinética de 400 keV tiene aproximadamente una rapidez de  $0.827c$ , ya que, de acuerdo [10], la masa en reposo del electrón es  $m = 0.5109989461(31) \text{ MeV}/c^2$ . Con 3 keV la rapidez es  $0.1c$ .

velocidades de los electrones suficientemente altas [14]. Este fenómeno se ha explicado mediante el acoplamiento electromagnético entre los electrones y las nanopartículas bajo estudio, en las cuales se inducen excitaciones en las densidades de carga, conocidas como *plasmones* [14]-[21].

Ahora bien, si las NPs son dieléctricas, la interacción electromagnética con un haz de electrones será distinta que en el caso de NPs metálicas ya que, al no tener electrones libres, no pueden inducirse plasmones. Sin embargo, el campo electromagnético producido por el haz de electrones (*campo externo*) induce densidades de carga y corriente en las NPs. Más aún, por las leyes de conservación de las variables dinámicas, el campo externo puede transferir energía, momento lineal y momento angular a las NPs [1], [12]. No obstante, hasta el momento sólo se ha observado experimentalmente el fenómeno de la TAR en NPs metálicas. Lo anterior ha motivado la realización de este trabajo, en el cual se presenta un estudio de la transferencia de momento lineal (TML) de electrones con velocidades relativistas a NPs dieléctricas, hechas de óxido de magnesio (MgO) o bien de carburo de silicio (SiC), en el marco de la electrodinámica clásica, y se comparan los resultados con los conocidos para NPs metálicas, prestando especial atención a la presencia o ausencia de TAR en estos materiales.

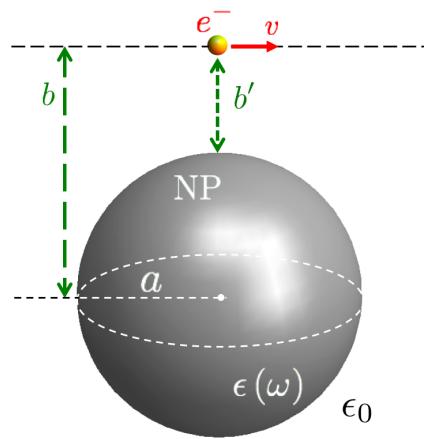
En este capítulo se presenta un resumen de los antecedentes del problema de la transferencia de momento lineal a nanopartículas.

## 1.1. Antecedentes

En el 2004, F. J. García de Abajo, interesado en el problema del efecto de un haz de electrones relativistas sobre muestras en una trampa óptica, realizó un estudio teórico sobre las fuerzas y torcas que ejercen los electrones sobre nanopartículas (NPs) esféricas metálicas y dieléctricas [12], obteniendo que la transferencia de momento lineal (TML) y angular (TMA) de los electrones a las NPs depende del parámetro de impacto y del radio de las NPs.

En [12] se considera como modelo teórico (ver Fig. 1.1) una NP esférica neutra, de radio  $a$ , no magnética, embebida en vacío, con una respuesta electromagnética dada por su función dieléctrica  $\epsilon(\omega)$  cerca de la cual viaja un electrón ( $e^-$ ) de carga  $q_e$ , con una velocidad constante sobre una trayectoria recta que no interseca a la NP. En la Fig. 1.1 se ha indicado el parámetro de impacto  $b$  (la distancia más corta de la trayectoria del electrón al centro de la NP)<sup>2</sup>. El modelo de [12] es razonable para el problema de

<sup>2</sup>En la Fig. 1.1 también se ha señalado el parámetro de impacto  $b'$  respecto a la superficie de la NP, el cual constituye la distancia más próxima desde la superficie de la NP a la trayectoria del electrón, ya que más adelante es respecto a este parámetro de impacto que se harán los estudios de la TML.



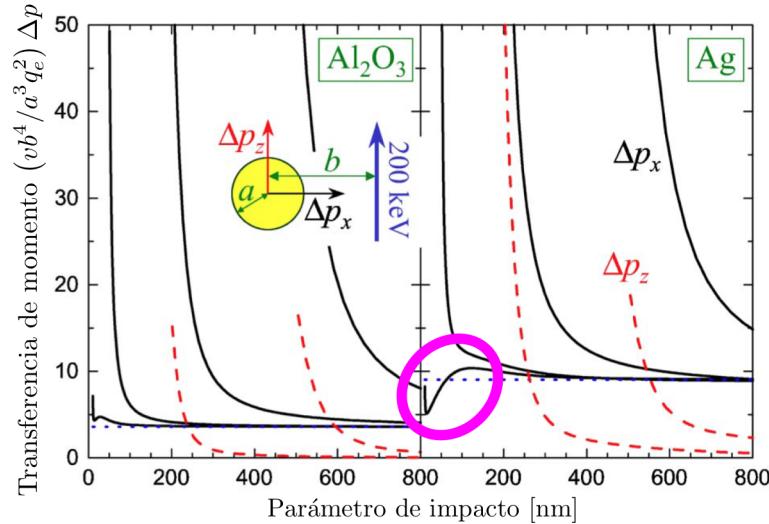
**Figura 1.1:** Esquema del problema de la TML de un electrón rápido ( $e^-$ ) a una nanopartícula (NP) embebida en vacío caracterizada por  $\epsilon(\omega)$ .

la interacción de NPs con el haz de un STEM ya que, en primer lugar, la corriente eléctrica del haz de electrones es típicamente del orden de 100 pA [13], de modo que, considerando que el tiempo de relajamiento  $\tau$  de las oscilaciones de carga en un metal es del orden de  $10^{-15}$  s (y que  $\tau$  es menor en materiales dieléctricos)<sup>3</sup> se tiene que el haz del STEM está conformado por electrones que son emitidos aproximadamente uno cada  $10^6\tau$ . Es decir, la interacción de la NP con cada electrón del haz dura lo suficiente para que los movimientos que el electrón induce en las cargas de la NP puedan detenerse y así, cuando se emite el siguiente electrón, la NP es prácticamente neutra de nuevo. De esta manera, es justificable estudiar la interacción de un sólo electrón con la NP. En segundo lugar, se sabe que el haz de electrones del STEM se desvía poco de su trayectoria inicial cuando incide fuera de la NP; por ejemplo, en [22] y [23] se reporta que para el caso en que el haz del STEM incide a una distancia de entre 1 nm y 3 nm de cubos de 100 nm hechos de oro (Au) o de MgO, el haz se desvía entre  $10^{-3}$  radianes y  $5 \times 10^{-3}$  radianes. De este modo, puede considerarse que la trayectoria de los electrones es siempre rectilínea. Finalmente, como las energías de las excitaciones en los sólidos son en general del orden de eV, sin exceder unos cuantos keV, y el haz del STEM puede tener hasta 400 keV, la energía cinética de los electrones del haz cambia muy poco, de manera que puede considerarse que los electrones viajan siempre con la misma velocidad.

Tomando como punto de partida el mismo modelo que [12], puede hacerse un análisis cualitativo considerando que el campo EM del electrón induce densidades de carga y

<sup>3</sup>Por ejemplo, para el aluminio, el modelo de Drude predice un tiempo de relajación de  $\tau = 4.388 \times 10^{-15}$  s [14]. El modelo de Drude se discute en el capítulo 3 (ver ec. 3.3).

corriente en la NP, cuyo efecto se traduce, en primera aproximación (sin considerar las corrientes inducidas), en una carga inducida dentro de la NP, de signo opuesto a la del electrón. En ese caso, se obtendría que la interacción entre el electrón y la NP es siempre atractiva. Sin embargo, en [12] se encontró que para NPs de plata (Ag) ocurría una TAR en la TML transversal para parámetros de impacto suficientemente pequeños (véase la Fig. 1.2). En el 2008, P. E. Batson reportó que, en efecto, el haz de un STEM puede inducir movimiento en nanopartículas de oro [13].

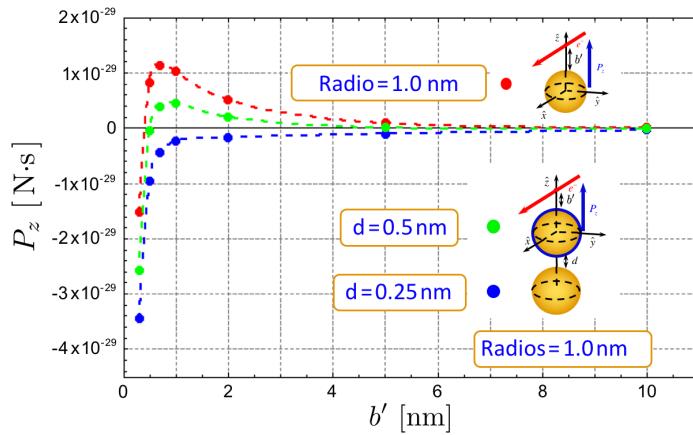


**Figura 1.2:** TML de electrones rápidos a una NP de plata (Ag) y a una NP de óxido de aluminio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) en función del parámetro de impacto  $b$ , reproducida de [12]. Se observa que ocurre una TAR, señalada en magenta, en la TML transversal para la NP de Ag. En esta figura se considera que el electrón tiene una carga  $q_e$ .

En el 2010, Reyes-Coronado et al. [16] encontraron una TAR, a parámetros de impacto suficientemente pequeños, para la TML transversal de electrones relativistas a NPs esféricas hechas de aluminio y oro, de distintos radios, obteniendo además que el fenómeno está presente también en dímeros metálicos y prediciendo que para ciertos parámetros de impacto el dímero se rompería (las NPs se separarían) o bien se juntaría, colapsando en una única partícula (fenómeno conocido como coalescencia). En la Fig. 1.3 se ha reproducido una de las gráficas de [16]<sup>4</sup>, que muestra la TML transversal para una NP y un dímero de oro, en la cual se observa TAR en la NP y en el dímero con separación  $d = 0.5$  nm. Estos resultados fueron confirmados experimentalmente en el 2011 por P. E. Batson et al. [15], en donde se presenta un estudio teórico y experimental de la TML del haz de electrones de un STEM a NPs de oro sobre un sustrato de carbono amorfo.

El STEM forma sus imágenes barriendo las muestras con el haz de electrones sobre

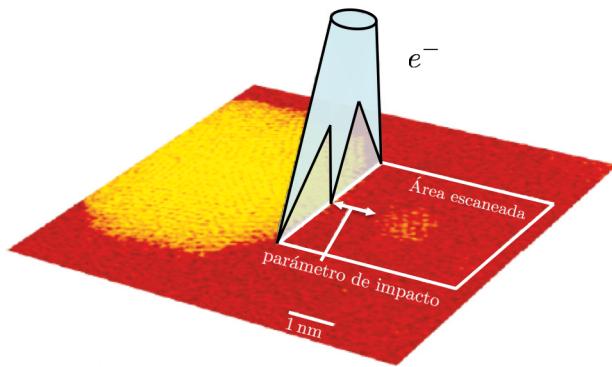
<sup>4</sup>En [16] sólo aparecen la curva roja y la azul de la Fig. 1.3. La curva verde no ha sido publicada.



**Figura 1.3:** TML de electrones rápidos a una NP de oro (puntos rojos) y a un dímero de oro con separación  $d = 0.5$  nm (en verde) y  $d = 0.25$  nm (en azul), en función del parámetro de impacto  $b'$ , reproducida de [16].

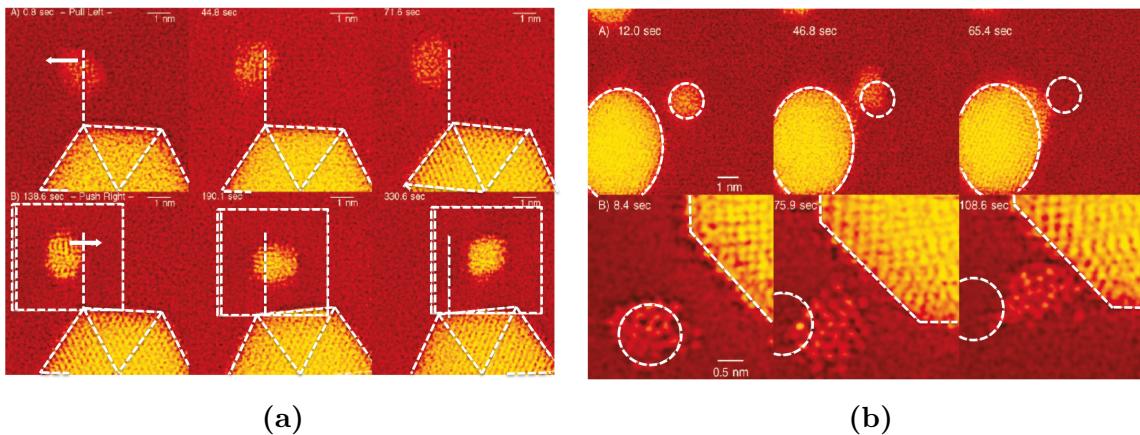
un plano, utilizando los electrones esparcidos por ellas. Por ejemplo, en la Fig. 1.4, reproducida de [15], se muestra una NP que está siendo escaneada por el haz de un STEM, el cual barre la región plana delimitada por las líneas blancas. El haz de electrones del STEM permanece durante un 20 % del tiempo del barrido al principio de cada una de las líneas sobre las que éste se efectúa, produciendo una corriente neta de electrones que viajan fuera de la NP, ilustrada en la Fig. 1.4 como una región sombreada en azul, de manera que, aunque el haz barre toda la muestra que se observa con el STEM, hay un *parámetro de impacto efectivo* respecto a la superficie de la NP (ver Fig. 1.4), correspondiente a  $b'$  de la Fig. 1.1.

En [15] se utilizó carbono amorfó como sustrato, el cual posee una superficie rugosa que dificulta el movimiento de las NPs, de manera que el efecto del haz del STEM al pasar sobre las NPs es prácticamente nulo, y así los movimientos traslacionales de las NPs se deben principalmente al haz de electrones con parámetro de impacto efectivo  $b'$ . En la Fig. 1.5 se muestran algunos de los resultados de [15]. La Fig. 1.5a muestra seis imágenes de STEM, a distintos tiempos, de una NP de oro de 1.5 nm en presencia de otra de 5 nm –y por lo tanto se mueve mucho menos que la NP pequeña– que sirve de referencia para estudiar su movimiento. En todas las imágenes de la Fig. 1.5a, el haz de referencia se encuentra a la izquierda de la NP (e. g. en las imágenes inferiores el haz se encuentra en la región marcada con doble línea punteada). Las tres imágenes superiores de la Fig. 1.5a, tomadas con un parámetro de impacto efectivo  $b' \approx 4.5$  nm, muestran una interacción atractiva entre el haz y la NP pues se observa que la NP se acerca al borde izquierdo, lo cual se puede apreciar utilizando la línea punteada blanca



**Figura 1.4:** Esquema del haz de electrones de un STEM interactuando con dos partículas de oro, reproducida de [15].

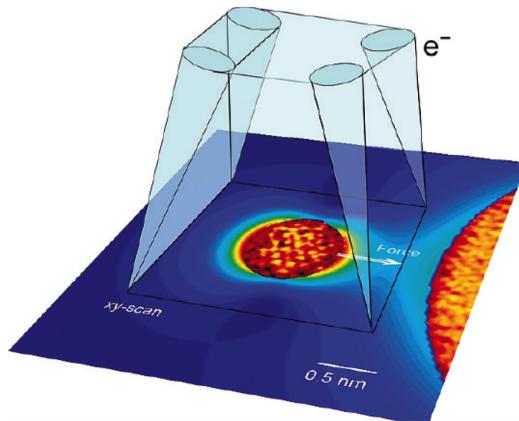
auxiliar entre las NPs. Por el contrario, en las imágenes inferiores de 1.5a, cuyo haz de referencia tiene un parámetro de impacto de  $b' \approx 1 \text{ nm}$ , se observa que la NP se aleja del haz indicando una interacción repulsiva. De este modo, la Fig. 1.5 es una evidencia experimental de la existencia del fenómeno de la TAR en NPs de oro.



**Figura 1.5:** Resultados reproducidos de [15] de la TML del haz de electrones de un STEM a NPs de oro sobre un sustrato de carbono amorfizado: (a) Observación experimental de TAR en NPs de oro y (b) observación de la coalescencia de dos NPs de oro inducida por el haz electrónico del STEM.

El fenómeno de coalescencia de un dímero inducida por el haz de electrones de un STEM puede apreciarse en la Fig. 1.5b, reproducida de [15], en la que se muestran seis imágenes de dos NPs de oro a distintos tiempos registradas por el STEM. En las imágenes superiores de la Fig. 1.5b se aprecian dos NPs las cuales, conforme pasa el tiempo, se van acercando entre sí debido al efecto del haz de electrones hasta coalescer en una sola partícula. Lo mismo se observa en las imágenes inferiores de la Fig. 1.5b para una NP que coalesce con otra de mucho mayor tamaño.

Todo lo anterior sugiere la implementación de la TML, en particular la TAR, en el



**Figura 1.6:** Ilustración de una posible *pinza electrónica*, reproducida de [15].

desarrollo de *pinzas electrónicas*<sup>5</sup> –dispositivos basados en haces de electrones que permitirían la manipulación controlada de muestras a la nanoescala–. En la Fig. 1.6, también reproducida de [15], se ilustra una posible implementación de una pinza electrónica, la cual consiste en un haz de electrones que se mueve encerrando una NP. En el 2011, Oleshko y Howe mostraron en [24] una implementación de pinzas electrónicas manipulando NPs de aluminio de distintos tamaños.

No obstante, hasta el momento no se han reportado observaciones de TAR en dieléctricos, de modo que el funcionamiento de las pinzas electrónicas con estos materiales es incierto. Si la TAR fuese un fenómeno puramente plasmónico, entonces no se observaría en dieléctricos y así estos materiales necesitarían un tratamiento distinto al de los metales para su manipulación a la nanoescala. Lo anterior motiva el estudio de la TML y la TMA de electrones relativistas a NPs hechas de distintos materiales dieléctricos, en particular, para determinar si en efecto la TAR ocurre sólo en metales, y para entender el comportamiento de dichas NPs al interactuar con pinzas electrónicas.

En este trabajo se investiga la TML de electrones relativistas a NPs hechas de dos materiales dieléctricos de interés: el óxido de magnesio (MgO) y el carburo de silicio (SiC). El MgO es de interés, en particular, por ser un material que se ha estudiado con STEMs y que, al interactuar con el haz de electrones, produce radiación Cherenkov [25]-[29]. Por su parte, el SiC, además de que, como muchos de los compuestos del silicio, es de interés por el gran papel que juega el silicio en la electrónica, es un material polaritónico con resonancias en la región de los THz y con un alto índice de refracción [30]-[32].

<sup>5</sup>El nombre de *pinzas electrónicas* hace referencia a las pinzas ópticas, las cuales son trampas ópticas que han servido para manipular especímenes de tamaños micrométricos [3].



# 2

## Teoría

Los campos electromagnéticos (EM) poseen momento lineal y angular, lo cual permite inducir fuerzas y torcas de origen electromagnético en la materia [1]. Lo anterior ha motivado el desarrollo de técnicas de manipulación óptica [3], las cuales se han implementado de manera exitosa principalmente en dos escalas: la micrométrica, manipulando objetos cuyo tamaño es del orden de micrómetros (e.g. las células) [33]-[36], y la subnanométrica, con objetos que miden menos de un nanómetro (e.g. los átomos) [37]-[40]. Sin embargo, la implementación en la escala intermedia no ha sido fácil de lograr [41], aunque se han logrado avances importantes en este tema. En particular, se ha estudiado la transferencia de momento lineal (TML) de electrones, como los típicamente empleados en los STEMs, a nanopartículas (NPs) metálicas en función del parámetro de impacto y de la velocidad del electrón, encontrándose una transición de interacción atractiva a repulsiva (TAR) para la transferencia de momento en la dirección transversal a la trayectoria del electrón [15]-[21].

En este trabajo se presentan los primeros cálculos (hasta donde tenemos conocimiento) de la TML a nanopartículas dieléctricas hechas de óxido de magnesio (MgO) y carburo de silicio (SiC), con especial énfasis en la presencia o ausencia de TAR.

En este capítulo se presenta la teoría de la transferencia de momento lineal de electrones relativistas con velocidad constante entre  $0.1c$  y  $0.95c^1$  a NPs esféricas, en el marco de la electrodinámica clásica, la cual sirve de base para el estudio tanto del caso de nanopartículas metálicas como dieléctricas.

---

<sup>1</sup>En todo el trabajo,  $c$  denota a la rapidez de la luz.

## 2.1. Cálculo de la transferencia de momento lineal

La conservación del momento lineal en electrodinámica clásica establece que [1]

$$\frac{d}{dt} [\mathbf{P}_{\text{mec}}(t) + \mathbf{P}_{\text{em}}(t)] = \oint_S \overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) \cdot d\mathbf{a}, \quad (2.1)$$

en donde  $\overleftrightarrow{\mathbf{T}}$  es el tensor de esfuerzos de Maxwell,  $\mathbf{P}_{\text{mec}}$  es el momento lineal mecánico,  $\mathbf{P}_{\text{em}}$  es el momento lineal electromagnético,  $S$  es la superficie cerrada (que encierra un volumen  $V$ ) sobre la que se desea calcular la transferencia de momento lineal,  $\mathbf{r}$  es el vector de posición,  $t$  es el tiempo y  $d\mathbf{a} = da\hat{\mathbf{n}}$ , con  $da$  un elemento diferencial de área y  $\hat{\mathbf{n}}$  el vector unitario normal exterior a  $S$  en cada punto de su superficie. En términos de los campos EM y empleando unidades CGS<sup>2</sup> se tiene que el momento lineal electromagnético está dado por [1]

$$\mathbf{P}_{\text{em}}(t) = \int_V \mathbf{g}(\mathbf{r}; t) d^3r, \quad (2.2)$$

con  $\mathbf{g}(\mathbf{r}; t)$  la densidad de momento lineal, dada por

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}; t) = \frac{1}{4\pi c} \mathbf{E}(\mathbf{r}; t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}; t), \quad (2.3)$$

mientras que el tensor de esfuerzos de Maxwell (omitiendo la dependencia en  $\mathbf{r}$  y  $t$ ) tiene la forma

$$\overleftrightarrow{\mathbf{T}} = \frac{1}{4\pi} \left[ \mathbf{E}\mathbf{E} + \mathbf{B}\mathbf{B} - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) \right], \quad (2.4)$$

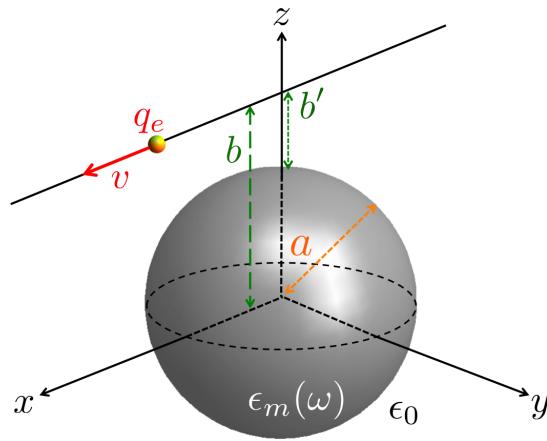
en donde  $\overleftrightarrow{\mathbf{I}}$  representa la diádica unitaria.<sup>3</sup>

En la Fig. 2.1 se muestra el sistema de estudio, el cual consiste en un electrón, con carga  $q_e$ , viajando con velocidad constante, de magnitud  $v$  y dirección  $\hat{\mathbf{e}}_x$ , en una trayectoria recta a una distancia  $b$  del centro de una nanopartícula (NP) esférica –no magnética– de radio  $a$ , caracterizada por una función dieléctrica  $\epsilon_m(\omega)$ . La distancia más corta de la trayectoria del electrón a la superficie de la NP es  $b'$  y el sistema completo se considera embebido en vacío.

El campo EM producido por el electrón –*campo externo*– induce cargas y corrientes

<sup>2</sup>Se utilizan unidades CGS en lugar de unidades SI ya que, como se verá más adelante, los campos EM se calculan en unidades atómicas gaussianas, compatibles con las unidades CGS. Al final se reporta el momento lineal transferido en SI.

<sup>3</sup>Se utiliza el producto directo de vectores: Si  $\mathbf{X} = \sum_l X_l \hat{\mathbf{e}}_l$  y  $\mathbf{Y} = \sum_m Y_m \hat{\mathbf{e}}_m$  son dos campos vectoriales expresados en una base ortonormal  $\{\hat{\mathbf{e}}_k\}$ , entonces  $\mathbf{XY}$  es el tensor cuya entrada  $ij$  es  $X_i Y_j$ .



**Figura 2.1:** Esquema de un electrón viajando con velocidad constante en la vecindad de una nanopartícula esférica, centrada en el origen, embebida en vacío y caracterizada por una función dieléctrica  $\epsilon_m(\omega)$ .

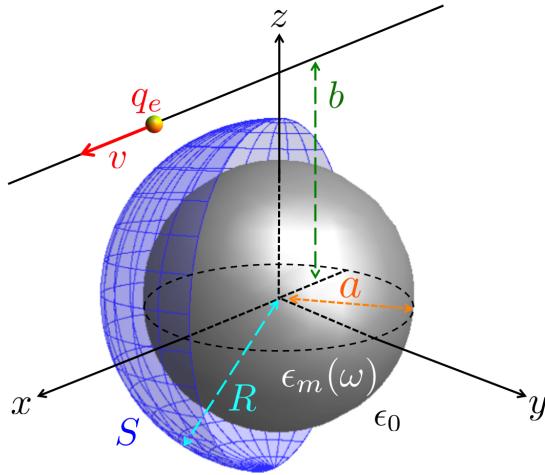
en la NP, la cual genera a su vez un campo EM –el *campo esparcido*– que se superpone con el campo EM externo fuera de la NP. Para calcular la transferencia de momento lineal total del electrón a la NP debe considerarse la fuerza en cada posición del electrón, lo que equivale a considerar la fuerza en todo el tiempo de vuelo del electrón, y por lo tanto se integra la ec. (2.1) en todo el tiempo en una superficie que encierre a la NP, sin intersecar la trayectoria del electrón<sup>4</sup>. En particular, si  $S$  es una esfera de radio  $R$ , concéntrica a la NP, tal que  $a < R < b$  (ver Fig. 2.2) y se define  $t = 0$  como el tiempo en el que el electrón pasa por el punto más cercano a la NP, es decir, aquel con coordenadas  $(0, 0, b)$  en la Fig. 2.1, entonces

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \left[ \mathbf{P}_{\text{mec}}(t) + \mathbf{P}_{\text{em}}(t) \right] dt = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) \cdot d\mathbf{a} dt. \quad (2.5)$$

Por el teorema fundamental del cálculo, la integral del lado izquierdo de la ec. (2.5) es igual a la diferencia del término entre corchetes evaluado en  $+\infty$  y  $-\infty$ . En  $t = -\infty$ , el electrón se encuentra infinitamente lejos de la NP, de modo que el campo externo producido por el electrón sobre la NP es cero y en consecuencia no hay campos esparcidos por la NP, de manera que el campo EM es cero en el volumen  $V$  encerrado por la superficie  $S$ , por lo que utilizando (2.2) y (2.3)

$$\mathbf{P}_{\text{em}}(t = -\infty) = \frac{1}{4\pi c} \int_V \mathbf{E}(\mathbf{r}; t = -\infty) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}; t = -\infty) d^3r = \mathbf{0}. \quad (2.6)$$

<sup>4</sup>El requisito de que la superficie no interseque a la trayectoria del electrón es solamente para simplificar los cálculos numéricos, evitando considerar en la región de integración el momento lineal mecánico que posee el electrón debido a su movimiento.



**Figura 2.2:** Superficie esférica  $S$  sobre la que se hace la integración en la ec. (2.5), cuyo radio  $R$  es tal que  $a < R < b$ . Por motivos de claridad en la imagen se ha ilustrado sólo la mitad de la esfera  $S$ .

En  $t = +\infty$ , el electrón vuelve a estar infinitamente lejos, por lo que nuevamente no existe campo externo dentro del volumen considerado. Sin embargo, el electrón a su paso excita a la NP induciendo cargas y corrientes dentro de ella. Debido a los efectos disipativos (representados por la parte imaginaria de la función dieléctrica), todas las corrientes inducidas eventualmente volverán a ser cero. Un mecanismo de decaimiento de las excitaciones dentro de la NP son procesos radiativos, cuyo campo EM posee momento lineal y angular. Ahora bien, dado que el momento se evalúa en  $+\infty$ , todas las posibles excitaciones dentro de la NP habrán desaparecido, así como cualquier momento electromagnético asociado a los campos radiados dentro del volumen de interés, es decir

$$\mathbf{P}_{\text{em}}(t = +\infty) = \mathbf{0}. \quad (2.7)$$

En resumen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \left[ \mathbf{P}_{\text{em}}(t) \right] dt = \mathbf{P}_{\text{em}}(t = +\infty) - \mathbf{P}_{\text{em}}(t = -\infty) = \mathbf{0}, \quad (2.8)$$

de manera que la ec. (2.5) establece que el cambio de momento lineal mecánico de la NP debido al paso del electrón está dado por

$$\Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \left[ \mathbf{P}_{\text{mec}}(t) \right] dt = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \vec{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) \cdot d\mathbf{a} dt, \quad (2.9)$$

y como la superficie  $S$  no cambia en el tiempo, es posible intercambiar el orden de las

integrales y expresar

$$\Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} = \oint_S \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) dt \right] \cdot d\mathbf{a}. \quad (2.10)$$

Como el tensor de esfuerzos de Maxwell está dado en términos de los campos EM mediante (2.4), un término típico que aparece en el cálculo de la transferencia de momento es la integral  $\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) dt$ , la cual, expresando a cada campo eléctrico en términos de su transformada de Fourier en el tiempo<sup>5</sup> puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega') e^{-i\omega' t} \frac{d\omega'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega'') e^{-i\omega'' t} \frac{d\omega''}{2\pi} dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega') \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega'') \frac{d\omega'}{2\pi} d\omega'' \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega' + \omega'') t} \frac{dt}{2\pi} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega') \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega'') \delta(\omega' + \omega'') d\omega'' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega') \mathbf{E}(\mathbf{r}; -\omega') d\omega', \end{aligned} \quad (2.11)$$

en donde  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac<sup>6</sup>. Como  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  es un campo real<sup>7</sup>, su transformada de Fourier cumple que  $\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, -\omega)$ , por lo tanto, de la ec. (2.11) se obtiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) dt = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) d\omega. \quad (2.12)$$

Haciendo un procedimiento análogo con cada término de (2.10) se obtiene que

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} &= \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] + \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega)] \right\} \cdot d\mathbf{a} d\omega. \end{aligned} \quad (2.13)$$

La parte real de la expresión entre llaves de (2.13) es una función par en  $\omega$ , mientras que la imaginaria es una función impar (ver Apéndice A) de manera que la transferencia de

<sup>5</sup>En este trabajo se usa la convención de que la transformada de Fourier de una función  $f(t)$  es  $f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt$  y la transformada de Fourier inversa de  $f(\omega)$  es  $f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$ , en donde  $i = \sqrt{-1}$  [42].

<sup>6</sup>La función delta de Dirac es una función generalizada que tiene múltiples representaciones en términos de sucesiones e integrales de funciones. En particular, en (2.11) se ha utilizado que  $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-x')k} dk = \delta(x - x')$  [1, ec. (2.53)]. Un tratamiento formal de la función delta de Dirac y otras funciones generalizadas se encuentra en [43].

<sup>7</sup>El campo electromagnético es una observable física y por lo tanto una cantidad real.

momento lineal (TML) está dada por

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \oint_S \text{Re} \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] + \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega)] \right\} \cdot d\mathbf{a} d\omega \\ &= \int_0^\infty \mathcal{P}(\omega) d\omega,\end{aligned}\quad (2.14)$$

en donde  $\text{Re}\{z\}$  representa la parte real de  $z$  y  $\mathcal{P}(\omega)$  es la **densidad espectral de la TML** (DETML) definida como

$$\begin{aligned}\mathcal{P}(\omega) &= \mathcal{P}_x(\omega) \hat{\mathbf{e}}_x + \mathcal{P}_y(\omega) \hat{\mathbf{e}}_y + \mathcal{P}_z(\omega) \hat{\mathbf{e}}_z \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \oint_S \text{Re} \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] + \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega)] \right\} \cdot d\mathbf{a}.\end{aligned}\quad (2.15)$$

Por la simetría del problema (Fig. 2.1), no hay transferencia de momento lineal en la dirección  $y$ , es decir  $\Delta P_y = 0$ , de manera que

$$\Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} = \Delta P_x \hat{\mathbf{e}}_x + \Delta P_z \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (2.16)$$

Como la dirección  $x$  es paralela a la trayectoria del electrón, a  $\Delta P_x$  se le conoce como **TML longitudinal**, mientras que a  $\Delta P_z$  se le conoce como **TML transversal**, ya que la dirección  $z$  es perpendicular a la trayectoria del electrón.

Los campos  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{B}$  que aparecen en (2.14) son los campos EM totales producidos por el electrón y por la nanopartícula. Es decir<sup>8</sup>, si  $\mathbf{E}^{ext}$  y  $\mathbf{B}^{ext} = \mathbf{H}^{ext}$  son los campos producidos por electrón, y  $\mathbf{E}^{esp}$ ,  $\mathbf{B}^{esp} = \mathbf{H}^{esp}$  los campos que induce el electrón en la nanopartícula (i.e. los esparcidos), entonces

$$\mathbf{E}^{total} = \mathbf{E}^{ext} + \mathbf{E}^{esp} \quad (2.17)$$

y

$$\mathbf{B}^{total} = \mathbf{B}^{ext} + \mathbf{B}^{esp}, \quad (2.18)$$

y son estos los campos EM que se necesitan evaluar en la superficie de integración  $S$

<sup>8</sup>En el sistema CGS de unidades el campo magnético  $\mathbf{B}$  es igual al campo  $\mathbf{H}$  en el vacío, en particular,  $\mathbf{B} = \mathbf{H}$  sobre la superficie de integración  $S$  que se ha considerado (Fig. 2.2).

(ver Fig. 2.2) para calcular la TML. En las siguientes dos secciones se presentan las expresiones analíticas de los campos EM externos, producidos por el electrón, y los campos esparcidos por la NP, en una base esférica.

## 2.2. Campos electromagnéticos producidos por un electrón viajando con velocidad constante

El campo electromagnético de una carga puntual  $q_e$  que viaja con una velocidad constante, de magnitud  $v$ , se puede encontrar en textos clásicos de electromagnetismo, por ejemplo [44]. Al adaptar la solución al problema del electrón viajando en vacío en la forma que se ilustra en la Fig. 2.1 (sin considerar a la nanopartícula), en coordenadas cartesianas, se obtiene

$$\mathbf{E}^{ext}(\mathbf{r}; t) = \frac{q_e \gamma [(x - vt) \hat{\mathbf{e}}_x + y \hat{\mathbf{e}}_y + (z - b) \hat{\mathbf{e}}_z]}{[\gamma^2 (x - vt)^2 + R^2]^{\frac{3}{2}}} \quad (2.19)$$

y

$$\mathbf{B}^{ext}(\mathbf{r}; t) = \frac{q_e \gamma v [y \hat{\mathbf{e}}_z - (z - b) \hat{\mathbf{e}}_y]}{c [\gamma^2 (x - vt)^2 + R^2]^{\frac{3}{2}}}, \quad (2.20)$$

en donde<sup>9</sup>

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad y \quad R^2 = (z - b)^2 + y^2. \quad (2.21)$$

La transformada de Fourier en el tiempo de los campos EM dados por las ecs. (2.19) y (2.20) es [1], [16]<sup>10</sup>

$$\mathbf{E}^{ext}(\mathbf{r}; \omega) = 2 \frac{q_e \omega}{v^2 \gamma} e^{i \frac{\omega x}{v}} \left\{ \left[ \frac{1}{R} K_1 \left( \frac{\omega R}{\gamma v} \right) \right] \left[ y \hat{\mathbf{e}}_y + (z - b) \hat{\mathbf{e}}_z \right] - \frac{i}{\gamma} K_0 \left( \frac{\omega R}{\gamma v} \right) \hat{\mathbf{e}}_x \right\}$$

(2.22)

y

$$\mathbf{H}^{ext}(\mathbf{r}; \omega) = 2 \frac{q_e \omega}{v \gamma c} e^{i \frac{\omega x}{v}} \left\{ \left[ \frac{1}{R} K_1 \left( \frac{\omega R}{\gamma v} \right) \right] \left[ y \hat{\mathbf{e}}_z - (z - b) \hat{\mathbf{e}}_y \right] \right\},$$

(2.23)

<sup>9</sup>En las ecs. (2.19) y (2.20) se utilizan las mismas variables que se ilustran en la Fig. 2.1. En particular,  $b$  denota al parámetro de impacto respecto al origen, el cual es la distancia más corta entre el origen y la trayectoria de la carga puntual.

<sup>10</sup>En la referencia [1, pág. 437] se calculan transformadas de Fourier de funciones similares a las involucradas en (2.19) y (2.20).

en donde  $K_0(x)$  y  $K_1(x)$  son las funciones de Bessel modificadas de orden cero y uno, respectivamente [42].

## 2.3. Campos electromagnéticos esparcidos por una nanopartícula esférica

Los campos electromagnéticos externos, producidos por el electrón, inducen cargas y corrientes en la nanopartícula, las cuales producen un campo EM extra al externo, llamado *campo esparcido*, siendo el campo EM total la superposición de ambos.

El problema de calcular el campo electromagnético resultante de la interacción de una onda plana con una partícula esférica fue resuelto por Gustav Mie en 1908 y en su honor se conoce a dicha solución como *Teoría de Mie*<sup>11</sup>. La *solución de Mie* consiste en resolver las ecuaciones de Maxwell utilizando la geometría esférica del problema. Se expresan los campos electromagnéticos externo y esparcido en la base de los *armónicos esféricos vectoriales*<sup>12</sup> y se determinan los coeficientes de la expansión mediante las condiciones de frontera que satisface el campo electromagnético sobre la superficie de la partícula esférica.

Aún cuando el campo EM externo no sea una onda plana, es posible seguir la misma metodología que la solución original de Mie [46], lo cual se conoce como *solución de Mie extendida*. En este trabajo, el campo EM externo corresponde al producido por el electrón, ecs. (2.22) y (2.23).

### 2.3.1. Solución de Mie extendida

En la solución de Mie extendida se expresan tanto el campo EM externo, producido por el electrón, como el campo EM esparcido por la NP, en una base esférica construida mediante funciones escalares auxiliares que satisfacen la ecuación de Helmholtz, obteniendo los coeficientes de la expansión en dicha base mediante las condiciones de frontera que cumplen los campos EM, externo y esparcido, en la superficie de la nanopartícula. En particular, en la TML –ver ec. (2.14)– sólo son de interés los campos EM sobre la superficie de integración, es decir, el campo externo y el esparcido evaluados

<sup>11</sup>Este problema fue resuelto de manera independiente por Peter Debye por un lado y por Ludvig Lorenz por otro. Sin embargo, el nombre prevaleciente en la literatura es el de teoría de Mie [45]. En este trabajo nos referiremos a la teoría de Mie como la *solución de Mie*.

<sup>12</sup>Los armónicos esféricos vectoriales son una base de campos vectoriales que generan todas las soluciones de las ecuaciones de Maxwell en geometría esférica. Se construyen a partir del producto del vector de posición  $\mathbf{r}$  con funciones escalares auxiliares, las cuales satisfacen la ecuación escalar de Helmholtz [45].

fueras de la nanopartícula. Los campos EM han sido obtenidos en [46]<sup>13</sup> en *unidades atómicas gaussianas*<sup>14</sup>. El campo eléctrico producido por el electrón está dado por

$$\mathbf{E}^{ext}(r, \theta, \varphi; \omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{im\varphi} \left( \hat{\mathbf{e}}_r B^E l(l+1) P_l^m(\cos \theta) \frac{j_l(k_0 r)}{k_0 r} - \hat{\mathbf{e}}_\theta \left\{ A^M \frac{m}{\sin \theta} j_l(k_0 r) P_l^m(\cos \theta) + B^E \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] \left[ (l+1) \frac{j_l(k_0 r)}{k_0 r} - j_{l+1}(k_0 r) \right] \right\} + (i) \hat{\mathbf{e}}_\varphi \left\{ A^M j_l(k_0 r) \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] + B^E \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \left[ (l+1) \frac{j_l(k_0 r)}{k_0 r} - j_{l+1}(k_0 r) \right] \right\} \right), \quad (2.24)$$

mientras que para el campo magnético, a través de la ley de Faraday- Lenz, se obtiene

$$\mathbf{H}^{ext}(r, \theta, \varphi; \omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{im\varphi} \left( \hat{\mathbf{e}}_r A^M l(l+1) P_l^m(\cos \theta) \frac{j_l(k_0 r)}{k_0 r} + \hat{\mathbf{e}}_\theta \left\{ B^E \frac{m}{\sin \theta} j_l(k_0 r) P_l^m(\cos \theta) - A^M \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] \left[ (l+1) \frac{j_l(k_0 r)}{k_0 r} - j_{l+1}(k_0 r) \right] \right\} + (i) \hat{\mathbf{e}}_\varphi \left\{ A^M \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \left[ (l+1) \frac{j_l(k_0 r)}{k_0 r} - j_{l+1}(k_0 r) \right] - B^E j_l(k_0 r) \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] \right\} \right). \quad (2.25)$$

<sup>13</sup>Los campos EM se han calculado suponiendo que el electrón viaja paralelo al eje  $z$ , de manera que las coordenadas esféricas  $(r, \theta, \varphi)$  corresponden a un sistema cuyo eje  $z$  es en realidad el eje  $x$  (ver Fig. 2.1). En el Apéndice B encuentran los detalles del cálculo.

<sup>14</sup>En unidades atómicas gaussianas, la masa del electrón  $m_e$ , su carga  $q_e$  y la constante reducida de Planck  $\hbar$  se igualan a 1, sin dimensiones:  $q_e = m_e = \hbar = 1$  [49].

Para los campos EM esparcidos por la nanopartícula se obtiene

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}^{esp}(r, \theta, \varphi; \omega) = & \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{im\varphi} \left( \hat{\mathbf{e}}_r D^E l(l+1) P_l^m(\cos \theta) \frac{h_l^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - \right. \\
 & - \hat{\mathbf{e}}_{\theta} \left\{ C^M \frac{m}{\sin \theta} h_l^{(+)}(k_0 r) P_l^m(\cos \theta) + D^E \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \right. \right. \\
 & \left. \left. \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] \left[ (l+1) \frac{h_l^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{l+1}^{(+)}(k_0 r) \right] \right\} + \\
 & (i) \hat{\mathbf{e}}_{\varphi} \left\{ C^M h_l^{(+)}(k_0 r) \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \right. \right. \\
 & \left. \left. \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] + D^E \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \left[ (l+1) \frac{h_l^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - \right. \right. \\
 & \left. \left. h_{l+1}^{(+)}(k_0 r) \right] \right\} \right) \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}^{esp}(r, \theta, \varphi; \omega) = & \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l e^{im\varphi} \left( \hat{\mathbf{e}}_r C^M l(l+1) P_l^m(\cos \theta) \frac{h_l^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} + \right. \\
 & + \hat{\mathbf{e}}_{\theta} \left\{ D^E \frac{m}{\sin \theta} h_l^{(+)}(k_0 r) P_l^m(\cos \theta) - C^M \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \right. \right. \\
 & \left. \left. \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] \left[ (l+1) \frac{h_l^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{l+1}^{(+)}(k_0 r) \right] \right\} + \\
 & (i) \hat{\mathbf{e}}_{\varphi} \left\{ C^M \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \left[ (l+1) \frac{h_l^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{l+1}^{(+)}(k_0 r) \right] - \right. \\
 & \left. D^E h_l^{(+)}(k_0 r) \left[ (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) - \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right] \right\} \right), \quad (2.27)
 \end{aligned}$$

en donde se ha utilizado el número de onda<sup>15</sup>

$$k_i = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_i(\omega)}, \quad (2.28)$$

<sup>15</sup>La función dieléctrica es en general una función compleja por lo que  $k_i$  también lo es.

donde el índice  $i$  denota al medio:  $\epsilon_i(\omega) = 1$  fuera de la nanopartícula (i.e. en el vacío) y  $\epsilon_i(\omega) = \epsilon_m(\omega)$  dentro de la NP; en particular

$$k_0 = \frac{\omega}{c}; \quad (2.29)$$

$j_l(x)$  son las funciones de Bessel esféricas,  $h_l^{(+)}(x)$  son las funciones de Hankel esféricas definidas por Messiah<sup>16</sup> [48] y  $P_l^m(x)$  son las funciones asociadas de Legendre [42]. Los coeficientes  $A^M$ ,  $B^E$ ,  $C^M$  y  $D^E$  están definidos en las ecs. (B.23) y (B.33) del Apéndice B:

$$A^M = (i)^l \alpha_{l,m} \psi_{l,m}^{M,ext},$$

$$B^E = (i)^l \alpha_{l,m} \psi_{l,m}^{E,ext},$$

$$C^M = (i)^l \alpha_{l,m} t_l^M \psi_{l,m}^{M,ext},$$

$$D^E = (i)^l \alpha_{l,m} t_l^E \psi_{l,m}^{E,ext},$$

las cuales se obtienen mediante el *esquema de potenciales*.

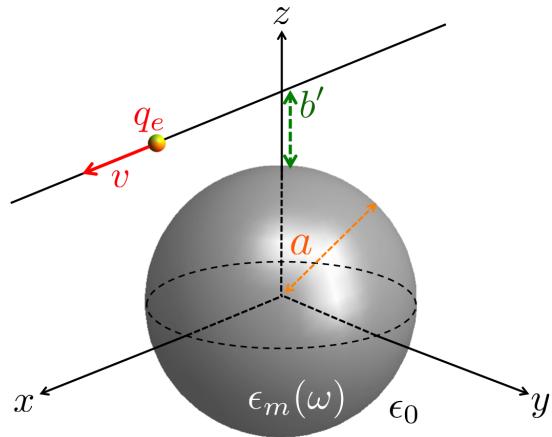
---

<sup>16</sup> $h_l^{(+)}(x) = i h_l^{(1)}(x)$  en donde  $h_l^{(1)}(x)$  son las funciones de Hankel esféricas usuales [42]. Se puede encontrar información sobre las funciones  $h_l^{(+)}(x)$  en la pág. 356 y en la sección II del apéndice B de [48].



## Resultados y discusión

En este capítulo se presentan los resultados del cálculo de la transferencia de momento lineal (TML) de electrones relativistas a nanopartículas (NPs) dieléctricas de óxido de magnesio (MgO) y de carburo de silicio (SiC), los cuales se llevaron a cabo implementando computacionalmente los resultados teóricos presentados en el capítulo 2. La TML se calculó en función de la velocidad del electrón para un parámetro de impacto constante  $b' = 0.3 \text{ nm}$  respecto a la superficie de la esfera<sup>1</sup> (ver Fig. 3.1) y en función del parámetro de impacto  $b'$ , para una velocidad del electrón constante  $v = 0.9c$ . Para todos los casos considerados, el radio de las nanopartículas se fijó en  $a = 1 \text{ nm}$ .



**Figura 3.1:** Sistema de estudio para la TML de electrones rápidos a NPs dieléctricas.

Los cálculos computacionales se llevaron a cabo en dos etapas. En la primera etapa, se calcularon los campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula utilizando el código BEM –siglas en inglés de *Boundary Element Method*–, desarrollado por F. J.

<sup>1</sup>En lo sucesivo llamaremos a  $b'$  simplemente *parámetro de impacto*.

García de Abajo, A. Howie y J. Aizpurua [50]-[52], en el cual se implementa el *método de elemento de frontera* [53]. Dicho método consiste en generar una distribución de fuentes (cargas y corrientes) superficiales en las fronteras e interfaces (en este caso en la superficie de la NP), las cuales interactúan de manera autoconsistente entre sí y con cualquier campo externo. A partir de las cargas y corrientes en la NP, se calculan los campos EM requiriendo que se satisfagan las condiciones de contorno que imponen las ecuaciones de Maxwell. Los detalles del cálculo con BEM se presentan en el Apéndice C. La segunda etapa consistió en calcular el campo electromagnético total añadiendo al campo esparcido (producido por la NP) el campo externo (producido por el electrón) y calcular con los campos EM totales la TML mediante la ec. (2.14).

Es importante señalar que uno de los elementos fundamentales para el cálculo de los campos EM es la función dieléctrica  $\epsilon(\omega)$  de los materiales<sup>2</sup>. En la ec. (2.14) es necesario integrar a todas las frecuencias. Sin embargo, en la realidad las funciones dieléctricas pueden obtenerse experimentalmente sólo en ventanas finitas de frecuencias, por lo que para calcular la integral de la ec. (2.14) es necesario hacer extrapolaciones de  $\epsilon(\omega)$  tanto al límite de frecuencia cero como al infinito. Un criterio para extraer la función dieléctrica consiste en imponer que se satisfagan las relaciones de Kramers-Kronig<sup>3</sup> para garantizar una respuesta causal de los materiales estudiados.

El campo EM producido por el electrón, debido a su alta velocidad, está fuertemente confinado en la dirección perpendicular a su velocidad (en la Fig. 3.2 se ilustra el campo electromagnético del electrón, ecs. 2.19 y 2.20) de manera que el tiempo de interacción es del orden de  $a/v \sim 0$ , por lo que las contribuciones de tiempos pequeños a la TML es muy importante. Una función dieléctrica, para ser causal, debe ser cero para  $t < 0$ , en caso contrario, tal función podría dar contribuciones espurias a la TML para tiempos pequeños. De hecho, el uso de funciones dieléctricas no causales en el cálculo de la TML puede dar lugar a la presencia de TAR en materiales en los que no ocurre si se utilizan funciones dieléctricas causales [54]. Por lo tanto, la causalidad juega un papel muy importante en el problema de la TML.

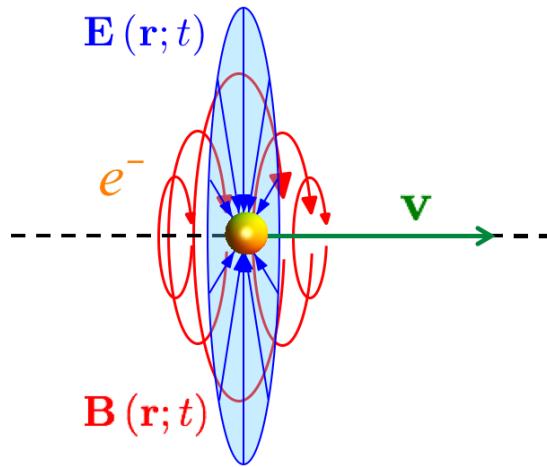
<sup>2</sup>Se ha considerado que los materiales son no magnéticos, de manera que su respuesta electromagnética está dada únicamente por  $\epsilon(\omega)$ .

<sup>3</sup>Las relaciones de Kramers-Kronig, desarrolladas independientemente por H. A. Kramers en 1927 y R. de L. Kronig en 1926, están dadas por [1]

$$Re \{ \epsilon(\omega) \} = 1 + \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Im \{ \epsilon(\omega') \}}{\omega' - \omega} d\omega',$$

$$Im \{ \epsilon(\omega) \} = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[Re \{ \epsilon(\omega') \} - 1]}{\omega' - \omega} d\omega',$$

en donde  $P$  denota al valor principal de Cauchy de las integrales [55]. Las relaciones de Kramers-Kronig son consecuencia de la causalidad y la analiticidad de  $\epsilon(\omega)$  [1].



**Figura 3.2:** Esquema del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  (en azul) y el campo magnético  $\mathbf{B}$  (en rojo) producido por un electrón que se mueve con velocidad  $\mathbf{v}$  constante.

En este trabajo se obtuvieron las funciones dieléctricas de datos experimentales y se extrapoló garantizando que las funciones respuesta sean causales. En ambos materiales, MgO y SiC, la extrapolación se llevó a cabo considerando los últimos datos experimentales, como se muestra en las Figs. (3.3 y 3.4), empleando como modelo una función lorentziana, es decir

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega(\omega + i\gamma)}, \quad (3.1)$$

ajustando los valores de  $\omega_p^2$ ,  $\omega_0^2$  y  $\gamma$ . La función dieléctrica (3.1) se obtiene mediante el *modelo de Lorentz* [56], el cual consiste en modelar la respuesta electromagnética de los materiales como si estuviesen hechos por átomos compuestos cada uno por un electrón sujeto a un núcleo masivo mediante un resorte con frecuencia natural  $\omega_0$ , y los procesos disipativos se modelan como una fuerza de arrastre, parametrizada por la constante fenomenológica  $\gamma$ . El parámetro  $\omega_p$  se conoce como *frecuencia de plasma*, la cual está dada por

$$\omega_p^2 = \frac{nq_e^2}{\epsilon_0 m_e}, \quad (3.2)$$

en donde  $\epsilon_0$  es la permitividad del vacío,  $n$  es el número de electrones por unidad de volumen,  $q_e$  es la carga del electrón y  $m_e$  la masa del electrón. De manera más general, la función dieléctrica de los materiales puede modelarse como la suma de funciones lorentzianas, cada una de las cuales modela las distintas excitaciones electrónicas y vibracionales del material [56].

Cuando se considera que los electrones son libres, i.e., que no están sujetos a los núcleos, de forma que  $\omega_0 = 0$ , el modelo de Lorentz, ec. (3.1), se convierte en el modelo

de Drude, dado por [56]

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (3.3)$$

Al analizar el caso de frecuencias altas en el modelo de Drude, dado por

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (3.4)$$

se encuentra que en la región  $\omega < \omega_p$  se tiene  $\epsilon(\omega) < 0$ , de modo que los campos electromagnéticos son evanecentes, mientras que en la región  $\omega > \omega_p$  la función dieléctrica es positiva y los campos electromagnéticos se propagan en el material<sup>4</sup>. De este modo, con el modelo de Drude en el régimen de altas frecuencias, ec. (3.4), se encuentra que la frecuencia de plasma  $\omega_p$  separa la *región propagante* de la *no propagante*.

Para la función dieléctrica del MgO se consideraron los datos experimentales medidos por Rafferty et al. (sin publicarse al momento) utilizando la técnica de espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS por sus siglas en inglés, *Electron Energy Loss Spectroscopy*), mientras que la función dieléctrica del SiC, para la morfología 6H<sup>5</sup>, se extrajo de [57], que es una recopilación de varios experimentos.

### 3.1. MgO y SiC

Desde 1999 se ha estudiado la TML de electrones rápidos a NPs metálicas [46], encontrándose una interacción longitudinal siempre atractiva y una transición de interacción atractiva a repulsiva (TAR) en la TML transversal para parámetros de impacto suficientemente pequeños y velocidades del electrón suficientemente altas [14]-[21]. El presente trabajo es, hasta donde tenemos conocimiento, el primer estudio utilizando partículas de MgO y SiC, en el cual se investiga la existencia de TAR.

El MgO es un material que ha sido estudiado con STEMs, de manera que se conoce su comportamiento en presencia de haces de electrones relativistas, en particular, se ha observado que el MgO genera radiación Cherenkov al interactuar con electrones

<sup>4</sup>Una onda EM monocromática de frecuencia  $\omega$  es un campo proporcional a  $\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ , en donde  $\mathbf{k}$  es el vector de propagación, o vector de onda, cuya magnitud es el número de onda  $k$ ,  $t$  es el tiempo y  $\mathbf{r}$  el vector de posición. Si dicha onda EM incide en un medio no magnético, lineal, homogéneo e isótropo, con respuesta EM dada por  $\epsilon(\omega)$ , entonces dentro del medio  $k = n(\omega/c)$ , en donde  $n = n(\omega) = \sqrt{\epsilon(\omega)}$  es el índice de refracción del medio. Entonces, si  $\epsilon(\omega) < 0$ , tanto el índice de refracción como el número de onda son imaginarios, por lo que dentro del medio la onda EM es proporcional a  $\exp(-kr)$ , de modo que la onda se atenúa exponencialmente conforme penetra el medio, es decir, se vuelve una onda evanecente. Si, por el contrario,  $\epsilon(\omega) > 0$  entonces  $k$  es real y la onda EM se propaga en el material [1], [56], [58], [59].

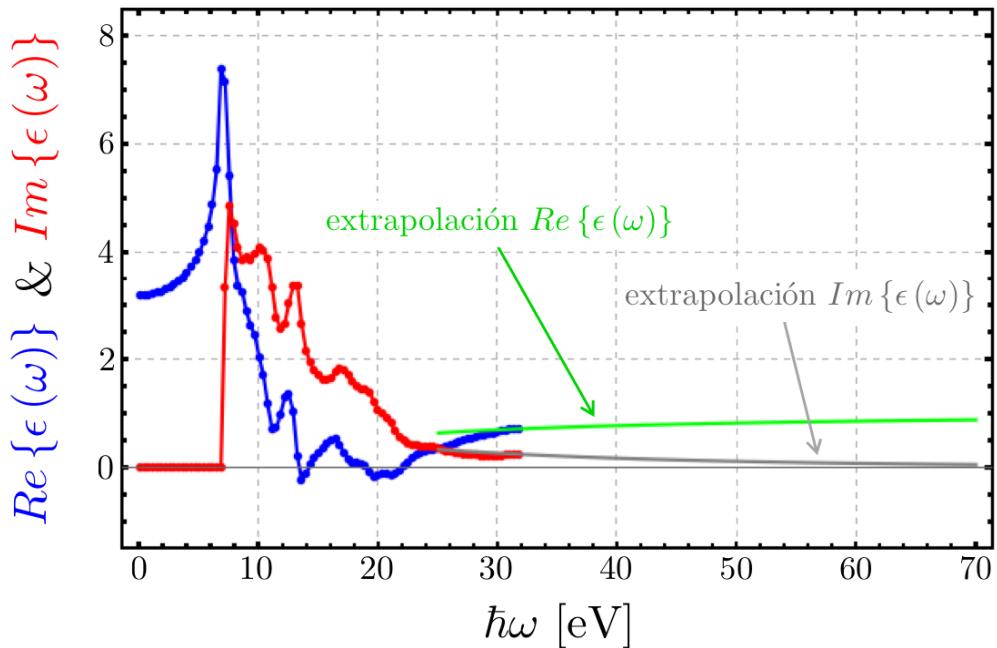
<sup>5</sup>Se ha elegido esta morfología por ser una de las más comunes en la naturaleza y la más estudiada hasta el momento [60].

del STEM [25]-[29]. Por su parte, el SiC es un material polarítónico de alto índice de refracción que ha sido utilizado para la fabricación de metamateriales y que además es de interés en la electrónica, en la que el silicio ha jugado un papel protagónico [30]-[32].

La función dieléctrica experimental del MgO se muestra en la Fig. 3.3 en función de la energía, tanto su parte real (en azul) como su parte imaginaria (en rojo), junto a su extrapolación –la parte real en verde y la parte imaginaria en gris– empleando una función lorentziana, ec. (3.1), con los parámetros:

$$\begin{aligned}\hbar^2\omega_p^2 &= 767.338 \text{ eV}^2, \\ \hbar^2\omega_0^2 &= -500.089 \text{ eV}^2, \\ \hbar\gamma &= 43.532 \text{ eV}.\end{aligned}\quad (3.5)$$

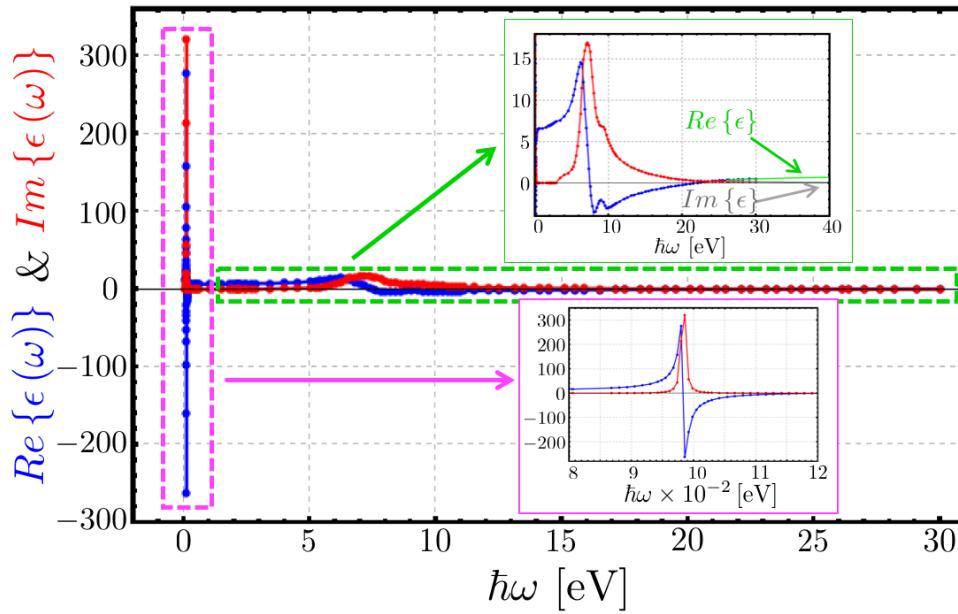
Es interesante notar en la Fig. 3.3 que el MgO tiene una parte imaginaria igual a cero



**Figura 3.3:** Gráfica de la función dieléctrica del MgO en función de la energía, tanto para la parte real (azul) como imaginaria (rojo). Los puntos representan los datos experimentales obtenidos por Rafferty et al. mediante EELS (sin publicarse al momento). La curva verde es la extrapolación de la parte real de  $\epsilon(\omega)$  y la gris la extrapolación de su parte imaginaria. Se han extendido las gráficas de las extrapolaciones hasta puntos dentro de la ventana experimental de manera se aprecie cómo se unen a los datos experimentales.

para frecuencias menores a 6.9 eV, por lo que en el visible será un material transparente. La parte real presenta un máximo en 6.9 eV, mientras que su parte imaginaria es nula, por lo que alrededor de esta frecuencia el MgO es un material de alto índice de refracción sin (o con muy poca) absorción.

En la Fig. 3.4 se muestra la función dieléctrica del carburo de silicio (SiC) –la parte real en azul y la parte imaginaria en rojo– como función de la energía, junto a su extrapolación –la parte real en verde y la parte imaginaria en gris–. Se han magnificado las regiones encerradas por recuadros punteados, de manera que la estructura de  $\epsilon(\omega)$  sea apreciable. En particular, en la región encerrada en magenta se aprecia la resonancia en la región de THz. Las extrapolaciones de  $\epsilon(\omega)$  del SiC se hicieron empleando una



**Figura 3.4:** Gráfica de la función dieléctrica del SiC en función de la energía, tanto para la parte real (azul) como imaginaria (rojo), tomados de [57]. La curva verde es la extrapolación de la parte real de  $\epsilon(\omega)$  y la gris la extrapolación de su parte imaginaria. Se han hecho magnificaciones de las regiones encerradas en magenta y verde.

función lorentziana, ec. (3.1), con los siguientes parámetros

$$\begin{aligned} \hbar^2\omega_p^2 &= 496 \text{ eV}^2, \\ \hbar^2\omega_0^2 &= 4.25 \text{ eV}^2, \\ \hbar\gamma &= 10.48 \text{ eV}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Es interesante notar en la Fig. 3.4 que el SiC presenta una resonancia tipo lorentziana, centrada en  $\sim 9.8 \times 10^{-2}$  eV (región de THz), con potenciales aplicaciones tecnológicas para la construcción de sistemas metamateriales para la manipulación de haces de THz, comunicaciones, seguridad e imagenología [31]. Se observa otra resonancia tipo lorentziana centrada en  $\sim 7.5$  eV. La parte imaginaria de la función dieléctrica del SiC es cero de 0.1 eV a 3 eV mientras  $Re\{\epsilon(\omega)\}$  toma valores entre 6 y 7.4, por lo

que en el infrarrojo y en el visible el SiC es un material de alto índice de refracción sin absorción. De 7.4 eV a 22.5 eV,  $Re\{\epsilon(\omega)\} < 0$  por lo que en el ultravioleta el SiC es opaco.

### 3.2. Resultados y discusión

#### TML de electrones relativistas a NPs de MgO

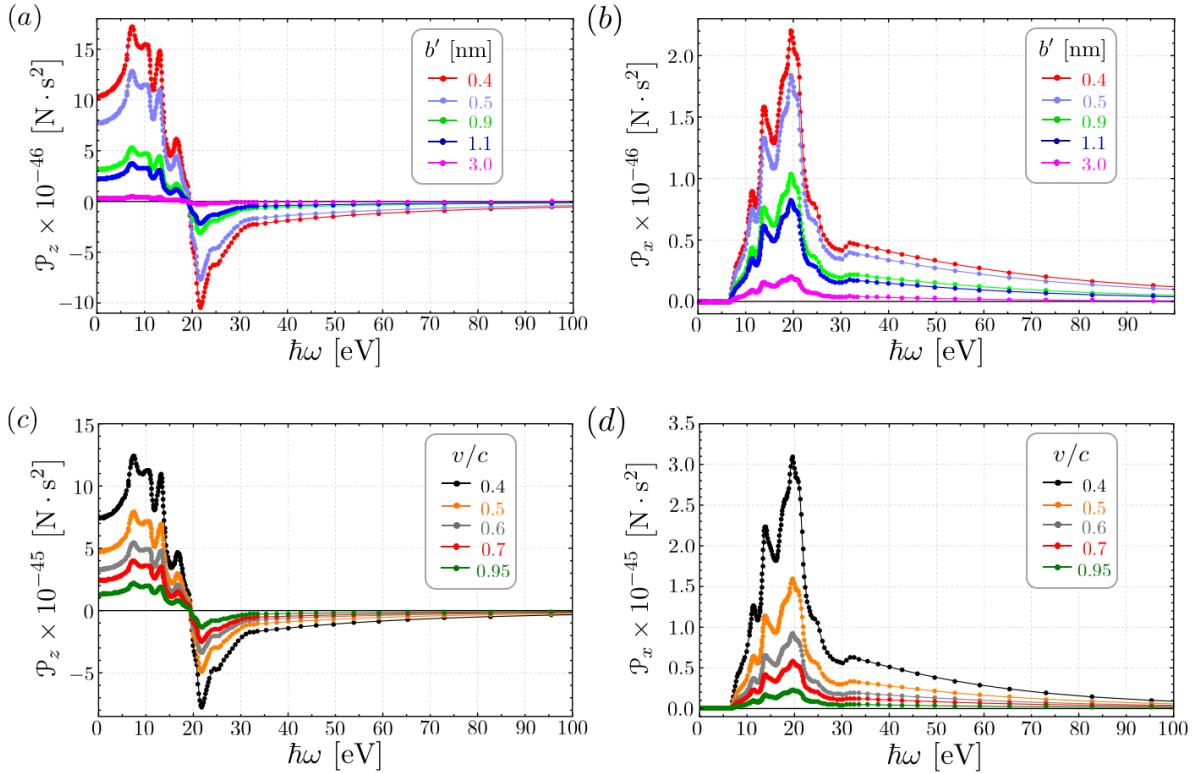
Al estudiar la TML de electrones relativistas a una NP esférica de MgO, de radio  $a = 1$  nm, se calculó la TML en función de la velocidad del electrón para un parámetro de impacto  $b' = 0.3$  nm fijo, elegido de acuerdo los resultados en NPs metálicas en los que se ha encontrado TAR, estudiando la TML a velocidades del electrón de  $0.1c$  a  $0.95c$  y se encontró una TAR en la TML transversal  $\Delta P_z$  a aproximadamente  $v = 0.8c$ . Por otra parte, en el estudio de la TML en función de  $b'$  a una velocidad del electrón fija de  $0.9c$ , elegida debido a que en esta velocidad  $\Delta P_z < 0$  para  $b' = 0.3$  nm, se estudió la TML para parámetros de impacto  $b'$  entre 0.3 nm y 5 nm, observándose una TAR en  $\Delta P_z$  en aproximadamente  $b' = 0.5$  nm. Como en los estudios previos con NPs metálicas, se observó en el MgO una **TAR en la interacción transversal** y una interacción longitudinal atractiva en todos los casos considerados. La interacción longitudinal atractiva indica que el electrón arrastra a la NP en la dirección de su movimiento (dirección  $x$ ) y la TAR indica que en la dirección transversal ( $z$ ), el electrón a veces atrae a la NP y a veces la repele. Lo anterior indica que el comportamiento de la TML en dieléctricos puede ser el mismo que en metales y que, en particular, el fenómeno de la TAR puede presentarse en materiales dieléctricos.

En la Fig. 3.5 se muestran los resultados del cálculo de la densidad espectral  $\mathbf{P}(\omega)$  de la TML (DETML) para el caso del MgO. La Fig. 3.5a muestra la DETML transversal  $\mathcal{P}_z(\omega)$  como función de la energía para distintos parámetros de impacto  $b'$ , con una velocidad del electrón constante  $v = 0.9c$ , mientras que en la Fig. 3.5b se muestra  $\mathcal{P}_x(\omega)$  en las mismas condiciones. Se observa que  $|\mathcal{P}_x(\omega)|$  y  $|\mathcal{P}_z(\omega)|$  disminuyen<sup>6</sup> conforme aumenta  $b'$ , de modo que la magnitud de  $\mathbf{P}(\omega)$  también disminuye al aumentar  $b'$ . Además,  $\mathcal{P}_x(\omega)$  es positiva en todas las energías y parámetros de impacto considerados, por lo que al llevar a cabo la integral en la coordenada  $x$  de la ec. (2.14) se obtuvo una TML longitudinal  $\Delta P_x$  positiva para los valores  $b'$  considerados. Por otro lado  $\mathcal{P}_z(\omega)$  pasa de ser positiva a negativa, con lo cual la TML transversal  $\Delta P_z$  puede ser positiva, negativa o cero.

Las Figs. 3.5c y 3.5d muestran  $\mathcal{P}_z(\omega)$  y  $\mathcal{P}_x(\omega)$ , respectivamente, en función de la

---

<sup>6</sup> $|z|$  denota el módulo de  $z$ .



**Figura 3.5:** Gráficas de las DETML de un electrón relativista a una NP de MgO como función de la energía. (a) DETML transversal  $\mathcal{P}_z(\omega)$  y (b) DETML longitudinal  $\mathcal{P}_x(\omega)$  para distintos valores de  $b'$ , con una velocidad del electrón  $v = 0.9c$  constante. (c)  $\mathcal{P}_z(\omega)$  y (b)  $\mathcal{P}_x(\omega)$  para distintos valores de la velocidad del electrón con  $b' = 0.3$  nm constante.

energía para diferentes velocidades del electrón con un parámetro de impacto  $b' = 0.3$  nm constante. Se observa que la magnitud de  $\mathcal{P}(\omega)$  disminuye conforme aumenta la velocidad del electrón. Más aún,  $\mathcal{P}_x(\omega)$  vuelve a ser positivo para todos los parámetros considerados por lo que  $\Delta P_x > 0$  tanto en función de  $b'$  como de  $v$ , indicando que en el MgO se tiene una **interacción atractiva** en la dirección longitudinal en todos los casos considerados. Lo anterior se traduce en que el electrón a su paso arrastra a la NP en la dirección en la que se mueve. En la Fig. 3.5c se aprecia que  $\mathcal{P}_z(\omega)$  pasa de valores positivos a negativos, indicando la posibilidad de TAR en  $\Delta P_z$  tanto en función de  $v$  como de  $b'$ .

La disminución de la magnitud de  $\mathcal{P}(\omega)$  conforme aumenta  $b'$  indica que la contribución de cada frecuencia a la TML disminuye si el electrón se aleja de la NP. Lo anterior es de esperarse ya que conforme el electrón se aleja de la NP, el campo EM externo disminuye sobre la NP, produciendo que el campo esparcido por la NP sea menos intenso y así el campo total sobre la superficie de integración  $S$  de la ec. (2.14) es más pequeño, produciendo una  $\mathcal{P}(\omega)$  de menor magnitud.

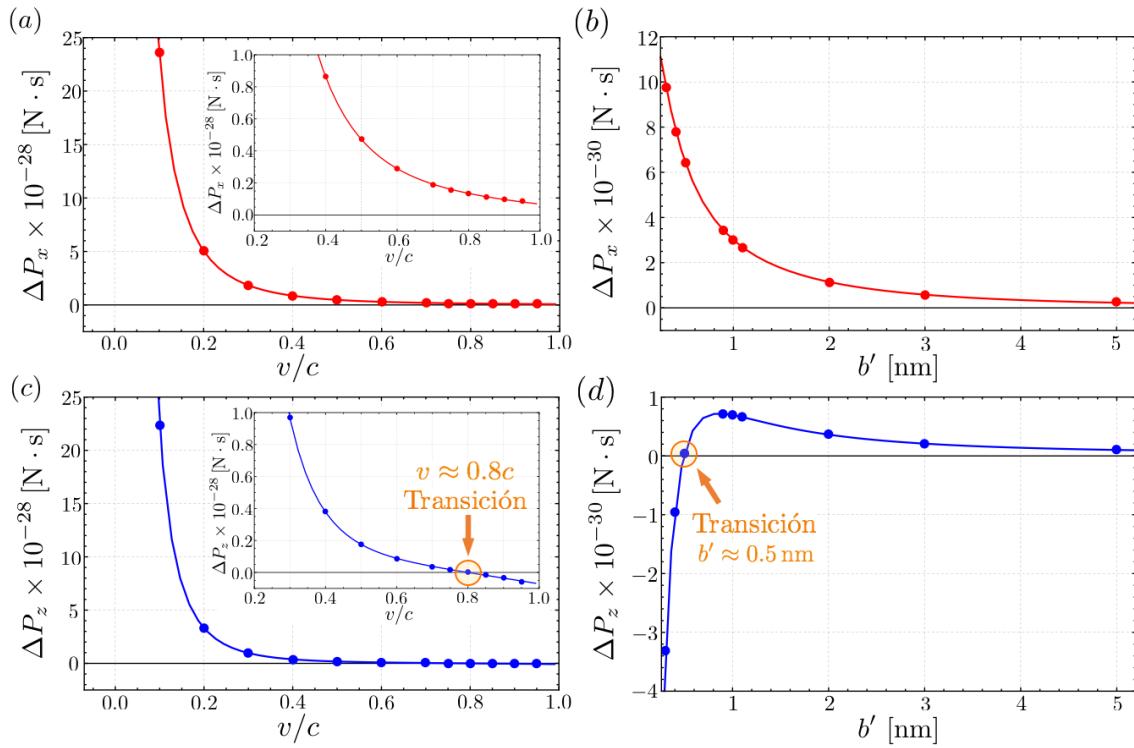
La interacción entre la NP y el electrón es más importante cuando están cerca el uno del otro (a unos cuantos diámetros de la NP). Conforme la rapidez  $v$  del electrón aumenta, el tiempo en que la NP y el electrón están cerca es cada vez menor, mientras que el campo EM producido por el electrón está más concentrado, por lo que, *a priori*, antes de considerar la Fig. 3.5, no es claro el efecto del aumento de  $v$  en la interacción. Ahora bien, la disminución de la magnitud de  $\mathbf{P}(\omega)$  conforme aumenta  $v$  que se observa en las Figs. 3.5c y 3.5d indica que la contribución de cada frecuencia a la TML disminuye si el electrón viaja más rápido, de modo que el efecto del aumento de  $v$  es disminuir la interacción entre la NP y el electrón.

En la Fig. 3.6 se muestran los resultados para la TML<sup>7</sup> a una NP de MgO en función del parámetro de impacto  $b'$  y de la velocidad  $v$  del electrón. Las líneas que unen los puntos sirven sólo como ayuda visual. En las Figs. 3.6a y 3.6b se observa que la TML longitudinal es positiva en todos los casos y disminuye conforme  $v$  y  $b'$  aumentan, de manera que el electrón siempre atrae a la NP en la dirección longitudinal, es decir, en el MgO la **interacción longitudinal es atractiva**, de modo que el electrón siempre arrastra a la NP en la dirección de su movimiento, lo cual es consistente con el análisis de la DETML. En contraste, en las Figs. 3.6c y 3.6d se observa que la TML transversal es positiva en unos casos y negativa en otros, por lo que hay ciertos parámetros de impacto y velocidades del electrón en los que ocurre una **transición de interacción atractiva a repulsiva** para el MgO. En particular, para los parámetros utilizados en el cálculo se observa que para un parámetro de impacto fijo  $b' = 0.3$  nm esta transición ocurre para  $v \approx 0.8c$ , y que para una velocidad del electrón fija de  $v = 0.9c$  la transición ocurre para  $b' \approx 0.5$  nm; ambos puntos se han señalado en las Figs. 3.6c y 3.6d. Más aún, la curva de  $\Delta P_z(v)$  (Fig. 3.6c) es decreciente conforme aumenta  $v$ , sin embargo,  $\Delta P_z(b)$  (Fig. 3.6d) es creciente para parámetros de impacto pequeños, pasa de ser negativo a positivo en la TAR y alcanza un valor máximo para  $b' \approx 0.8$  nm, después del cual disminuye tiendiendo a cero con valores positivos de  $\Delta P_z$ .

## TML de electrones relativistas a NPs de SiC

En el estudio de la TML de electrones relativistas a NPs esféricas de SiC de radio  $a = 1$  nm, llevado a cabo para los mismos parámetros que el estudio con MgO, se obtuvo una interacción longitudinal atractiva del mismo modo que en el MgO y los metales, de manera que el electrón arrastra a la NP de SiC en dirección  $x$ . Sin embargo, al estudiar la TML transversal **no se encontró la presencia de TAR** en ninguno de los parámetros considerados. Es decir, en todos los casos se obtuvo una interacción

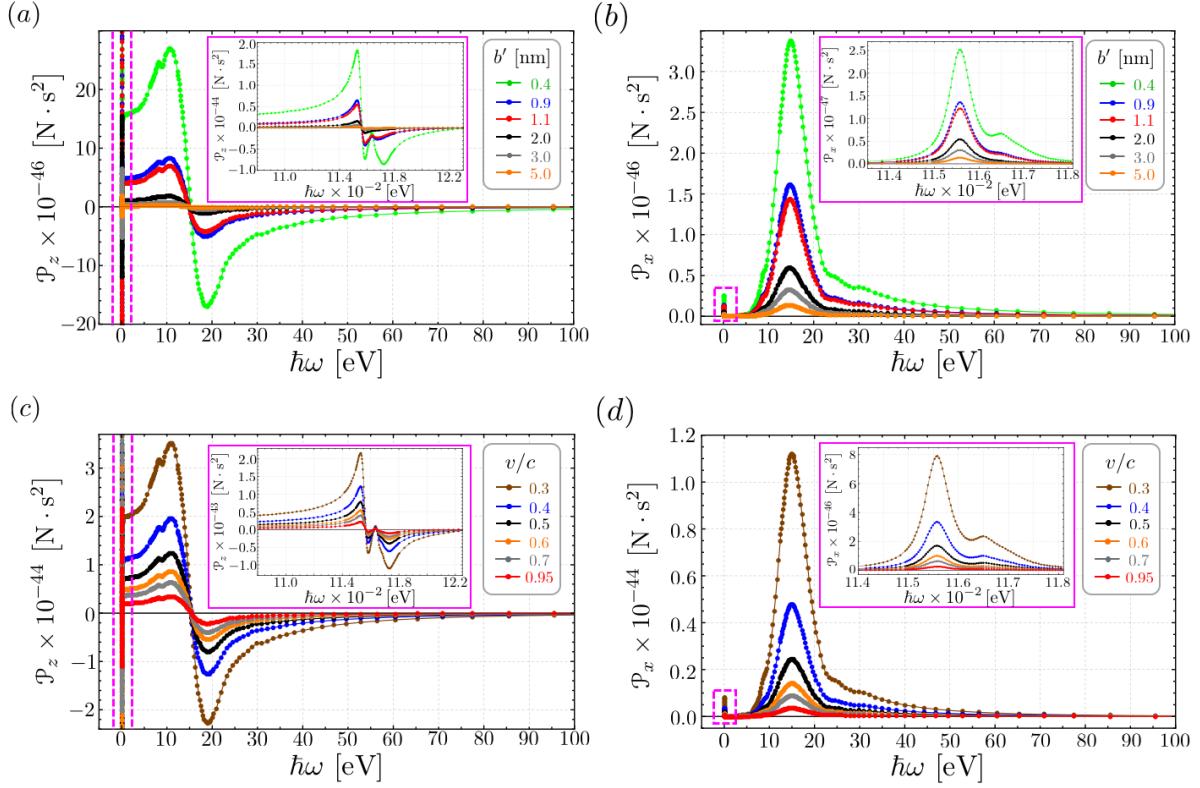
<sup>7</sup>Las TML que se muestran en la Fig. 3.6 resultan de integrar las DETML mostradas en la Fig. 3.5, de acuerdo con la ec. (2.14).



**Figura 3.6:** TML longitudinal (a) como función de la velocidad del electrón para un parámetro de impacto constante  $b' = 0.3 \text{ nm}$ , (b) como función de  $b'$  para  $v = 0.9c$  y TML transversal (c) como función de la velocidad del electrón con  $b' = 0.3 \text{ nm}$  constante y (d) como función de  $b'$  (con  $v = 0.9c$  constante) de un electrón rápido a una NP de MgO. Las líneas que unen los puntos son sólo una ayuda visual.

atractiva, de manera que el electrón arrastra a la NP hacia él, tanto en dirección  $x$  como en  $z$ . Lo anterior indica que puede haber ciertos materiales dieléctricos para los cuales no existan interacciones repulsivas.

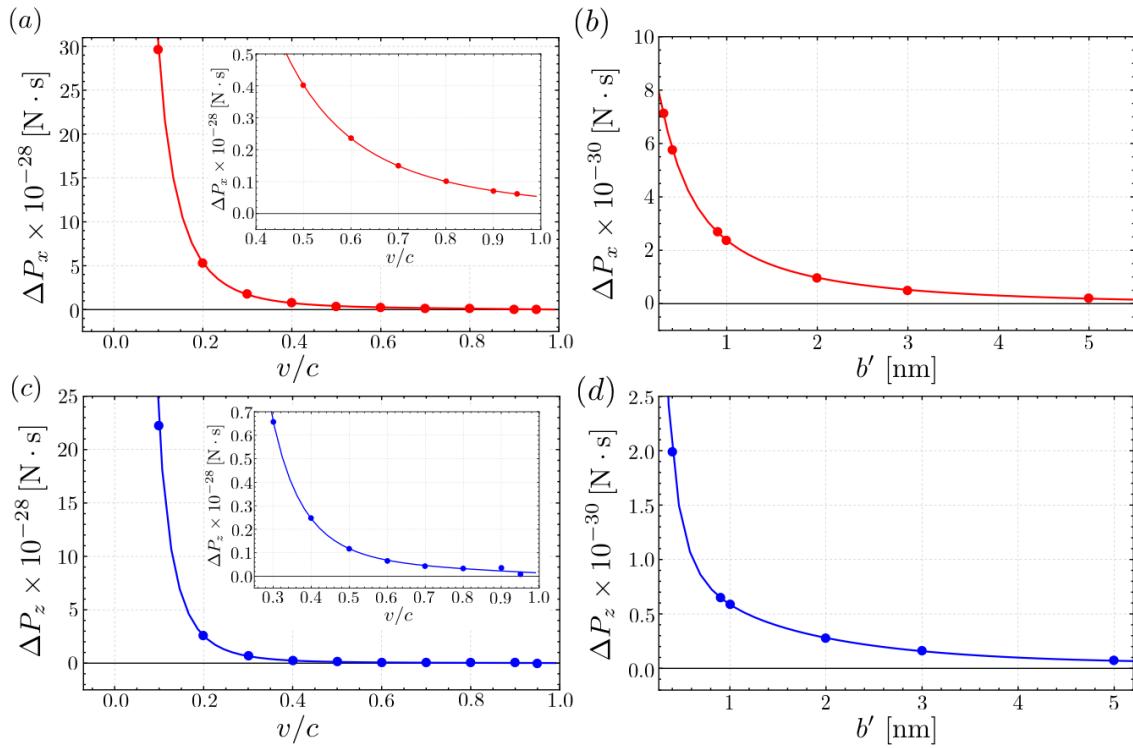
Considerando los mismos parámetros que para el MgO, se estudió la DETML y la TML en función de  $v$  para  $b' = 0.3 \text{ nm}$  constante, y en función de  $b'$  con  $v = 0.9c$  constante. Para la DETML como función de la energía se obtuvieron las gráficas de la Fig. 3.7. En la Fig. 3.7b se observa que la DETML longitudinal  $\mathcal{P}_x(\omega)$  es positiva para todos los valores de  $b'$  considerados, mientras la Fig. 3.7d muestra que  $\mathcal{P}_x(\omega)$  es también positiva para los valores de  $v$  considerados, por lo que nuevamente la TML longitudinal será positiva. En contraste, en las Figs. 3.7a y 3.7c se observa que la DETML transversal  $\mathcal{P}_z(\omega)$  tiene valores tanto positivos como negativos para los valores de  $v$  y  $b'$  considerados, dando pie a la posible presencia de TAR. Más aún, al igual que en el caso del MgO se observa en las Figs. 3.7 que la magnitud de  $\mathcal{P}(\omega)$  disminuye conforme  $v$  y  $b'$  aumentan, lo cual es de esperarse de acuerdo a lo discutido en la sección anterior.



**Figura 3.7:** Gráficas de las DETML de un electrón relativista a una NP de SiC como función de la energía. **(a)** DETML transversal  $\mathcal{P}_z(\omega)$  y **(b)** DETML longitudinal  $\mathcal{P}_x(\omega)$  para distintos valores de  $b'$  con una velocidad del electrón  $v = 0.9c$  constante. **(c)**  $\mathcal{P}_z(\omega)$  y **(b)**  $\mathcal{P}_x(\omega)$  para distintos valores de la velocidad del electrón con  $b' = 0.3$  nm constante. Se han hecho magnificaciones de las regiones encerradas en magenta.

Al analizar los resultados de la TML, presentados en la Fig. 3.8<sup>8</sup>, se observa que la TML transversal y la longitudinal disminuyen conforme  $v$  aumenta (Figs. 3.8a y 3.8c), y que la TML longitudinal disminuye conforme  $b'$  aumenta (Fig. 3.8b), sin embargo, a diferencia del MgO, en el SiC la TML transversal es positiva y decreciente para los valores de  $b'$  considerados (Fig. 3.8d). Más aún, en las Figs. 3.8c y 3.8d se observa que **en todos los casos considerados** la interacción entre el electrón y la NP de SiC es **atractiva**. Lo anterior es interesante debido a que se han estudiado los casos en los que el MgO y las NPs metálicas han mostrado TAR, sin embargo no se ha encontrado TAR en el SiC, lo que indica que pueden existir materiales dieléctricos en los que la interacción entre el electrón y la NP sea siempre atractiva.

<sup>8</sup>Las TML que se muestran en la Fig. 3.8 resultan de integrar las DETML mostradas en la Fig. 3.7, de acuerdo con la ec. (2.14).



**Figura 3.8:** TML longitudinal **(a)** como función de la velocidad del electrón para un parámetro de impacto constante  $b = 0.3 \text{ nm}$ , **(b)** como función del parámetro de impacto para una velocidad constante del electrón de magnitud  $v = 0.9c$  y TML transversal **(c)** como función de la velocidad del electrón con  $b = 0.3 \text{ nm}$  constante y **(d)** como función del parámetro de impacto (con  $v = 0.9c$  constante) de un electrón rápido a una NP de SiC. Las líneas que unen los puntos son sólo una ayuda visual.

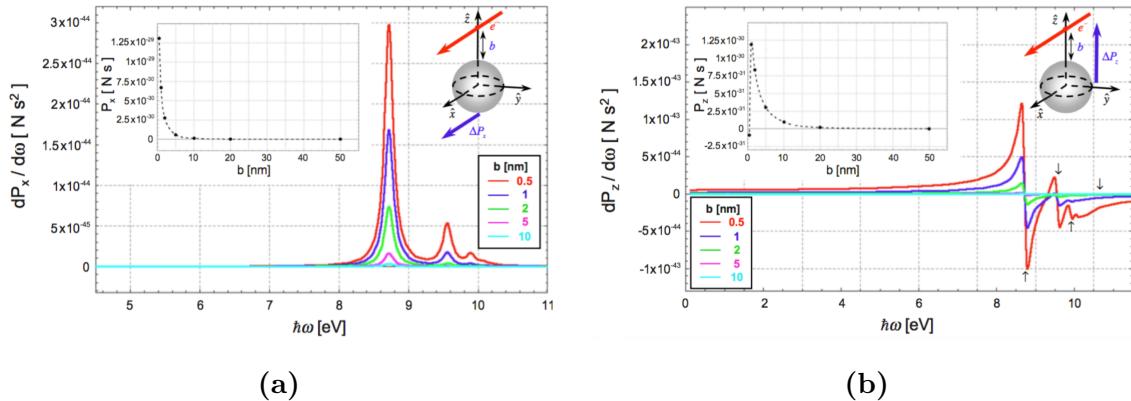
### 3.3. Metales vs dieléctricos

En el estudio de la TML de electrones rápidos a NPs metálicas se ha encontrado que el electrón siempre arrastra a la NP en dirección longitudinal (interacción longitudinal atractiva) mientras que, en algunos casos, la componente transversal presenta una TAR, lo cual se ha relacionado con la respuesta plasmónica de dichas NPs [15]-[21]. Por ejemplo, en la Fig. 3.9, reproducida de [16], se muestran la DETML<sup>9</sup> como función de la energía y la TML como función del parámetro de impacto desde la superficie (como subgráfica) para una NP de aluminio (Al) tipo Drude<sup>10</sup>. Se observa que la DETML longitudinal es positiva para los parámetros de impacto considerados (Fig. 3.9a) produciendo una interacción longitudinal atractiva, mientras que  $\mathcal{P}_z(\omega)$  es tanto positiva como negativa (Fig. 3.9b), permitiendo la TAR. Esto mismo sucede para NPs

<sup>9</sup>En [16] se denota la DETML como  $d\mathbf{P}/d\omega$  en lugar de  $\mathbf{P}(\omega)$ .

<sup>10</sup>En las Figs. 3.9 se utilizan funciones dieléctricas tipo Drude:  $\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p}{\omega(\omega+i\Gamma)}$ .

de oro (Au), como puede apreciarse en la Fig. 3.10, también reproducida de [16]<sup>11</sup>. En efecto, la DETML longitudinal (Fig. 3.10a) resulta positiva para los casos considerados dando pie a una TML longitudinal positiva, mientras que la DETML transversal (Fig. 3.10b) cambia de signo dando pie a una TAR en la TML transversal. Del mismo modo que con el MgO y el SiC (ver Figs. 3.5 y 3.5 ), en el Al (Fig. 3.9) y el Au (Fig. 3.10) la magnitud de la DETML longitudinal disminuye conforme el parámetro de impacto aumenta. Ahora bien, la TML en el MgO (Fig. 3.6) se comporta como en ambos metales: La TML longitudinal es positiva y disminuye conforme el parámetro de impacto aumenta (Fig. 3.6b) -al igual que en el SiC (Fig. 3.8b)- y la TML trasversal pasa de ser negativa y creciente a positiva y creciente (TAR) hasta alcanzar un valor máximo para luego decrecer tendiendo a cero por arriba (Fig. 3.6d).



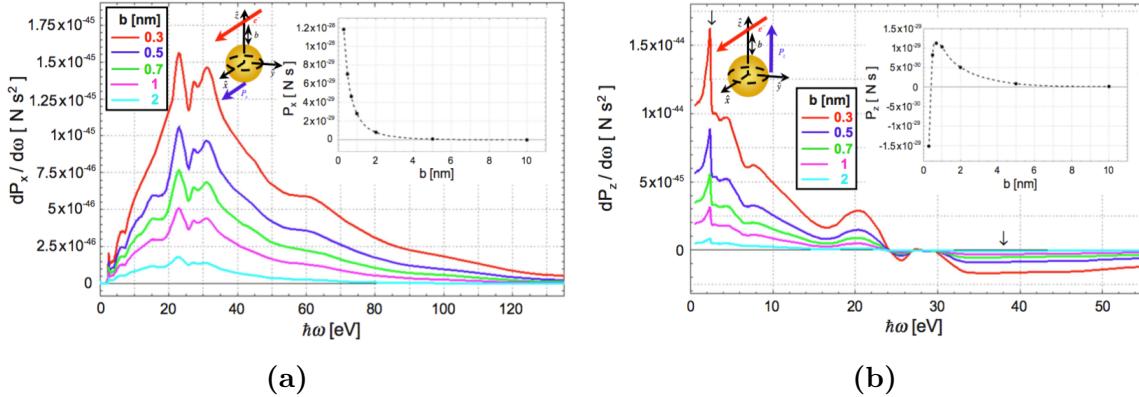
**Figura 3.9:** Gráficas de la DETML y TML (a) longitudinal  $\mathcal{P}_x(\omega)$  y (b) transversal  $\mathcal{P}_z(\omega)$ , como función del parámetro de impacto (con  $v = 0.5c$  constante), de un electrón rápido a una NP metálica de aluminio tipo Drude. Figuras tomadas de [16].

La Fig. 3.11, tomada de [14], muestran la TML como función de la velocidad del electrón para NPs metálicas de Al tipo Drude<sup>12</sup>. Se observa que la TML longitudinal es positiva para los valores de  $v$  considerados (Fig. 3.11a), del mismo modo que para el SiC (Fig. 3.8a) y el MgO (Fig. 3.6a). Sin embargo, como en el caso del MgO (Fig. 3.6c), ocurre una TAR para la TML transversal para una velocidad  $v \approx 0.9c$  (Fig. 3.11b). Nuevamente, como en el SiC y el MgO (Figs. 3.6a, 3.6c, 3.8a y 3.8c), se observa en la Fig. 3.11 la disminución de la TML conforme aumenta la velocidad del electrón.

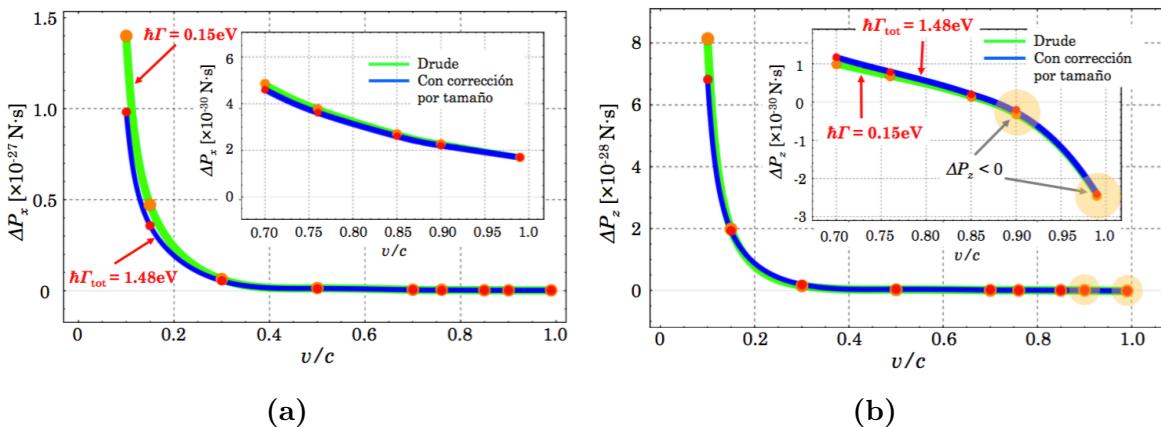
Una característica interesante es que la TML (Figs. 3.6, 3.8, 3.9, 3.10 y 3.11) en los materiales considerados (MgO, SiC, Al y Au) tienen órdenes de magnitud similares: como función de la velocidad la TML es del orden de  $10^{-28}$  Ns mientras que como

<sup>11</sup>En la Fig. 3.10 se utilizan datos experimentales de [57] para la  $\epsilon(\omega)$  del oro.

<sup>12</sup>En las Figs. 3.11 se utilizan funciones dieléctricas tipo Drude y tipo Drude con corrección por tamaño, las cuales incorporan en la constante de amortiguamiento  $\Gamma$  el efecto de las colisiones de los electrones con la frontera del nanopartícula [14].



**Figura 3.10:** Gráficas de la DETML y TML (a) longitudinal  $\mathcal{P}_x(\omega)$  y (b) transversal  $\mathcal{P}_z(\omega)$ , como función del parámetro de impacto (con  $v = 0.5c$  constante), de un electrón rápido a una NP metálica de oro cuya  $\epsilon(\omega)$  fue tomada de [57]. Figuras tomadas de [16].



**Figura 3.11:** Gráficas de la TML (a) longitudinal y (b) transversal de un electrón rápido a una NP metálica tipo Drude como función de la velocidad del electrón. Figuras tomadas de [14].

función del parámetro de impacto la TML es del orden de  $10^{-30}$  Ns.

Los resultados de este estudio muestran que para ciertos materiales dieléctricos, como el MgO, ocurre una TAR para condiciones similares en las que ocurre para Al y Au, mientras que para otros, como el SiC, no existe TAR en estas condiciones. Una consecuencia interesante es la posible implementación de pinzas electrónicas para ciertas NPs dieléctricas como las de MgO.

## Conclusiones y perspectivas

Al estudiar la transferencia de momento lineal (TML) de un electrón relativista a una nanopartícula (NP) esférica de radio  $a = 1 \text{ nm}$ , hecha de óxido de magnesio (MgO), se encontró una transición de interacción atractiva a repulsiva (TAR) para la componente transversal de la TML para

- una velocidad del electrón  $v \sim 0.8c$ , al mantener el parámetro de impacto desde la superficie  $b'$  fijo en  $0.3 \text{ nm}$ , y
- para  $b' \sim 0.5 \text{ nm}$ , manteniendo una velocidad del electrón  $v = 0.9c$  constante.

Lo anterior indica que el fenómeno de la TAR no se limita a metales ni a sus propiedades plasmónicas, sugiriendo la posible extensión de la aplicabilidad de la tecnología de pinzas electrónicas a ciertas NPs dieléctricas.

En contraste, al estudiar la TML de un electrón relativista a una NP esférica de carburo de silicio (SiC), de radio  $a = 1 \text{ nm}$ , no se encontró TAR para ninguno de los casos considerados, de manera que la interacción entre el electrón y la NP de SiC es siempre atractiva, i.e., el electrón a su paso siempre atrae a la NP de SiC hacia él en la dirección transversal. Lo anterior indica que pueden existir materiales en los cuales no exista TAR.

Por otro lado, tanto en el SiC como en el MgO, se han encontrado características similares a las presentes en los estudios anteriores utilizando NPs metálicas hechas de oro (Au) y aluminio (Al). Concretamente, se encontró que

- La interacción longitudinal es siempre atractiva, por lo que el electrón siempre arrastra a la NP en la dirección de su trayectoria. Lo anterior se debe a que la

densidad espectral de transferencia de momento lineal (DETML) longitudinal es siempre positiva como función de la energía.

- La DETML transversal presenta valores tanto positivos como negativos en función de la energía, lo cual da pie a la posible existencia de TAR.
- La interacción entre el electrón y la NP disminuye conforme aumentan la velocidad del electrón y el parámetro de impacto. Esto se aprecia en la disminución de la magnitud de la DETML conforme  $v$  y  $b'$  aumentan.
- La TML longitudinal disminuye conforme aumenta el parámetro de impacto, y tanto la TML longitudinal como la transversal disminuyen conforme la velocidad del electrón aumenta.
- La TML de electrones a NPs de MgO y SiC es de un orden de magnitud similar que para nanopartículas de aluminio y oro. En los cuatro materiales, la TML como función de la velocidad es del orden de  $10^{-28}$  Ns, mientras que como función del parámetro de impacto, la TML es del orden de  $10^{-30}$  Ns.

## Perspectivas

Algunas de las posibilidades para el trabajo futuro en el estudio de la transferencia de momento de electrones relativistas a NPs son las siguientes:

- Entender el fenómeno físico responsable de la TAR. En particular, sería deseable explicar por qué en ciertos materiales, como el MgO, existe una TAR, mientras que en otros, como el SiC, no existe. Para esto podría resultar útil separar las contribución eléctrica a la TML de la magnética y estudiar otros materiales.
- Analizar qué le sucede al electrón en su interacción con la NP.
- Estudiar teóricamente la transferencia de momento angular (TMA) de electrones rápidos a NPs metálicas y dieléctricas tanto en el dominio de frecuencias como en el dominio temporal.
- Encontrar una expresión analítica para la TML resolviendo y simplificando las integrales de la ec. (2.14), de manera que puedan ahorrarse recursos computacionales y se eviten problemas de convergencia, permitiendo entender la física de la TML de una forma más clara y sencilla.
- Proponer experimentos que confirmen los resultados teóricos que han sido obtenidos hasta el momento.

# Apéndice A

## Paridad del integrando en la TML

En este apéndice se analizan las propiedades de simetría y paridad que permiten expresar la transferencia de momento lineal del electrón a la nanopartícula como en la ec. (2.14):

$$\Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \oint_S \text{Re} \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] + \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega)] \right\} \cdot d\mathbf{a} d\omega.$$

Los campos electromagnéticos, al ser observables físicas, son campos reales. En particular, la transformada de Fourier del campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}; t)$  es

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; t) e^{i\omega t} dt. \quad (\text{A.1})$$

Por claridad en la notación se omitirá la dependencia en  $\mathbf{r}$  en lo subsecuente, de manera que  $\mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) = \mathbf{E}(\omega)$ . La transformada de Fourier (A.1) es en general una cantidad compleja, por lo que puede escribirse como

$$\mathbf{E}(\omega) = \mathbf{E}'(\omega) + i\mathbf{E}''(\omega), \quad (\text{A.2})$$

en donde  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\mathbf{E}'(\omega)$  es la parte real de  $\mathbf{E}(\omega)$  y  $\mathbf{E}''(\omega)$  su parte imaginaria, ambos campos vectoriales reales. Como el campo eléctrico es una cantidad real, entonces de (A.1) se sigue que

$$\mathbf{E}^*(\omega) = \mathbf{E}(-\omega), \quad (\text{A.3})$$

y como

$$\mathbf{E}^*(\omega) = \mathbf{E}'(\omega) - i\mathbf{E}''(\omega), \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{E}(-\omega) = \mathbf{E}'(-\omega) + i\mathbf{E}''(-\omega), \quad (\text{A.5})$$

entonces

$$\mathbf{E}'(\omega) = \mathbf{E}'(-\omega) \quad \text{y} \quad -\mathbf{E}''(\omega) = \mathbf{E}''(-\omega), \quad (\text{A.6})$$

por lo tanto, la parte real de  $\mathbf{E}(\omega)$  es una función par y la imaginaria es una función impar. Además, se sabe que el producto de funciones pares es par, el de impares también es par, y el producto de una función par y una impar es impar. En coordenadas cartesianas se puede escribir

$$\mathbf{E}(\omega) = E_x(\omega) \hat{\mathbf{e}}_x + E_y(\omega) \hat{\mathbf{e}}_y + E_z(\omega) \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (\text{A.7})$$

con  $E_j(\omega) = E'_j(\omega) + iE''_j(\omega)$ ,  $j \in \{x, y, z\}$ , en donde  $E'_j$  denota a la parte real de  $E_j$  y  $E''_j$  a su parte imaginaria. De este modo  $E'_j$  es una función par y  $E''_j$  una función impar para  $j \in \{x, y, z\}$ .

En la ec. (2.13) de la transferencia de momento

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} = & \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] + \right. \\ & \left. + \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega)] \right\} \cdot d\mathbf{a} d\omega, \end{aligned}$$

aparecen diádicas formadas por el campo y su complejo conjugado, por ejemplo  $\mathbf{E}(\omega)\mathbf{E}^*(\omega)$ . Utilizando coordenadas cartesianas, estas diádicas pueden escribirse en forma de matriz:

$$\mathbf{E}(\omega)\mathbf{E}^*(\omega) = \begin{pmatrix} E_x(\omega)E_x^*(\omega) & E_x(\omega)E_y^*(\omega) & E_x(\omega)E_z^*(\omega) \\ E_y(\omega)E_x^*(\omega) & E_y(\omega)E_y^*(\omega) & E_y(\omega)E_z^*(\omega) \\ E_z(\omega)E_x^*(\omega) & E_z(\omega)E_y^*(\omega) & E_z(\omega)E_z^*(\omega) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

El término  $E_x(\omega)E_x^*(\omega)$  puede escribirse como

$$\begin{aligned} E_x(\omega)E_x^*(\omega) &= [E'_x(\omega) + iE''_x(\omega)][E'_x(\omega) - iE''_x(\omega)] = \\ &= E'_x(\omega)E'_x(\omega) - iE'_x(\omega)E''_x(\omega) + iE''_x(\omega)E'_x(\omega) + E''_x(\omega)E''_x(\omega) \\ &= E'_x(\omega)E'_x(\omega) + E''_x(\omega)E''_x(\omega) + i[E''_x(\omega)E'_x(\omega) - E'_x(\omega)E''_x(\omega)] \\ &= E'_x(\omega)E'_x(\omega) + E''_x(\omega)E''_x(\omega), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

de manera que  $E_x(\omega)E_x^*(\omega)$  es una función real [es el módulo cuadrado de  $E_x(\omega)$ ] y par pues involucra el producto de funciones pares (primer término) y de funciones

impares (segundo término). Lo mismo sucede con  $E_y(\omega)E_y^*(\omega)$  y  $E_z(\omega)E_z^*(\omega)$ , los otros dos elementos de la diagonal de (A.8). Para los elementos fuera de la diagonal se tiene

$$\begin{aligned} E_i(\omega)E_j^*(\omega) &= [E'_i(\omega) + iE''_i(\omega)] [E'_j(\omega) - iE''_j(\omega)] = \\ &= E'_iE'_j + E''_iE''_j + i [E''_iE'_j - E'_iE''_j] \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

con  $i \neq j$ . Omitiendo la dependencia en  $\omega$  en las entradas, la matriz de la ec. (A.8) se puede reescribir como

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\omega)\mathbf{E}^*(\omega) &= \begin{pmatrix} E'_x E'_x + E''_x E''_x & E'_x E'_y + E''_x E''_y & E'_x E'_z + E''_x E''_z \\ E'_y E'_x + E''_y E''_x & E'_y E'_y + E''_y E''_y & E'_y E'_z + E''_y E''_z \\ E'_z E'_x + E''_z E''_x & E'_z E'_y + E''_z E''_y & E'_z E'_z + E''_z E''_z \end{pmatrix} + \\ &+ i \begin{pmatrix} 0 & E''_x E'_y - E'_x E''_y & E''_x E'_z - E'_x E''_z \\ E''_y E'_x - E'_y E''_x & 0 & E''_y E'_z - E'_y E''_z \\ E''_z E'_x - E'_z E''_x & E''_z E'_y - E'_z E''_y & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

por lo que la parte real de  $\mathbf{E}(\omega)\mathbf{E}^*(\omega)$  es una función simétrica y par, mientras que su parte imaginaria es una función antisimétrica e impar. Por lo tanto (A.10) se puede reescribir como

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega)\mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega) = \overleftrightarrow{\mathbf{S}}_P(\mathbf{r}; \omega) + i\overleftrightarrow{\mathbf{A}}_I(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{A.12})$$

con  $\overleftrightarrow{\mathbf{S}}_P(\mathbf{r}; \omega)$  un tensor real, simétrico y par, y  $\overleftrightarrow{\mathbf{A}}_I(\mathbf{r}; \omega)$  un tensor real, antisimétrico e impar. Por lo tanto, en (2.13) se tiene que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega)\mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega) d\omega = 2 \int_0^{\infty} \text{Re}\{\mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega)\mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega)\} d\omega, \quad (\text{A.13})$$

en donde  $\text{Re}\{z\}$  denota la parte real de  $z$ . La parte imaginaria no contribuye a la integral por ser una función impar.

El segundo término en (2.13) es

$$-\frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega) d\omega, \quad (\text{A.14})$$

cuyo integrando es el cuadrado de la magnitud del campo eléctrico, la cual es una función real, dada en coordenadas cartesianas por

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega) = (E'_x E'_x + E''_x E''_x) + (E'_y E'_y + E''_y E''_y) + (E'_z E'_z + E''_z E''_z). \quad (\text{A.15})$$

Como la parte real de cada componente es una función par, mientras que la imaginaria es una función impar, entonces de (A.14) se sigue que  $\mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega)$  es par, por lo que

$$-\frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega) d\omega = -\overleftrightarrow{\mathbf{I}} \int_0^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}; \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}; \omega) d\omega. \quad (\text{A.16})$$

Repetiendo los mismos pasos para la parte magnética de (2.13) e intercambiando el orden de integración, se obtiene finalmente (2.14)

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{P}_{\text{mec}} = & \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} \oint_S \text{Re} \left\{ \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] + \right. \\ & \left. + \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} [\mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{B}^*(\mathbf{r}, \omega)] \right\} \cdot d\mathbf{a} d\omega. \end{aligned}$$

## Apéndice B

# Solución de Mie extendida

En este apéndice se presentan los detalles de la solución de Mie extendida mediante lo que se conoce como *Método de Funciones Escalares* [46]. Se considera, por simplicidad, que el electrón se mueve paralelo al eje  $z$ , de modo que en el resultado final  $z \rightarrow x$ . La nanopartícula (NP) esférica, de radio  $a$ , se considera no magnética y caracterizada por  $\epsilon_m(\omega)$ , de manera que  $k_m = (\omega/c)\sqrt{\epsilon_m}$  es una cantidad compleja.

La expansión multipolar del campo electromagnético, en el espacio de frecuencias  $\omega$ , se puede realizar aplicando la siguiente identidad al campo eléctrico [46], [47, pág. 218]

$$\mathbf{E} = \nabla \frac{1}{\nabla^2} (\nabla \cdot \mathbf{E}) + \mathbf{L} \frac{1}{L^2} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{E}) - (\nabla \times \mathbf{L}) \frac{1}{L^2 \nabla^2} [(\mathbf{L} \times \nabla) \cdot \mathbf{E}], \quad (\text{B.1})$$

donde  $\mathbf{L} = -i \mathbf{r} \times \nabla$  es el operador de momento angular orbital,  $i = \sqrt{-1}$  y  $L^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}$ . La expresión B.1 puede reescribirse como

$$\mathbf{E} = \nabla \psi^L + \mathbf{L} \psi^M - \frac{i}{k} \nabla \times \mathbf{L} \psi^E, \quad (\text{B.2})$$

mediante las *funciones escalares*

$$\psi^L = \frac{1}{\nabla^2} \nabla \cdot \mathbf{E}, \quad (\text{B.3})$$

$$\psi^E = \frac{-ik}{L^2 \nabla^2} (\mathbf{L} \times \nabla) \cdot \mathbf{E}, \quad (\text{B.4})$$

$$\psi^M = \frac{1}{L^2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{E}, \quad (B.5)$$

en donde  $k = \omega/c$ . En ausencia de cargas y corrientes externas, estas funciones escalares satisfacen la ecuación escalar de Helmholtz

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = 0. \quad (B.6)$$

El campo  $\mathbf{H}$ , que se obtiene aplicando la ley de Faraday a la ec. (B.2), está dado por

$$\mathbf{H} = -\frac{i}{k} \nabla \times \mathbf{L} \psi^M - \mathbf{L} \psi^E. \quad (B.7)$$

En las siguientes secciones se obtienen las funciones escalares para el campo EM externo, producido por el electrón, y el campo EM esparcido por la NP.

## Campos electromagnéticos producidos por el electrón

En el problema de interés en este trabajo se considera un electrón que viaja siempre en vacío con velocidad constante, por lo tanto los modos longitudinales no contribuyen, es decir,  $\psi^L = 0$ . Dado que las funciones escalares (B.3)-(B.5) satisfacen la ecuación de Helmholtz, se cumple que  $\nabla^2 = -k^2$  de manera que

$$\psi^E = \frac{i}{kL^2} (\mathbf{L} \times \nabla) \cdot \mathbf{E}. \quad (B.8)$$

Es posible expresar los campos electromagnéticos en términos de una expansión multipolar. En particular, como el electrón viaja con una velocidad constante (y por lo tanto no radia campo EM), la expansión multipolar de los campos EM que genera consta de ondas esféricas cuyo flujo sea cero. Por lo tanto, las funciones escalares que describen el campo externo pueden escribirse como [46]

$$\psi^{L,ext}(\mathbf{r}) = 0, \quad (B.9)$$

$$\psi^{E,ext}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (i)^l j_l(kr) Y_{l,m}(\Omega_r) \psi_{l,m}^{E,ext}, \quad (B.10)$$

$$\psi^{M,ext}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (i)^l j_l(kr) Y_{l,m}(\Omega_r) \psi_{l,m}^{M,ext}, \quad (B.11)$$

en donde  $j_l(x)$  son las funciones de Bessel esféricas,  $(r, \Omega_r)$  son las coordenadas esféricas

de  $\mathbf{r}$  y  $Y_{l,m}(\Omega_r)$  son los armónicos esféricos escalares [42]. Las expresiones (B.9)-(B.11) son válidas en la región  $a < r < b$  (entre la NP y la trayectoria del electrón) y en particular en el cascarón esférico  $S$  fuera de la esfera de radio  $a$  (ver Fig. 2.2). Los coeficientes  $\psi_{l,m}^{E,ext}$  y  $\psi_{l,m}^{M,ext}$  se obtienen a partir del campo eléctrico externo, escrito en términos de la función de Green de la ecuación de Helmholtz (el signo menos de la carga del electrón ya está considerado<sup>13</sup>), es decir, de [1]

$$\mathbf{E}^{ext}(\mathbf{r}) = \left( \nabla - \frac{ik\mathbf{v}}{c} \right) \int e^{i\omega t} G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) dt, \quad (\text{B.12})$$

donde la función de Green está dada por

$$G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) = \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_t|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_t|}, \quad (\text{B.13})$$

y  $\mathbf{r}_t = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}t$  describe la trayectoria del electrón. Se considera  $t = 0$  cuando el electrón pasa por el punto de su trayectoria más cercano al origen, es decir,  $\mathbf{r}_0 = b\hat{\mathbf{x}}$ . Si se expande la función de Green en términos de multipolos y se resuelven las integrales que aparecen en (B.12), se obtiene<sup>14</sup>

$$\psi_{l,m}^{E,ext} = \frac{-2\pi(i)^{1-l} k}{c\gamma} \frac{B_{l,m}}{l(l+1)} K_m\left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right), \quad (\text{B.14})$$

$$\psi_{l,m}^{M,ext} = \frac{-4\pi(i)^{1-l} k v}{c^2} \frac{m A_{l,m}^+}{l(l+1)} K_m\left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right), \quad (\text{B.15})$$

en donde  $K_m(x)$  son las funciones de Bessel modificadas [42],  $v$  es la rapidez (constante) del electrón,

$$B_{l,m} = A_{l,m+1}^+ \sqrt{(l+m+1)(l-m)} - A_{l,m-1}^+ \sqrt{(l-m+1)(l+m)}, \quad (\text{B.16})$$

$$A_{l,m}^+ = \frac{1}{\beta^{l+1}} \sum_{j=m}^l \frac{(i)^{l-j} (2l+1)!! \alpha_{l,m}}{\gamma^j 2^j (l-j)! [(j-m)/2]! [(j+m)/2]!} I_{j,l-j}^{l,m}, \quad (\text{B.17})$$

con

$$\beta = v/c, \quad (\text{B.18})$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (\text{B.19})$$

<sup>13</sup>En este apéndice se usan unidades atómicas gaussianas, en las cuales  $\hbar$ , la carga  $q_e$  y la masa  $m_e$  del electrón son iguales a 1, adimensionales.

<sup>14</sup>Los detalles se encuentran en las secciones A y B, así como en los apéndices A y B de [46].

$$\alpha_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \quad (B.20)$$

y los números  $I_{j,l-j}^{l,m}$  se calculan mediante la siguiente relación de recurrencia

$$(l-m) I_{i_1,i_2}^{l,m} = (2l-1) I_{i_1,i_2+1}^{l-1,m} - (l+m-1) I_{i_1,i_2}^{l-2,m}, \quad (B.21)$$

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

$$I_{i_1,i_2}^{m,m} = \begin{cases} (-1)^m (2m-1)!! B\left(\frac{i_1+m+2}{2}, \frac{i_2+1}{2}\right), & \text{si } i_2 \text{ es par} \\ 0, & \text{si } i_2 \text{ es impar,} \end{cases} \quad (B.22)$$

donde  $B(x, y)$  la función beta [42]. Sustituyendo en (B.2) y (B.7), se obtienen las expresiones (2.24) y (2.25) del campo electromagnético producido por el electrón, en las que los coeficientes  $A^M$  y  $B^E$  son

$$A^M = (i)^l \alpha_{l,m} \psi_{l,m}^{M,ext} \quad \text{y} \quad B^E = (i)^l \alpha_{l,m} \psi_{l,m}^{E,ext}. \quad (B.23)$$

## Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula

Las condiciones de frontera que las ecuaciones de Maxwell imponen sobre los campos EM sobre la superficie de la NP se traducen en condiciones de frontera para las funciones escalares, permitiendo así calcular el campo esparcido por la NP a partir de sus funciones escalares. Las condiciones de frontera para las funciones escalares (B.3), (B.4) y (B.5) son que [46] [47, págs. 230-240].

$\psi^M$ ,  $\epsilon\psi^M$ ,  $\partial\psi^M/\partial r$  y  $(1+r\partial/\partial r)\psi^E$  sean continuas en la frontera de la NP.

(B.24)

Debido a la simetría esférica de la nanopartícula, se tiene que, en  $r > a$  (i.e. la región vacía exterior a la NP), el campo electromagnético esparcido por la NP es una combinación de ondas esféricas entrantes y salientes (respecto al centro de la NP), representadas por las funciones de Hankel esféricas  $h_l^{(+)}$  y  $h_l^{(-)}$ , respectivamente [48]. Como las fuentes del campo esparcido son las cargas y corrientes inducidas en la nanopartícula por el campo externo, entonces fuera de la nanopartícula el campo esparcido es una

combinación de ondas salientes, es decir,

$$\psi^{M,esp}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (i)^l h_l^{(+)}(kr) Y_{l,m}(\Omega_r) \psi_{l,m}^{M,esp}, \quad (B.25)$$

$$\psi^{E,esp}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (i)^l h_l^{(+)}(kr) Y_{l,m}(\Omega_r) \psi_{l,m}^{E,esp}, \quad (B.26)$$

y nuevamente por estar en vacío

$$\psi^{L,esp}(\mathbf{r}) = 0. \quad (B.27)$$

Las funciones escalares (B.25)-(B.27) satisfacen las condiciones de frontera (B.24) y se relacionan con las funciones escalares del campo externo mediante la *matriz de esparcimiento*, es decir

$$\psi_{l,m}^{M,esp} = t_l^M \psi_{l,m}^{M,ext} \quad \text{y} \quad \psi_{l,m}^{E,esp} = t_l^E \psi_{l,m}^{E,ext}. \quad (B.28)$$

Los elementos  $t_l^M$  y  $t_l^E$  de la matriz de esparcimiento son independientes de  $m$  debido a la simetría esférica.

Al estar fuera de la NP, las funciones escalares (B.25)-(B.27) satisfacen la ecuación de Helmholtz en el vacío, ec. (B.6), mientras que dentro de la NP, las funciones escalares deben satisfacer la ecuación

$$(\nabla^2 + k^2 \epsilon_m) \psi = 0, \quad (B.29)$$

ya que dentro de la NP el número de onda es  $k = k_m = (\omega/c) \sqrt{\epsilon_m}$ . Resolviendo las ecuaciones (B.6) y (B.29) con las condiciones de frontera (B.24) se encuentra para cada  $l$  una solución que se comporta como

$$\psi \sim j_l(kr) + t_l h_l^{(+)}(kr), \quad r > a. \quad (B.30)$$

La ecuación (B.30) define los valores de la matriz de esparcimiento. En particular, como la NP considerada es una esfera homogénea, se obtienen las mismas expresiones que en

la solución de Mie, es decir, en las ecs. (B.28) se tiene

$$t_l^E = \frac{-j_l(x_0) [x_i j_l(x_i)]' + \epsilon_m j_l(x_i) [x_0 j_l(x_0)]'}{h_l^{(+)}(x_0) [x_i j_l(x_i)]' - \epsilon_m j_l(x_i) [x_0 h_l^{(+)}(x_0)]'}, \quad (\text{B.31})$$

$$t_l^M = \frac{-x_i j_l(x_0) j_l'(x_i) + x_0 j_l'(x_0) j_l(x_i)}{x_i h_l^{(+)}(x_0) j_l'(x_i) - x_0 h_l^{(+)}(x_0) j_l(x_i)}, \quad (\text{B.32})$$

donde  $x_0 = ka$ ,  $x_i = x_0 \sqrt{\epsilon_m}$ ,  $a$  es el radio de la nanopartícula, y el símbolo ' (prima) denota la derivada total de la función respecto a su argumento.

Al sustituir las funciones escalares (B.28) en (B.2) y (B.7) se obtienen las expresiones (2.26) y (2.27) del campo electromagnético producido por el electrón, en las que los coeficientes  $C^M$  y  $D^E$  están dados por

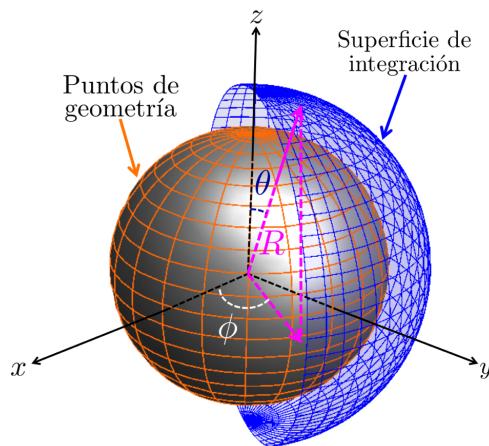
$$C^M = (i)^l \alpha_{l,m} t_l^M \psi_{l,m}^{M,ext} \quad \text{y} \quad D^E = (i)^l \alpha_{l,m} t_l^E \psi_{l,m}^{E,ext}. \quad (\text{B.33})$$

# Apéndice C

## Parámetros del cálculo del campo esparcido

En este apéndice se presentan los parámetros con los que se utilizó el código BEM [50]-[52] para el cálculo de los campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula (2.25) y (2.26).

BEM implementa la solución de Mie extendida, discutida en el capítulo 2 y el Apéndice B. Para asegurar la convergencia de los cálculos se eligieron parámetros basados en el análisis de convergencia realizado por Arturo Santos en [14, sección 3.3]. Los parámetros relevantes del cálculo que deben introducirse en BEM son (véase la Fig. C.1):



**Figura C.1:** Esquema de los mallados para muestrear la nanopartícula y la esfera de integración.

- **Función dieléctrica:** Es necesario introducir en BEM la información sobre los materiales involucrados en el problema, es decir los datos (en forma de tabla) ya sea de la función dieléctrica o el índice de refracción. En el presente problema se introdujeron las funciones dieléctricas para el MgO y el SiC discutidas en la sección 3.1.
- **Radio de la nanopartícula:** En todos los cálculos se ha considerado una NP con radio  $a = 1 \text{ nm}$  (ver Fig. 2.2).
- **Puntos de geometría ( $PG$ ):** Es necesario construir la nanopartícula embebida en vacío, para lo cual se le indica a BEM las interfaces que separan a los distintos medios involucrados en el cálculo. En este caso es necesario introducir la información de una esfera dieléctrica en vacío, para lo cual se genera un conjunto de  $PG$  sobre medio círculo ( $\theta \in [0, \pi]$  en la Fig. C.1) y se genera la esfera como un sólido de revolución en  $\phi$ . En este trabajo se tomaron

$$PG = 300. \quad (\text{C.1})$$

La NP considerada tiene un radio  $a = 1 \text{ nm}$ , entonces un arco que subtienda un ángulo de  $\pi$  mide  $\pi \text{ nm}$ , y cada uno de estos arcos se subdivide por  $PG$  obteniendo así, con nuestra elección de  $PG = 300$ , un muestreo de la NP con puntos separados  $\pi/300 \text{ nm} \approx 0.01 \text{ nm}$  entre sí, lo cual representa la resolución del cálculo en términos de la mínima longitud de onda que puede considerarse.

- **Puntos sobre la superficie de integración ( $PSI$ ):** Como es necesario calcular la integral de superficie cerrada sobre la esfera  $S$  de (2.14), numéricamente es necesario hacer una malla sobre la esfera para calcular ahí los campos electromagnéticos totales y con ellos dicha integral. El número total  $PSI$  de puntos sobre la malla se construye utilizando coordenadas esféricas  $(r, \theta, \phi)$  sobre la esfera  $S$  de integración y haciendo una partición de  $N_\theta$  partes iguales del ángulo  $\theta$  de 0 a  $\pi$ , y otra de  $N_\phi = 2N_\theta$  partes iguales del ángulo  $\phi$  de 0 a  $2\pi$ , de manera que  $PSI = 2N_\theta^2$ . Tomando  $N_\theta = 256$  como sugiere [14] se consideró

$$PSI = 131,072. \quad (\text{C.2})$$

Como la nanopartícula tiene un radio de 1 nm y el parámetro de impacto del electrón  $b'$  desde la superficie de la NP es siempre mayor o igual a 0.3 nm, la superficie  $S$  de integración se tomó como una esférica concéntrica a la nanopartícula con un radio

$$R = 1.05 \text{ nm}, \quad (\text{C.3})$$

para que no interseque a la trayectoria del electrón ni a la NP.

- **Número de multipolos ( $l_{max}$ ):** Es el número máximo de términos que se consideran en las sumas de las ecuaciones (2.25) y (2.26), es decir, se reemplaza  $\infty$  por  $l_{max}$ . En este trabajo, después de un análisis de convergencia se consideró

$$l_{max} = 15. \quad (\text{C.4})$$

Aunado a lo anterior, es necesario indicar la rapidez del electrón y el parámetro de impacto respecto a la superficie de la NP ( $v$  y  $b'$  en la Fig. 3.1, respectivamente).



## Bibliografía

- [1] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (J. Wiley & Sons Inc., New York, Segunda edición, 1962).
- [2] R. P. Prasankumar y A. J. Taylor, *Optical techniques for solid-state materials characterization* (Taylor & Francis Group, Boca Raton, 2012).
- [3] A. Ashkin, “History of optical trapping and manipulation of small-neutral particle, atoms, and molecules”, *IEEE J. Selected Topics Quant. Electr.*, **6**, 841-856 (2000).
- [4] P. E. Batson, “Damping of bulk plasmons in small aluminum spheres”, *Solid State Commun.*, **34**, 477-480 (1980).
- [5] P. E. Batson, “A new surface plasmon resonance in clusters of small aluminum spheres”, *Ultramicroscopy*, **9**, 277-282 (1982).
- [6] R. H. Ritchie, P. M. Echenique, F. Flores y J. R. Manson, “The image potential in scanning transmission electron microscopy and scanning tunneling microscopy”, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **117**, 163 (1991).
- [7] D. Ugarte, C. Colliex y P. Trebbia, “Surface- and interface-plasmon modes on small semiconducting spheres”, *Phys. Rev. B*, **45**, 4332 (1992).
- [8] N. Yamamoto, K. Araya, A. Toda y H. Sugiyama, “Light emission from surfaces, thin films and particles induced by high-energy electron beam”, *Surf. Interface Anal.*, **31**, 79-86 (2001).
- [9] F. J. García de Abajo, “Optical excitations in electron microscopy”, *Rev. Mod. Phys.*, **82**, 209-275 (2010).

- [10] P. J. Mohr, D. B. Newell y B. N. Taylor, “CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2014”, *Rev. Mod. Phys.*, **88**, 035009 (2016).
- [11] P. E. Batson, N. Dellby y O. L. Krivanek, “Sub-ångstrom resolution using aberration corrected electron optics”, *Nature*, **418**, 617 (2002).
- [12] F. J. García de Abajo, “Momentum transfer to small particles by passing electron beams”, *Phys. Rev. B*, **70**, 115422 (2004).
- [13] P. E. Batson, “Motion of gold atoms on carbon in the aberration-corrected STEM”, *Microsc. and Microanal.*, **14**, 89-97 (2008).
- [14] A. Santos Gómez, *Estudio de la transferencia de momento a nanopartículas plasmónicas por electrones rápidos en función de su velocidad* (Tesis de maestría), Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla (2014).
- [15] 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**, 3388-3393 (2011).
- [16] A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, P. E. Batson, P. M. Echenique, A. Rivacoba y J. Aizpurua, “Electromagnetic forces on plasmonic nanoparticles induced by fast electron beams”, *Phys. Rev. B*, **82**, 235429 (2010).
- [17] E. J. R Vesseur, J. Aizpurua, T. Coenen, A. Reyes-Coronado, P. E. Batson y A. Polman, “Plasmonic excitation and manipulation with an electron beam”, *MRS Bulletin*, **37**, 752-760 (2012).
- [18] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua, “Nanoparticle movement: Plasmonic forces and physical constraints”, *Ultramicroscopy*, **124**, 50-58 (2012).
- [19] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua, “Nanoparticle plasmonic forces: Pulling and pushing!”, *Microsc. and Microanal.*, **18** (Suppl. 2), 296-297 (2012).
- [20] M. J. Lagos, A. Reyes-Coronado, P. M. Echenique, J. Aizpurua y P. E. Batson, “Attosecond forces imposed by swift electrons on nanometer-sized metal particles”, *Microsc. and Microanal.*, **20** (Suppl. 3), 576-577 (2014).
- [21] M. J Lagos, A. Reyes-Coronado, A. Konečná, P. M. Echenique, J. Aizpurua y P. E. Batson, “Attosecond and femtosecond forces exerted on gold nanoparticles induced by swift electrons”, *Phys. Rev. B*, **93**, 205440 (2016).

- [22] J. M. Cowley, "Microdiffraction, stem imaging and ELS at crystal surfaces", *Ultramicroscopy*, **9**, 231-236 (1982).
- [23] J. M. Cowley, "Electron microscopy of surface structure", *Progr. Surface Sci.*, **21**, 209-250 (1986).
- [24] V. P. Oleshko y J. M. Howe, "Are electron tweezers possible?", *Ultramicroscopy*, **111**, 1599-1606 (2011).
- [25] R. H. Milne y P. M. Echenique, "The probability of MgO surface excitations with fast electrons", *Solid State Commun.*, **55**, 909-910 (1985).
- [26] A. Rivacoba y P. M. Echenique, "Deflection of STEM electrons by dielectric spheres", *Ultramicroscopy*, **26**, 389-392 (1988).
- [27] A. Rivacoba y N. Zabala, "Relativistic force between fast electrons and planar targets", *New J. Phys.*, **16**, 073048 (2014).
- [28] N. Zabala y A. Rivacoba, "Dynamics of fast electron beams and bounded targets", *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **354**, 105-108 (2015).
- [29] M. J. Lagos, A. Trügler, U. Hohenester y P. E. Batson, "Mapping vibrational surface and bulk modes in a single nanocube", *Nature*, **543**, 529-532 (2017).
- [30] W. Cai y V. Shalaev, *Optical metamaterials fundamentals and applications* (Springer, New York, 2010).
- [31] J. A. Schuller, R. Zia, T. Taubner y M. L. Brongersma, "Dielectric metamaterials based on electric and magnetic resonances of silicon carbide particles", *PRL*, **99**, 107401 (2007).
- [32] A. Kussow, A. Akyurtlu, A. Semichaevsky y N. Angkawisitpan, "MgB<sub>2</sub>-based negative refraction index metamaterial at visible frequencies: Theoretical analysis", *Phys. Rev. B*, **76**, 195123 (2007).
- [33] A. Ashkin, J. Dziedzic, J. Bjorkholm y S. Chu, "Observation of a single-beam gradient optical trap for dielectric particles", *Opt. Lett.*, **11**, 288-290 (1986).
- [34] R. J. Hernández, A. Mazzulla, A. Pane, K. Volke-Sepúlveda y G. Cipparrone, "Attractive-repulsive dynamics on light-responsive chiral microparticles induced by polarized tweezers", *lab on a Chip*, **13**, 459-467 (2013).
- [35] K. Dholakia y T. Čižmár, "Shaping the future of manipulation", *Nature Photon.*, **5**, 335-342 (2011).

- [36] M. Padgett y R. Bowman, “Tweezers with a twist”, *Nature Photon.*, **5**, 343-348 (2011).
- [37] S. Chu., “The manipulation of neutral particles”, *Rev. Mod. Phys.*, **70**, 685-706 (1998).
- [38] C. N. Cohen-Tannoudji, “Manipulating atoms with photons”, *Rev. Mod. Phys.*, **70**, 707-719 (1998).
- [39] W. D. Phillips, “Laser cooling and trapping of neutral atoms”, *Rev. Mod. Phys.*, **70**, 721-740 (1998).
- [40] D. Leibfried, R. Blatt, C. Monroe y D. Wineland, “Quantum dynamics of single trapped ions”, *Rev. Mod. Phys.*, **75**, 281-324 (2003).
- [41] O. M. Maragò, P. H. Jones, P. G. Gucciardi, G. Volpe y A. C. Ferrari, “Optical trapping and manipulation of nanostructures”, *Nat. Nanotech.*, **8**, 807-819 (2013).
- [42] M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, Inc., New York, Novena Edición, 1972).
- [43] M. J. Lighthill, *Introduction to Fourier analysis and generalised functions* (Cambridge University Press, 1958).
- [44] E. M. Purcell, *Electricity and magnetism* (Cambridge University Press, New York, Segunda edición, 2011).
- [45] C. F. Bohren y D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (J. Wiley & Sons Inc., New York, 1983).
- [46] 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 (1999).
- [47] F. E. Low, *Classical Field Theory: Electromagnetism and Gravitation* (J. Wiley & Sons Inc., New York, 1997).
- [48] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (Dover publications Inc., New York, Segunda edición, 1995).
- [49] G. W. F. Drake, *Springer handbook of atomic, molecular and optical physics* (Springer, 2006).
- [50] F. J. García de Abajo y J. Aizpurua, “Numerical simulation of electron energy loss near inhomogeneous dielectrics”, *Phys. Rev. B*, **56**, 15873-15884 (1997).

- 
- [51] F. J. García de Abajo y J. Aizpurua, “Relativistic electron energy loss and electron-induced photon emission in inhomogeneous dielectrics”, *Phys. Rev. B*, **80**, 5180-5183 (1998).
  - [52] F. J. García de Abajo y A. Howie, “Retarded field calculation of electron energy loss in inhomogeneous dielectrics”, *Phys. Rev. B*, **65**, 115418 (2002).
  - [53] W. T. Ang, *A beginner's course in boundary element methods* (Universal Publishers, Boca Raton, 2007).
  - [54] A. Reyes-Coronado, C. G. Ortíz-Solano, N. Zabala, A. Rivacoba y R. Esquivel-Sirvent, “Causality test of analytical models for the dielectric function of gold”, *por enviarse a publicar*.
  - [55] G. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Elsevier Inc., San Diego, Sexta edición, 2005).
  - [56] A. Zangwill, *Modern Electrodynamics* (Cambridge University Press, New York, 2012).
  - [57] E. D. Palik, *Handbook of optical constants of solids* (Academic Press, Orlando, 1985).
  - [58] R. H. Good y T. J. Nelson, *Classical Theory of Electric and Magnetic Fields* (Academic Press Inc., New York, 1971).
  - [59] E. Hecht, *Optics* (Addison Wesley, San Francisco, Cuarta edición, 2002).
  - [60] A. H. Rashed, *Characteristics of Silicon Carbide* (Poco Graphite Inc., Decatur, 2002).