



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**TRANSFERENCIA DE MOMENTO ANGULAR DE ELECTRONES RÁPIDOS A
NANOPARTÍCULAS**

TESIS

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

PRESENTA:

JORGE LUIS BRISEÑO GÓMEZ

TUTOR:

DR. ALEJANDRO REYES CORONADO
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

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

CIUDAD DE MÉXICO, JULIO DE 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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

«But still try, for who knows what is possible?»
Michael Faraday.

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

Índice general

Agradecimientos	5
Resumen	7
Abstract	9
Introducción	11
1. Teoría y métodos	17
1.1. Conservación del momento angular en electrodinámica	17
1.2. Transferencia de momento angular de un electrón rápido a una nanopartícula	24
1.3. Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula	26
2. Resultados y discusión	29
2.1. Densidades espectrales de la transferencia de momento angular	29
2.2. Cálculo semi-analítico de las integrales necesarias para la transferencia de momento angular	31
2.3. Transferencia de momento angular	31
2.4. Pruebas de consistencia: Transferencia de momento angular debida al campo externo . . .	34
3. Conclusiones y trabajo a futuro	37
3.1. Conclusiones	37
3.2. Trabajo a futuro	38
Apéndice A	
Método de los potenciales escalares	39
Referencias	45

Agradecimientos

Agradezco al proyecto UNAM-DGAPA PAPIIT IN107122, por el apoyo en la adquisición de material de trabajo durante la maestría, así como al CONACyT por otorgarme la beca 1145427. Agradezco a la Facultad de Ciencias de la UNAM por brindarme los espacios de trabajo necesarios para escribir, pensar y estudiar. También agradezco a PAEP por darme la oportunidad de presentar mi trabajo durante el M&M 2023 - Microscopy & Microanalysis (en Mineápolis, Minnesota, EEUU), brindándome recursos económicos.

Agradezco a mi comité tutor, conformado por el Dr. Alejandro Reyes Coronado, que es mi tutor principal, por el Dr. Rubén Gerardo Barrera y Pérez y por el Dr. Raúl Patricio Esquivel Sirvent, por su apoyo, paciencia, consejos y asesoría durante mis estudios de maestría. Gracias a su guía, pude completar mis estudios de maestría así como la escritura de esta tesis.

Agradezco a mis profesores de la maestría: los Dres. y las Dras. Luis Mochán, Luis Urrutia, Alberto Martín, Gerardo García Naumis, Andrés Botello, Alejandro Vázquez Arzola, Karina Garay Palmett, Karen Volke, Hugo Lara y Melissa Méndez. Sin su labor docente y su entusiasmo, este proceso no hubiera podido completarse.

Muchas gracias también a mis sinodales: el Dr. Alejandro Reyes Coronado, el Dr. Julio Martinell, la Dra. Ana González, el Dr. Alejandro Vázquez Arzola y la Dra. Karen Volke. Sus reuniones conmigo para discutir el trabajo de investigación me brindaron valiosos comentarios de retroalimentación para mejorar.

Agradezco a el Dr. Jesús Castrejón Figueroa y al Dr. José Ángel Castellanos Reyes. Ambos motivaron exhaustivamente este trabajo, tanto con sus aportaciones pasadas al problema de investigación, así como su disposición por enseñarme las herramientas necesarias para entender sus proyectos de investigación. Además de ser mis colegas, gracias por ser mis amigos.

Agradezco al grupo de Nanoplasmónica. En particular agradezco enormemente a Isabel Rojas, quien fue mi compañera durante toda la maestría, y quien me brindó apoyo en los momentos más difíciles, discutiendo sobre tareas, proyectos, la tesis y sobre la vida. Especial agradecimiento también a Eduardo Viveros, quien comparte tema de investigación conmigo, y quien me brinda su apoyo y sus valiosas observaciones sobre mi trabajo en cada momento que podía. Gracias al M. en C. Jonathan Urrutia, quien

compartió conmigo toda la información de sus cursos de posgrado, mismos que fueron de gran ayuda y complementaron mi proceso de aprendizaje. Gracias también a Jorge Betancourt y a Daniel Espinosa, quienes también fueron mis compañeros de maestría en su etapa final, jamás nos dejamos caer.

Y por último, pero no menos importante, quiero agradecer a mi familia. Muchísimas gracias a Any en todo su apoyo, eres tan importante para mí que no sería capaz de expresarlo en estos pocos renglones, te amo. Muchas gracias a mi mamá, a mi abuelita y a mi tía Toña por actuar siempre como tres madres para mí. Gracias a Roberto y Bere, han hecho de estos últimos años algo mágico y muy especial; gracias por permitirnos pasar tiempo de calidad con Bruno y Renata, y gracias a estos dos últimos por darme su cariño. Muchas gracias a Rosy y a JC, en su apoyo constante y sus palabras de aliento, su amistad es muy importante para mí. Gracias a Lya y a Enrique por acogerme en su familia, y a Nanita y a Leito por jugar conmigo en la mejor semana de mi vida. Gracias Robin, por hablar conmigo y preguntarme mis avances, aunque no lo creas, eso hizo toda la diferencia. Gracias también a los demás familiares que me apoyan y siempre están para mí: ustedes saben quiénes son.

Resumen

Durante la segunda mitad del siglo pasado, la manipulación de objetos a escala micro y nano se convirtió en un campo de investigación crucial para el desarrollo de nuevas tecnologías. Se han logrado importantes avances en el desarrollo de técnicas no destructivas para atrapar, mover y ensamblar micro y nanoestructuras utilizando microscopios electrónicos de transmisión y barrido (STEM, por sus siglas en inglés). Los STEM pueden inducir movimiento en nanopartículas (NPs) y ejercer fuerzas y torsiones sobre ellas, lo que ha llevado al desarrollo de la técnica llamada «pinzas electrónicas», en analogía con las pinzas ópticas.

Desde el punto de vista teórico, el análisis se ha centrado en la transferencia de momento lineal del haz de electrones a NPs. Sin embargo, algunos estudios presentan limitaciones en cuanto a la convergencia numérica y la causalidad en las funciones dieléctricas utilizadas para describir la respuesta electromagnética de las NPs. Estudios recientes han demostrado que estas limitaciones pueden generar resultados no físicos al calcular la transferencia de momento lineal. Como una posible solución al problema numérico, se han obtenido expresiones cerradas para el espectro de momento lineal transferido mediante el cálculo analítico de las integrales de superficie del tensor de esfuerzos de Maxwell en el espacio de frecuencias. Los resultados muestran que la transferencia de momento lineal siempre es atractiva hacia la trayectoria del haz de electrones, independientemente del tamaño de la NP y del parámetro de impacto del haz.

Igualmente relevante que la transferencia de momento lineal, el entendimiento de la dinámica angular que los haces de electrones producen en las NPs también es fundamental para el desarrollo de las pinzas electrónicas. Recientemente, se realizó un estudio teórico sobre la transferencia de momento angular (TMA) de un haz de electrones a una NP utilizando un enfoque de electrodinámica clásica. En este estudio se obtuvieron expresiones para la TMA de electrones rápidos a una NP esférica con respuesta electromagnética homogénea e isotropa de diferentes tamaños. Se investigó la dinámica angular en la interacción con NPs de aluminio, oro y bismuto, y se desarrolló una metodología numérica, basada en el método de cubaturas, que consiste en implementar cuadraturas que calculen integrales multidimensionales. Sin embargo, debido a la demanda computacional del método, solo fue posible calcular la TMA a NPs pequeñas, de hasta 5 nm de radio.

Este trabajo se enfoca en el estudio de la TMA de electrones rápidos, como los empleados en un

STEM, a NPs de cualquier tamaño dentro de la nanoescala, con un enfoque de electrodinámica clásica. Se consideran electrones relativistas que viajen en movimiento rectilíneo uniforme a lo largo de una trayectoria externa a la NP. Debido a la simetría del problema, los campos electromagnéticos se expanden en una base esférica, y como la respuesta electromagnética de la NP se modela a través de su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$, se escriben los campos electromagnéticos en el espacio de frecuencias, mediante una transformada de Fourier. A partir del teorema de conservación del momento angular en electrodinámica clásica, se obtiene la TMA en términos de lo que se denomina como «densidad espectral» de la TMA. Al integrar la densidad espectral en el espacio de frecuencias se obtiene la TMA del electrón rápido a la NP. En este trabajo, se han obtenido expresiones semi-analíticas para la densidad espectral de TMA de un electrón rápido a una NP esférica, desarrollando una nueva metodología con la que es posible estudiar de manera eficiente y sistemática la TMA en la interacción entre un haz de electrones y una NP de hasta 50 nm de radio.

Adicionalmente, se desarrolló un código en lenguaje C que calcula la contribución del campo electromagnético del electrón a la TMA. Se implementó la cuadratura de Gauss-Kronrod para calcular la integral en frecuencias de las expresiones semi-analíticas de la densidad espectral de TMA, debida únicamente a los campos electromagnéticos del electrón. Estudios anteriores han reportado que el campo electromagnético del electrón no contribuye a la transferencia de momento a la NP, por lo que la contribución del campo externo debe anularse. Los resultados obtenidos en este trabajo reproducen una contribución nula del campo electromagnético externo a la TMA, lo que brinda una primera prueba de consistencia con la que se gana confianza en la validez de las expresiones semi-analíticas obtenidas.

En conclusión, este trabajo proporciona una herramienta poderosa para el estudio teórico de la transferencia de momento angular de un haz de electrones, como los empleados en un STEM, a una NP esférica, con importantes aplicaciones potenciales en nanotecnología y medicina con el desarrollo de las pinzas electrónicas.

Abstract

During the second half of the last century, the manipulation of objects at the micro and nano scale became a crucial research field for the development of new technologies. Significant progress has been made in the development of non-destructive techniques to trap, move, and assemble micro and nanostructures using scanning transmission electron microscopes (STEM). STEMs may induce motion in nanoparticles (NPs) and exert forces and torques on them, which has led to the development of the technique called “electron tweezers”, in analogy to optical tweezers.

From a theoretical point of view, the analysis has mainly focused on the linear momentum transfer from the electron beam to NPs. However, some studies present limitations regarding numerical convergence and causality in the dielectric functions used to describe the electromagnetic response of NPs. Recent studies have shown that these limitations can generate non-physical results when calculating the linear momentum transfer. As a possible solution to the numerical problem, closed expressions for the spectrum of transferred linear momentum have been obtained by analytically calculating the surface integrals of the Maxwell stress tensor in frequency space. The results show that the linear momentum transfer is always attractive towards the trajectory of the electron beam, regardless of the size of the NP and the impact parameter of the beam.

Equally relevant to the linear momentum transfer, the understanding of the angular dynamics that electron beams produce in NPs is also fundamental for the development of electron tweezers. Recently, a theoretical study was conducted on the angular momentum transfer (AMT) of an electron beam to an NP using a classical electrodynamics approach. In this study, expressions for the AMT from swift electrons to a spherical NP with homogeneous and isotropic electromagnetic response of different sizes were obtained. The angular dynamics in the interaction with aluminum, gold, and bismuth NPs were investigated, and a numerical methodology based on the cubature method was developed, which consists of implementing quadratures that calculate multidimensional integrals. However, due to the computational demand of the method, it was only possible to calculate the AMT for small NPs, up to 5 nm in radius.

This work focuses on the study of the AMT from swift electrons, such as those used in a STEM, to spherical NPs of any size within the nanoscale, using a classical electrodynamics approach. Relativistic electrons traveling in a straight uniform motion along an external trajectory to the NP are considered. Due

to the symmetry of the problem, the electromagnetic fields are expanded in a spherical basis, and since the electromagnetic response of the NP is modeled through its dielectric function $\epsilon(\omega)$, the electromagnetic fields are written in the frequency domain through a Fourier transform. Using the theorem of conservation of angular momentum in classical electrodynamics, the AMT is obtained in terms of what is called the “spectral density” of the AMT. By integrating the spectral density in the frequency domain, the AMT from the swift electron to the NP is obtained. In this work, semi-analytical expressions for the spectral density of AMT from a swift electron to a spherical NP have been obtained, developing a new methodology that makes it possible to study efficiently and systematically the AMT in the interaction between an electron beam and a NP of up to 50 nm radius.

Additionally, a code in C language was developed that calculates the contribution of the bare electromagnetic field of the electron to the AMT. Gauss-Kronrod quadrature was implemented to calculate the frequency integral of the semi-analytical expressions of the spectral density of AMT, only due to the electromagnetic fields of the electron. Previous studies have reported that the electromagnetic field of the electron does not contribute to the momentum transfer to the NP, so the contribution of the external field should vanish. The results obtained in this work reproduce a null contribution of the external electromagnetic field to the AMT, providing a first consistency test with which confidence in the validity of the obtained semi-analytical expressions is gained. In conclusion, this work provides a powerful tool for the theoretical study of the angular momentum transfer from an electron beam, such as those used in a STEM, to a spherical NP, with significant potential applications in nanotechnology and medicine with the development of electron tweezers.

Introducción

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

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

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

El microscopio electrónico de transmisión de barrido (STEM por sus siglas en inglés) forma imágenes mediante haces enfocados de electrones, que barren el área de interés interactuando con la muestra [11]. En la Fig. 1 se muestra un par de partículas de oro, una grande y una pequeña. La NP pequeña es escaneada por el haz de un STEM dentro de la región que se muestra con contorno blanco. El haz de electrones del STEM escanea línea por línea. Durante el barrido, el haz de electrones permanece detenido el 20 % del tiempo al inicio de cada una de las líneas, esperando una señal de sincronización, lo que produce una corriente neta de electrones que viajan fuera de la NP. Esta corriente se ilustra como una región sombreada en azul en la Fig. 1. Por lo tanto, aunque el haz de electrones barre toda el área de interés, se puede considerar un parámetro de impacto efectivo respecto al centro de la NP.

En la Fig. 2, se presentan resultados reportados en la Ref. [11] que muestran seis imágenes de STEM

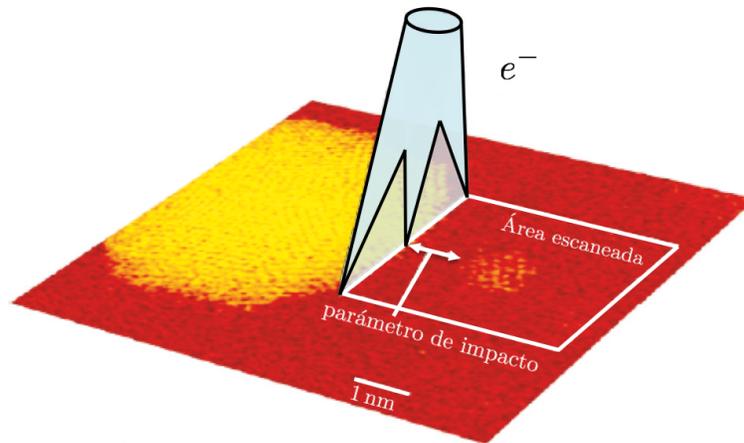


Figura 1: Esquema de la interacción dentro de un STEM entre un haz de electrones con un par de nanopartículas de oro, reproducido y adaptado de la Ref. [11].

de una NP de oro de 1.5 nm de diámetro en presencia de otra de 5 nm de diámetro, a diferentes tiempos. En todas las imágenes de la Fig. 2, el parámetro de impacto efectivo se encuentra a la izquierda de las NPs (cerca del borde izquierdo de la imagen). Las tres imágenes superiores de la Fig. 2, tomadas con un parámetro de impacto efectivo de 4.5 nm, muestran una interacción atractiva entre el haz y la NP pequeña (la NP grande se usa como referencia para el desplazamiento), ya que se puede observar que la NP se acerca al borde izquierdo de las imágenes, atravesando la línea punteada blanca colocada como ayuda visual. Por el contrario, en las imágenes inferiores de la Fig. 2, el parámetro de impacto efectivo es de 1 nm y se observa que la NP pequeña se aleja del haz, atravesando la línea punteada blanca en dirección opuesta, y por tanto acercándose al borde derecho de la imagen, lo que indica una interacción repulsiva. Por otro lado, utilizando las líneas guía que se han trazado en las facetas de la NP grande, que forman un polígono, se puede apreciar que en las tres imágenes superiores la NP grande gira en sentido horario, mientras que en las inferiores, al cambiar el parámetro de impacto, gira en sentido antihorario.

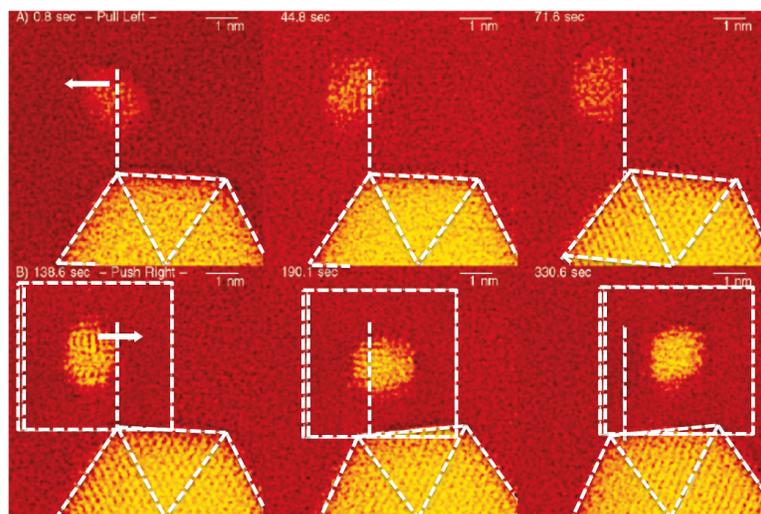


Figura 2: Resultados reproducidos y adaptados de la Ref. [11] donde se observa transferencia de momento angular y lineal de un haz de electrones en un STEM a nanopartículas de oro, soportadas en un sustrato de carbono amorfo.

Para el desarrollo de la técnica de pinzas electrónicas, es conveniente un entendimiento teórico del problema. Los haces electrónicos en un STEM pueden alcanzar 400 keV de energía cinética, con una corriente eléctrica del orden de pA, lo que equivale a un pulso de electrones rápidos viajando a una velocidad constante de hasta $0.83c$ (donde c es la rapidez de la luz). De lo anterior, se deduce que el tiempo de emisión de cada electrón es de $\sim 10^{-8}$ s. Dado que la vida media de las excitaciones dentro de un metal es típicamente $\sim 10^{-14}$ [16], se puede asumir que la NP interactúa con un electrón a la vez [17–19]. Se ha observado que los haces de electrones en estudios de STEM se desvían de una trayectoria recta por ángulos del orden de miliradianes [19–21], por lo que se puede considerar que se mueven en línea recta, siempre y cuando los electrones viajen fuera de la NP. Por lo anterior, se puede modelar la trayectoria del electrón rápido como $\vec{r}(t) = (b, 0, vt)$, donde v es la rapidez del electrón y b es la distancia entre el centro de la NP y la trayectoria del electrón (parámetro de impacto), como se muestra en la Fig. 3. La respuesta electromagnética de la NP, se modela mediante su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$.

Desde la perspectiva de la mecánica cuántica, se considera que un electrón puede ser modelado como una partícula puntual con carga eléctrica. Sin embargo, debido a las fluctuaciones del vacío, se ha estimado que podría tener un tamaño finito del orden de su longitud de onda de Compton, la cual es aproximadamente $\lambda_C = 2.424 \times 10^{-3}$ nm. En el caso de un electrón rápido, como los que viajan dentro de un STEM, su longitud de onda de De Broglie es del orden de $\lambda_B \sim 10^{-2}$ nm [22]. Por lo tanto, en este trabajo se consideran distancias de la NP al electrón mayores que λ_C y λ_B . En un trabajo previo [19], se abordó la interacción entre haces de electrones y NPs esféricas desde el punto de vista de la mecánica cuántica. Sin embargo, se concluyó que para distancias de la NP al electrón mayores que λ_C y λ_B , una descripción clásica del problema es suficiente.

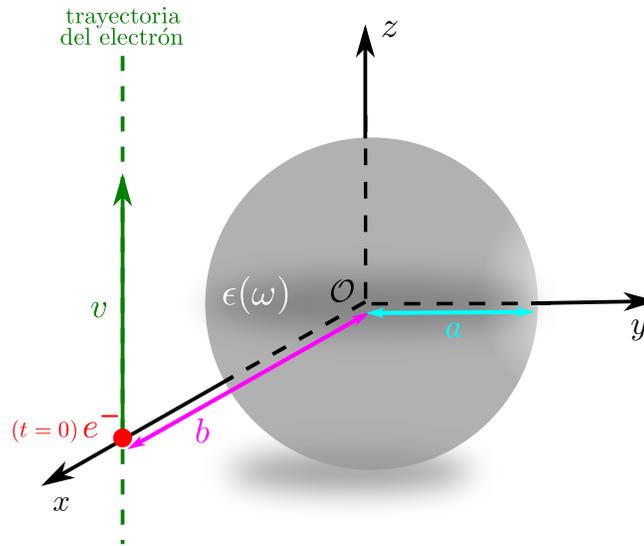


Figura 3: Nanopartícula de radio a , centrada en el origen de coordenadas, modelada mediante una función dieléctrica $\epsilon(\omega)$, en vacío. La trayectoria del electrón (punto marrón), con parámetro de impacto b y viajando a rapidez constante v , se muestra como una línea punteada de color verde.

La interacción entre haces de electrones y NPs esféricas también ha sido estudiada desde la perspectiva de la electrodinámica clásica en trabajos anteriores [8, 15, 23–25]. Los trabajos citados anteriormente se han centrado en el cálculo de transferencia de momento lineal mediante la solución de las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. Para ello, se ha utilizado una expansión multipolar que permite separar la contribución eléctrica de la magnética en la interacción, así como la contribución de cada orden

multipolar. Sin embargo, es necesario tener precaución al elegir la función dieléctrica para modelar la respuesta electromagnética de las NPs. Dado que experimentalmente se mide la función dieléctrica en un rango finito de frecuencias, es necesario extrapolarla e interpolarla para realizar la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell en todo el espacio de frecuencias. Si no se tiene el cuidado suficiente, este proceso puede dar como resultado una función dieléctrica no causal, es decir, que no satisface las relaciones de Kramers-Kronig. Aunque en las Refs. [8, 15, 23–25] se ha logrado reproducir el comportamiento repulsivo de la interacción, estudios recientes han mostrado que dichos trabajos obtuvieron resultados no físicos al modelar la respuesta electromagnética de la NP mediante funciones dieléctricas no causales [26, 27]. En estos trabajos recientes, se muestra que si se elimina el comportamiento no causal de las funciones dieléctricas, no aparece la interacción repulsiva reportada experimentalmente. Es interesante notar que en la Ref. [27] se resuelven de forma semi-analítica las integrales en el espacio de frecuencia, que previamente se resolvían de forma numérica en las Refs. [8, 15, 23–25]. Lo anterior permite conocer de manera exacta la contribución en el espacio de frecuencias de cada multipolo, eléctrico o magnético, a la transferencia de momento lineal, logrando así calcular la transferencia de momento lineal de electrones rápidos a NPs grandes (de hasta $a = 50$ nm de radio).

La técnica de pinzas electrónicas se verá beneficiada al realizar un estudio teórico detallado de la transferencia de momento angular (TMA). En trabajos previos se ha discutido la dinámica angular de forma somera (ver por ejemplo la Ref. [18]), pero estudios recientes han permitido calcularla en NPs pequeñas, de hasta $a = 5$ nm de radio, utilizando dos métodos distintos. El primer método modela la respuesta electromagnética de la NP como un dipolo puntual \vec{p} , mediante el tensor de polarizabilidad, lo que es válido únicamente para NPs pequeñas [28]. El segundo método resuelve numéricamente las integrales de superficie del tensor de esfuerzos de Maxwell [22, 29] en el espacio de frecuencias. Sin embargo, el cálculo numérico limita el tamaño de las NPs que se pueden estudiar (menores a 5 nm, para funciones dieléctricas realistas como oro o bismuto), debido al tiempo de cómputo necesario, como se ha reportado en las Refs. [22, 29]. Por lo tanto, los métodos desarrollados anteriormente solo permiten el cálculo de la TMA en nanopartículas pequeñas, de hasta $a = 5$ nm de radio.

Se ha demostrado que existen términos en el tensor de esfuerzos de Maxwell, correspondientes a los campos externos producidos por el electrón, que no contribuyen a la TMA total [29]. Por lo tanto, se ha demostrado que la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell que contiene solo a los campos electromagnéticos del electrón debe anularse. El término de interacción en el tensor de esfuerzos, que incluye tanto a los campos electromagnéticos del electrón como a los campos esparcidos por la nanopartícula, es el que más contribuye a la transferencia de momento, y el término que incluye únicamente los campos esparcidos por la nanopartícula, aunque es pequeño, no se anula [22, 27].

En este trabajo se presenta una nueva metodología para el estudio teórico de la TMA de electrones rápidos a NPs, utilizando un enfoque de electrodinámica clásica. Se obtiene una solución analítica a las integrales del tensor de esfuerzos de Maxwell en el espacio de frecuencias (que anteriormente se calculaba de forma numérica empleando el método de cubaturas¹), lo que permitirá estudiar de manera eficiente y sistemática la TMA de electrones rápidos a NPs con radios de hasta 50 nm, estudiando así la TMA a NPs en toda la escala nano. En el [Capítulo 1](#) se desarrollan la teoría y métodos necesarios para discutir la deducción de los campos electromagnéticos producidos por un electrón relativista en movimiento rectilíneo uniforme, así como los campos electromagnéticos esparcidos por una NP centrada en el origen, cuya

¹El método de cubaturas es diferente al método de cuadraturas. Las cubaturas se emplean para resolver numéricamente integrales multidimensionales [30].

respuesta electromagnética se modela mediante su función dieléctrica $\epsilon(\omega)$. Posteriormente, se calcula en general la TMA del electrón rápido a la NP mediante una integral del tensor de esfuerzos de Maxwell en el espacio de frecuencias, partiendo de la conservación de momento angular en electrodinámica. En el [Capítulo 2](#) se presentan los resultados de la tesis, en la que se calcula una solución semi-analítica de la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell en el espacio de frecuencias que permite calcular de forma eficiente la TMA. Finalmente, en la sección de [Conclusiones](#), se presentan los resultados más relevantes y sus implicaciones, así como el trabajo a futuro que se deriva de los resultados obtenidos.

En este capítulo se emplea el enfoque de la electrodinámica clásica para describir la interacción de un electrón rápido que viaja con velocidad constante en las cercanías de una nanopartícula (NP) esférica. En particular, se analiza la transferencia de momento angular (TMA) del electrón a la NP. En un trabajo previo de García de Abajo [19] se justifica que, bajo las condiciones descritas en la [Introducción](#), no es necesaria una descripción cuántica del fenómeno.

Durante el desarrollo matemático, se presentarán las ecuaciones en el Sistema Internacional (SI) en color **negro**, y en [\(magenta y entre paréntesis\)](#)¹ el factor necesario para expresar la ecuación en el sistema cgs. Por ejemplo, la fuerza entre dos cargas puntuales q_1 y q_2 separadas una distancia r se escribirá como

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

1.1. Conservación del momento angular en electrodinámica

Las ecuaciones de Maxwell son [31]

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} &= (4\pi\epsilon_0) \frac{\rho_{\text{tot}}}{\epsilon_0}, & \nabla \times \vec{\mathbf{E}} &= - \left(\frac{1}{c} \right) \frac{\partial \vec{\mathbf{B}}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} &= 0, & \nabla \times \vec{\mathbf{B}} &= \left(\frac{4\pi}{\mu_0 c} \right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}} + (c) \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{\mathbf{E}}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

donde $\vec{\mathbf{E}}$ es el campo eléctrico, $\vec{\mathbf{B}}$ es el campo magnético, ρ_{tot} la densidad de carga total, $\vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}}$ es la densidad de corriente total, c es la rapidez de la luz, ϵ_0 es la permitividad del vacío y μ_0 es la permeabilidad del vacío. En términos de los potenciales ϕ y $\vec{\mathbf{A}}$ las ecuaciones de Maxwell están dadas de la siguiente manera [31]

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

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

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

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

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

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

La expresión para la conservación del momento lineal en electrodinámica es [31]

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

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

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

y $\overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}}(\vec{\mathbf{r}}, t)$ es el tensor de esfuerzos de Maxwell dado por [31]

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \left(\nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{M}} \right)_j &= \delta^{nk} \partial_n M_{jk} = \delta^{nk} \partial_n \epsilon_j^{li} r_l T_{ik} = \delta^{nk} \epsilon_j^{li} \partial_n r_l T_{ik}, \\ &= \delta^{nk} \epsilon_j^{li} (\delta_{nl} T_{ik} + r_l \partial_n T_{ik}) = \delta^{nk} \epsilon_j^{li} r_l \partial_n T_{ik}, \\ &= \delta^{nk} \epsilon_j^{li} r_l \partial_n T_{ik} = \epsilon_j^{li} r_l \partial^k T_{ik} = \epsilon_j^{li} r_l \left(\nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}} \right)_i, \end{aligned} \quad (1.11)$$

de modo que

$$\left(\nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{M}} \right)_j = \left(\vec{\mathbf{r}} \times \nabla \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{T}} \right)_j, \quad (1.12)$$

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\ell}^{\text{mec}}(\vec{r}, t) + \vec{\ell}^{\text{em}}(\vec{r}, t) \right] = \nabla \cdot \vec{\mathbf{M}}(\vec{r}, t), \quad (1.13)$$

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

Conservación del momento angular global en electrodinámica clásica

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

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

$$\vec{\mathbf{L}}^{\text{mec}}(t) = \int_V \vec{\ell}^{\text{mec}}(\vec{r}, t) dV \quad \text{y} \quad \vec{\mathbf{L}}^{\text{em}}(t) = \int_V \vec{\ell}^{\text{em}}(\vec{r}, t) dV. \quad (1.15)$$

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

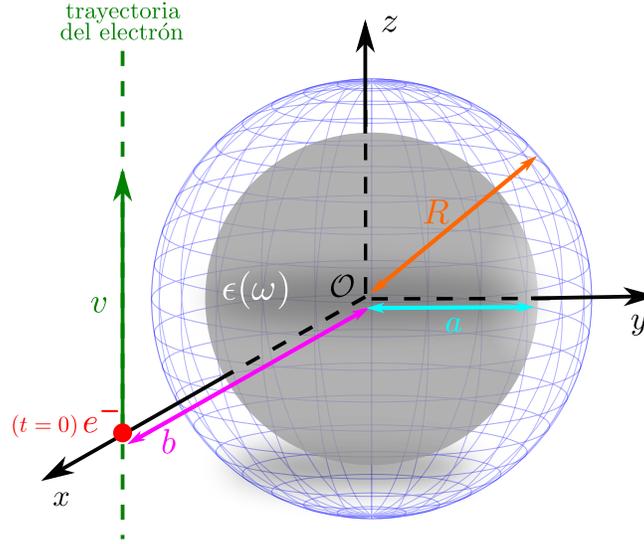


Figura 1.1: Nanopartícula de radio a centrada en el origen caracterizada por una respuesta dieléctrica homogénea $\epsilon(\omega)$, encerrada por la superficie de integración S de radio R , junto a la trayectoria del electrón localizada en $\vec{r} = (0, b, vt)$.

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

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

donde

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

Los términos

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

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

Entonces

$$\Delta \vec{\mathbf{L}} = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}, t) \cdot d\vec{\mathbf{S}} dt, \quad (1.19)$$

o usando notación de índices

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} E_i(\vec{\mathbf{r}}, t) E_j(\vec{\mathbf{r}}, t) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_i(\vec{\mathbf{r}}, \omega) e^{-i\omega t} d\omega \right] \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_j(\vec{\mathbf{r}}, \omega') e^{-i\omega' t} d\omega' \right] dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\omega+\omega')t} dt \right] E_i(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_j(\vec{\mathbf{r}}, \omega') d\omega d\omega' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega + \omega') E_i(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_j(\vec{\mathbf{r}}, \omega') d\omega d\omega' \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_i(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_j(\vec{\mathbf{r}}, -\omega) d\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} E_i(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_j^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega) d\omega \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} [E_i(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_j^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega)] d\omega. \end{aligned} \quad (1.22)$$

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

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

$$\Delta L_i = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \oint_S \epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) n^k dS d\omega, \quad (1.23)$$

donde se ha definido

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = \text{Re} \left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \vec{\mathbf{E}}^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega) - \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \frac{\vec{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{E}}^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \right. \\ \left. + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \vec{\mathbf{H}}^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega) - \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \frac{\vec{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{H}}^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega) \right], \quad (1.24) \end{aligned}$$

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

$$\mathcal{L}_i(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_S \epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) n^k dS, \quad (1.25)$$

por lo que la TMA se calcula de la siguiente forma

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

En coordenadas cartesianas la Ec. (1.25) se escribe como

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

$$\mathcal{L}_y = \frac{1}{\pi} \left[\oint_S z \mathcal{T}_{xk} dS^k - \oint_S x \mathcal{T}_{zk} dS^k \right], \quad (1.28)$$

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

Debido a que el problema de interacción de un electrón rápido interactuando con una NP esférica presenta simetría de reflexión con respecto al plano xz , no puede existir componente de momento lineal transferido en la dirección y [23]. De lo anterior se puede concluir que el momento angular transferido a la NP no puede tener componente x ni z [22]. Por tanto, resulta que solamente la contribución espectral \mathcal{L}_y es diferente de cero. En términos de la base esférica las componentes espectrales están dadas por las siguientes expresiones [22]

Componente espectral que contribuye a la transferencia de momento angular

$$\mathcal{L}_y = \frac{R}{\pi} \oint [\cos \varphi \mathcal{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \mathcal{T}_{\varphi r}] dS_r, \quad (1.30)$$

y

Componentes espectrales que no contribuyen a la transferencia de momento angular

$$\mathcal{L}_x = \frac{R}{\pi} \oint [\sin \varphi \mathcal{T}_{\theta r} + \cos \theta \cos \varphi \mathcal{T}_{\varphi r}] dS_r, \quad (1.31)$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{R}{\pi} \oint \sin \theta \mathcal{T}_{\varphi r} dS_r, \quad (1.32)$$

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

Es posible separar la contribución eléctrica de la magnética en la densidad espectral de momento angular, Ec. (1.26), de modo que se puede separar el tensor de la siguiente forma

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}(\vec{r}, \omega) = \overleftrightarrow{\mathcal{J}}^{\text{E}}(\vec{r}, \omega) + \overleftrightarrow{\mathcal{J}}^{\text{H}}(\vec{r}, \omega), \quad (1.33)$$

donde

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}^{\text{E}} = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}(\vec{r}, \omega) \vec{\mathbf{E}}^*(\vec{r}, \omega) - \frac{\hat{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}(\vec{r}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{E}}^*(\vec{r}, \omega) \right] \quad (1.34)$$

y

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}^{\text{H}} = \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \text{Re} \left[\vec{\mathbf{H}}(\vec{r}, \omega) \vec{\mathbf{H}}^*(\vec{r}, \omega) - \frac{\hat{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{H}}(\vec{r}, \omega) \cdot \vec{\mathbf{H}}^*(\vec{r}, \omega) \right]. \quad (1.35)$$

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

$$\mathcal{L}_i(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \int_0^{4\pi} \left[\epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}^{\text{E}}(\vec{r}, \omega) n^k + \epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}^{\text{H}}(\vec{r}, \omega) n^k \right] d\Omega, \quad (1.36)$$

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

$$\mathcal{L}_i^{\text{E}}(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \int_0^{4\pi} \left[\epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}^{\text{E}}(\vec{r}, \omega) n^k \right] d\Omega, \quad (1.37)$$

$$\mathcal{L}_i^{\text{H}}(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \int_0^{4\pi} \left[\epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}^{\text{H}}(\vec{r}, \omega) n^k \right] d\Omega. \quad (1.38)$$

Dado que se pueden separar a los campos electromagnéticos $\vec{\mathbf{E}}$ y $\vec{\mathbf{H}}$ en sus contribuciones de campo externo (ext) y campo esparcido (scat), se reescribe la componente eléctrica del tensor definido en la Ec. (1.24) como

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}^{\text{E}} = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \right) \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* \right) - \frac{\hat{\mathbf{I}}}{2} \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \right) \cdot \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* \right) \right]$$

y desarrollando los términos se obtiene

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathcal{J}}^E = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* \right) \right. \\ \left. - \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \left(\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* + \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* \right) \right], \end{aligned} \quad (1.39)$$

donde la componente eléctrica del tensor de esfuerzos se puede escribir como

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}^E = \overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ss}}^E + \overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{int}}^E + \overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ee}}^E, \quad (1.40)$$

con

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ss}}^E = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* - \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* \right], \quad (1.41)$$

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ee}}^E = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* - \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* \right], \quad (1.42)$$

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{int}}^E = \overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{se}}^E + \overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{es}}^E, \quad (1.43)$$

donde

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{es}}^E = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* - \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}}^* \right], \quad (1.44)$$

$$\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{se}}^E = \frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \text{Re} \left[\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* - \frac{\overleftrightarrow{\mathbf{I}}}{2} \vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} \cdot \vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}^* \right]. \quad (1.45)$$

Análogamente, al hacer la sustitución $\epsilon_0 \rightarrow \mu_0$ y $\vec{\mathbf{E}} \rightarrow \vec{\mathbf{H}}$ en las Ecs. (1.39)-(1.45), se obtienen las contribuciones magnéticas al tensor $\overleftrightarrow{\mathcal{J}}$, denotadas por $\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{ij}^H$ donde ij toman los valores $\{e, s\}$. Se puede interpretar a $\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{int}}^H$ como la componente que está relacionada con la interacción del campo electromagnético del electrón con las cargas y corrientes inducidas en la NP. En el caso en que no existiera NP, nada alteraría el movimiento del electrón, por lo que no perdería ni cedería energía, momento lineal ni momento angular ($\Delta L = 0$). En este caso los campos electromagnéticos esparcidos serían nulos, por lo que la única contribución al momento angular provendría de la componente $\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ee}}^H$. Por tanto, de manera general, se concluye que la contribución al momento angular transferido debido a $\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ee}}^H$ es nula [29]. También es conveniente mencionar que la componente $\overleftrightarrow{\mathcal{J}}_{\text{ss}}^H$, al depender únicamente de los campos electromagnéticos esparcidos por la NP, está relacionada con la interacción de la NP consigo misma, referida como reacción de radiación [31].

En la siguiente sección se presentan las expresiones analíticas de los campos electromagnéticos externos (producidos por el electrón), así como de los esparcidos por la NP.

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

El campo electromagnético externo producido por un electrón rápido, considerado como una partícula puntual de carga $q = -e$, viajando a velocidad $\vec{v} = v\hat{z}$ constante a lo largo del eje z , describiendo la trayectoria $\vec{r} = (b, 0, vt)$ (ver Fig. 1.1), se puede obtener mediante una transformación de Lorentz de un sistema de referencia en el que el electrón se encuentra en reposo, a un sistema de referencia en el que el electrón que se mueve a velocidad constante \vec{v} , obteniendo [31]

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = (4\pi\epsilon_0) \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma \left[\vec{\mathbf{R}} + (z - vt)\hat{z} \right]}{[R^2 + \gamma^2(z - vt)^2]^{3/2}}, \quad (1.46)$$

$$\vec{\mathbf{H}}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = (4\pi) \frac{-e}{4\pi} \frac{\gamma \vec{v} \times \vec{\mathbf{R}}}{[R^2 + \gamma^2(z - vt)^2]^{3/2}}, \quad (1.47)$$

en donde c es la rapidez de la luz, $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$, $\beta = v/c$, $\vec{\mathbf{R}} = (x - b)\hat{x} + y\hat{y}$, $R = \sqrt{(x - b)^2 + y^2}$ y $\vec{v} \times \vec{\mathbf{R}} = v[(x - b)\hat{y} - y\hat{x}]$. También se pueden calcular los campos electromagnéticos externos en función de la frecuencia mediante una transformada de Fourier de las Ecs. (1.46) y (1.47) [32]:

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{r}, \omega) = (4\pi\epsilon_0) \frac{-e}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\omega}{v^2\gamma} e^{i\omega(z/v)} \left\{ \text{sign}(\omega) K_1 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma} \right) \hat{R} - \frac{i}{\gamma} K_0 \left(\frac{|\omega|R}{v\gamma} \right) \hat{z} \right\}, \quad (1.48)$$

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

que son expresiones cerradas con simetría cilíndrica. Dado que para el cálculo de la TMA son necesarios los campos esparcidos por la NP, que tienen simetría esférica, conviene expresar a los campos electromagnéticos del electrón en base esférica.

El campo eléctrico producido por el electrón se puede obtener mediante la función de Green dependiente del tiempo [32]

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{r}, \omega) = e \left(\nabla - i \frac{k\vec{v}}{c} \right) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G_0(\vec{r} - \vec{r}_t) dt, \quad (1.50)$$

donde $G_0(\vec{r} - \vec{r}_t)$ está dada por

$$G_0(\vec{r} - \vec{r}_t) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}_t|}}{|\vec{r} - \vec{r}_t|}, \quad (1.51)$$

con $k = \omega/c$ el número de onda en el vacío, $\vec{r}_t = \vec{r}_0 + \vec{v}t$ la posición del electrón al tiempo t y $\vec{r}_0 = (b, 0, 0)$. Al expandir la función de Green en base esférica se obtiene [17]

$$G_0(\vec{r} - \vec{r}_t) = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) h_{\ell}^+(kr_t) Y_{\ell,m}(\Omega_r) Y_{\ell,m}(\Omega_{r_t})^*, \quad (1.52)$$

donde $Y_{\ell,m}$ son los armónicos esféricos escalares, Ω_r es el ángulo sólido del vector \vec{r} , $h_{\ell}^+(x) = ih_{\ell}^1(x)$ es la función de Hankel esférica de orden ℓ y $j_{\ell}(x)$ es la función esférica de Bessel de orden ℓ [33]. Sustituyendo

la Ec. (1.52) en la Ec. (1.50), se obtiene

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}}(\vec{\mathbf{r}}, t) = \left(\nabla - i \frac{k \vec{\mathbf{v}}}{c} \right) \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \phi_{\ell,m}, \quad (1.53)$$

donde

$$\phi_{\ell,m} = \frac{(4\pi\epsilon_0)}{\epsilon_0} k \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} h_{\ell}^{+}(kr_t) Y_{\ell,m}^{*}(\Omega_{r_t}) dt. \quad (1.54)$$

En el [Apéndice A](#) se muestran los detalles del cálculo analítico de la Ec. (1.54). Entonces, el campo electromagnético externo en representación multipolar esférica se escribe como:

Expansión multipolar del campo electromagnético externo producido por el electrón

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{er}} \hat{\mathbf{r}} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} \hat{\boldsymbol{\theta}} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\varphi} \hat{\boldsymbol{\varphi}} \right), \quad (1.55)$$

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

donde

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{er}} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr}, \quad (1.57)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} = & -e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(kr) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \right. \\ & \left. \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \end{aligned} \quad (1.58)$$

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

y

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{er}} = e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr}, \quad (1.60)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{e}\theta} = & e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(kr) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \right. \\ & \left. \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{j_{\ell}(kr)}{kr} - j_{\ell+1}(kr) \right], \end{aligned} \quad (1.61)$$

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

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

por

$$C_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^\ell \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \quad (1.63)$$

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

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

1.3. Campos electromagnéticos esparcidos por la nanopartícula

Como se muestra en el [Apéndice A](#), los campos electromagnéticos satisfacen la ecuación de Helmholtz sin fuentes

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{\mathbf{E}} = \vec{\mathbf{0}}, \quad (1.65)$$

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{0}}. \quad (1.66)$$

La solución de las Ecs. (1.65) y (1.66) puede ser escrita como [34]

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla \psi^{\text{L}} + \vec{\mathbf{L}} \psi^{\text{M}} - \frac{i}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^{\text{E}}, \quad (1.67)$$

$$\vec{\mathbf{H}} = -\frac{i}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^{\text{M}} - \vec{\mathbf{L}} \psi^{\text{E}}, \quad (1.68)$$

donde $\vec{\mathbf{L}} = -i\vec{\mathbf{r}} \times \nabla$ es el operador de momento angular orbital y ψ^{L} , ψ^{E} y ψ^{M} son funciones escalares que satisfacen la ecuación escalar de Helmholtz. Como el campo eléctrico externo es un campo solenoidal ($\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 0$), la función escalar ψ^{L} debe ser nula. Las funciones escalares ψ^{E} y ψ^{M} , del campo externo y del campo esparcido, se pueden escribir en la base esférica definida a partir del sistema de coordenadas mostrado en la Fig. 1.1, como [17]

$$\psi^{\text{E,ext}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \quad (1.69)$$

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

$$\psi^{\text{E,scat}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^\ell h_\ell^+(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}}, \quad (1.71)$$

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

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

escalares electromagnéticos externos, de la siguiente manera [17]

$$\psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}} = t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \quad (1.73)$$

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

donde los coeficientes t_{ℓ}^{E} y t_{ℓ}^{M} , para el caso de partículas esféricas homogéneas, corresponden a los coeficientes de la solución de Mie: [35]

$$t_{\ell}^{\text{E}} = \frac{-j_{\ell}(x_0) [x_i j_{\ell}(x_i)]' + \epsilon_i j_{\ell}(x_i) [x_0 j_{\ell}(x_0)]'}{h_{\ell}^{+}(x_0) [x_i j_{\ell}(x_i)]' - \epsilon_i j_{\ell}(x_i) [x_0 h_{\ell}^{+}(x_0)]'}, \quad (1.75)$$

$$t_{\ell}^{\text{M}} = \frac{-x_i j_{\ell}(x_0) j_{\ell}'(x_i) + x_0 j_{\ell}'(x_0) j_{\ell}(x_i)}{x_i h_{\ell}^{+}(x_0) j_{\ell}'(x_i) - x_0 h_{\ell}^{+'}(x_0) j_{\ell}(x_i)}, \quad (1.76)$$

donde $x_0 = ka$ y $x_i = ka\sqrt{\epsilon_i}$, con a el radio y ϵ_i la función dieléctrica de la NP. La prima en las Ecs. (1.75) y (1.76) denota la derivada de la función respecto de su argumento. Sustituyendo los potenciales escalares esparcidos de las Ecs. (1.73) y (1.74) en las Ecs. (1.67) y (1.68) se obtiene

Expansión multipolar del campo electromagnético esparcido por la NP

$$\vec{\mathbf{E}}_{\text{scat}} = \sum_{\ell,m} \left(\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{sr}} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} \hat{\varphi} \right), \quad (1.77)$$

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

donde

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{sr}} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{+}(k_0r)}{k_0r}, \quad (1.79)$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} = -e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{+}(k_0r) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_0r)}{k_0r} - h_{\ell+1}^{+}(k_0r) \right], \quad (1.80)$$

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} = ie^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} h_{\ell}^{+}(k_0r) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] + ie^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_0r)}{k_0r} - h_{\ell+1}^{+}(k_0r) \right], \quad (1.81)$$

y

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{sr}} = e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{+}(k_0 r)}{k_0 r}, \quad (1.82)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{s}\theta} = e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{+}(k_0 r) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \right. \\ \left. \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{\ell+1}^{+}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (1.83)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{s}\varphi} = -i e^{im\varphi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} h_{\ell}^{+}(k_0 r) \left[(\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \frac{\ell-m+1}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \\ + i e^{im\varphi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \left[(\ell+1) \frac{h_{\ell}^{+}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{\ell+1}^{+}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (1.84)$$

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

$$C_{\ell,m}^{\text{scat}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \quad (1.85)$$

$$D_{\ell,m}^{\text{scat}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}. \quad (1.86)$$

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

$$\mathcal{L}_i(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_S \epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) n^k dS.$$

En este capítulo se presentan los resultados de las expresiones semi-analíticas que describen la contribución espectral de la transferencia de momento angular (TMA) en la interacción entre un electrón rápido y una NP esférica. En particular, se desarrollan los términos de las densidades espectrales de la TMA mediante la transformada de Fourier del tensor de esfuerzos de Maxwell, expandiendo los términos cruzados de los campos electromagnéticos y calculando las integrales semi-analíticamente sobre una superficie esférica S que encierra la NP.

Cabe mencionar que para obtener la TMA a partir de las expresiones semi-analíticas desarrolladas para las contribuciones espectrales a la TMA, es necesario realizar una integración numérica en todo el espacio de frecuencias, para lo cual se utilizará el método de cuadraturas de Gauss-Kronrod que permite estimar el error numérico cometido [36].

2.1. Densidades espectrales de la transferencia de momento angular

En el [Capítulo 1](#) se obtuvo una expresión para la TMA de un electrón rápido a una NP esférica, dada por la Ec. (1.26),

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

en donde la densidad espectral de momento angular se definió en la Ec. (1.25)

$$\mathcal{L}_i(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_S \epsilon_i^{lj} r_l \mathcal{T}_{jk}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) n^k dS,$$

de modo que las componentes de la TMA están dadas por

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

$$\mathcal{L}_y = \frac{R^3}{\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta [\cos \varphi \mathcal{T}_{\theta r} - \cos \theta \sin \varphi \mathcal{T}_{\varphi r}] d\varphi d\theta, \quad (2.2)$$

$$\mathcal{L}_z = \frac{R^3}{\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \mathcal{T}_{\varphi r} d\varphi d\theta, \quad (2.3)$$

donde

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

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

Cabe recordar que se puede separar $E_i = E_i^{\text{ext}} + E_i^{\text{scat}}$ y $H_i = H_i^{\text{ext}} + H_i^{\text{scat}}$, y se pueden desarrollar los términos $E_\alpha(\vec{\mathbf{r}}, \omega) E_r^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ y $H_\alpha(\vec{\mathbf{r}}, \omega) H_r^*(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ en función de las sumas multipolares expresadas en la Ecs. (1.55), (1.56), (1.77) y (1.78), de la siguiente manera

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

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

donde a y b pueden tomar los valores de «scat» (denotando componentes del campo esparcido) o de «ext» (componentes del campo externo), y α corresponde a la proyección en $\hat{\theta}$ o en $\hat{\varphi}$.

El término $\mathcal{E}_{\ell, m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell', m'}^{br*}$ está dado por

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

donde $k = \omega/c$, P_ℓ^m es la función asociada de Legendre de grado ℓ y orden m , los coeficientes $C_{\ell, m}^a$ y $D_{\ell, m}^a$ están definidos en las Ecs. (1.63), (1.64), (1.85) y (1.86), $Z_\ell^s = h_\ell^+(kr)$ para el campo esparcido, y $Z_\ell^e = j_\ell(kr)$ para el campo externo, y se ha definido:

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

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

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

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

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

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

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

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

Las integrales en φ se pueden calcular teniendo en cuenta que

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

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

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

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

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

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

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

que se pueden calcular mediante cuadraturas Gaussianas [36], proporcionando resultados exactos al ser utilizadas para integrar polinomios¹. Para el caso particular en el que solo se integran dos funciones asociadas de Legendre, se utiliza la relación de ortogonalidad [33]

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

2.3. Transferencia de momento angular

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

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

y (2.7) en las Ecs. (2.4) y (2.5) se obtiene

$$\mathcal{T}_{\theta r} = \sum_{a,b} \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \operatorname{Re} \left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \right], \quad (2.20)$$

$$\mathcal{T}_{\varphi r} = \sum_{a,b} \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \operatorname{Re} \left[\frac{\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} + \frac{\mu_0}{(4\pi\mu_0)} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \right], \quad (2.21)$$

donde la suma sobre a, b considera las interacciones \mathcal{T}_{ss} , \mathcal{T}_{ee} , \mathcal{T}_{es} y \mathcal{T}_{se} , descritas en las Ecs. (1.41)-(1.45).

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

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} \sin \varphi d\Omega = i\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ -C_{\ell,m}^a D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - D_{\ell,m}^a D_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\ \left. \times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.22)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \sin \varphi d\Omega = i\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ D_{\ell,m}^a C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - C_{\ell,m}^a C_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\ \left. \times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.23)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} \cos \varphi d\Omega = \pi (\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'}) \left\{ -C_{\ell,m}^a D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - D_{\ell,m}^a D_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\ \left. \times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.24)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\theta} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \cos \varphi d\Omega = \pi (\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'}) \left\{ D_{\ell,m}^a C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} m I U_{\ell,\ell'}^{m,m'} - C_{\ell,m}^a C_{\ell',m'}^{b*} \frac{f_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \right. \\ \left. \times \left[(\ell+1) I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.25)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{br*} \cos \theta \sin \varphi d\Omega = -\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ C_{\ell,m}^a D_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \left[(\ell+1) I V_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right. \right. \\ \left. \left. - (\ell-m+1) I W_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + D_{\ell,m}^a D_{\ell',m'}^{b*} m \frac{f_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.26)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{a\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{br*} \cos \theta \sin \varphi d\Omega = -\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ -D_{\ell,m}^a C_{\ell',m'}^{b*} \frac{Z_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} \left[(\ell+1) I V_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right. \right. \\ \left. \left. - (\ell-m+1) I W_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + C_{\ell,m}^a C_{\ell',m'}^{b*} m \frac{f_\ell^a Z_{\ell'}^{b*}}{kR} I W_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.27)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{a}\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\text{br}*} \cos \theta \cos \varphi d\Omega = i\pi (\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'}) \left\{ C_{\ell,m}^{\text{a}} D_{\ell',m'}^{\text{b}*} \frac{Z_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + D_{\ell,m}^{\text{a}} D_{\ell',m'}^{\text{b}*} m \frac{f_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.28)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{a}\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\text{br}*} \cos \theta \cos \varphi d\Omega = i\pi (\delta_{m-1,m'} + \delta_{m+1,m'}) \left\{ -D_{\ell,m}^{\text{a}} C_{\ell',m'}^{\text{b}*} \frac{Z_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} \left[(\ell+1) IV_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) IW_{\ell+1,\ell'}^{m,m'} \right] + C_{\ell,m}^{\text{a}} C_{\ell',m'}^{\text{b}*} m \frac{f_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} IW_{\ell,\ell'}^{m,m'} \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.29)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{E}_{\ell,m}^{\text{a}\varphi} \mathcal{E}_{\ell',m'}^{\text{br}*} \sin \theta d\Omega = i2\pi \delta_{mm'} \left\{ C_{\ell,m}^{\text{a}} D_{\ell',m'}^{\text{b}*} \frac{Z_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} \left[(\ell+1) IM_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) \Delta_{\ell+1,\ell'} \right] + D_{\ell,m}^{\text{a}} D_{\ell',m'}^{\text{b}*} m \frac{f_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} \Delta_{\ell\ell'} \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.30)$$

$$\int_0^{4\pi} \mathcal{H}_{\ell,m}^{\text{a}\varphi} \mathcal{H}_{\ell',m'}^{\text{br}*} \sin \theta d\Omega = i2\pi \delta_{mm'} \left\{ -D_{\ell,m}^{\text{a}} C_{\ell',m'}^{\text{b}*} \frac{Z_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} \left[(\ell+1) IM_{\ell,\ell'}^{m,m'} - (\ell-m+1) \Delta_{\ell+1,\ell'} \right] + C_{\ell,m}^{\text{a}} C_{\ell',m'}^{\text{b}*} m \frac{f_{\ell}^{\text{a}} Z_{\ell'}^{\text{b}*}}{kR} \Delta_{\ell\ell'} \right\} \ell'(\ell'+1), \quad (2.31)$$

y definiendo las siguientes cantidades

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

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

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

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

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

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

$$\mathcal{L}_x = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \left(IS_{\ell m \ell' m'}^{\text{a}\theta \text{br}} + ICC_{\ell m \ell' m'}^{\text{a}\varphi \text{br}} \right), \quad (2.37)$$

$$\mathcal{L}_y = \sum_{\ell,m} \sum_{\ell',m'} \left(IC_{\ell m \ell' m'}^{\text{a}\theta \text{br}} - ICS_{\ell m \ell' m'}^{\text{a}\varphi \text{br}} \right), \quad (2.38)$$

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

Se llevó a cabo una prueba inicial de consistencia a las Ecs. (2.37)-(2.39) mediante el cálculo de la TMA, tomando en cuenta únicamente a los campos electromagnéticos externos producidos por el electrón, los

cuales no contribuyen a la TMA. El cálculo detallado de la TMA nula resultante debido al campo externo ΔL_{ext} se encuentra en la sección 2.4.

Las Ecs. (2.37)-(2.39) proporcionan expresiones cerradas y exactas para las densidades espectrales \mathcal{L} , las cuales se calculaba anteriormente de forma numérica. Al contar con soluciones semi-analíticas, se pueden integrar las Ecs. (2.37)-(2.39) en el espacio de frecuencias para calcular la TMA. Aunque la integral de frecuencias se realice numéricamente, por ejemplo, mediante la cuadratura de Gauss-Kronrod, esta metodología ha demostrado ser suficiente para realizar cálculos para NPs de hasta 50 nm de radio en el caso de la transferencia de momento lineal [27]. Por tanto, se espera que esta metodología resulte adecuada para realizar cálculos análogos para el caso angular.

2.4. Pruebas de consistencia: Transferencia de momento angular debida al campo externo

En esta sección se presenta una primera prueba de consistencia de la solución semi-analítica obtenida en esta tesis. Se presentan los resultados de la transferencia de momento angular (TMA) debida exclusivamente al campo electromagnético de un electrón rápido, sin ninguna nanopartícula (NP) presente. En la Fig. 2.1 se muestra el sistema de estudio, que consta de una superficie de integración esférica S que encierra vacío, junto con la trayectoria del electrón localizada en $\vec{r} = (b, 0, vt)$.

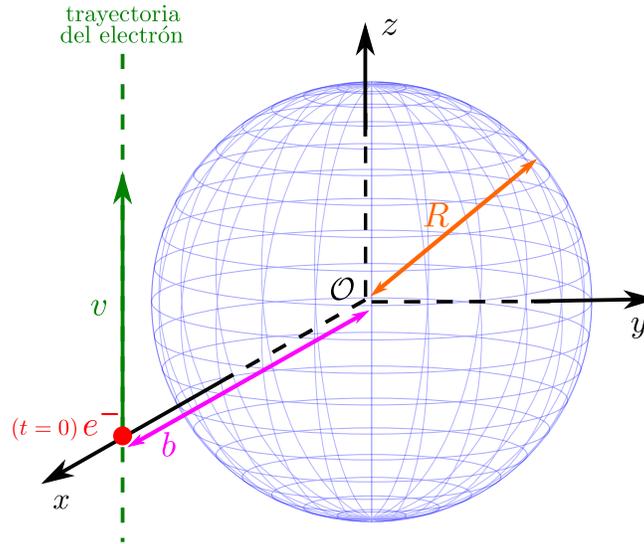


Figura 2.1: Superficie de integración S de radio R , junto a la trayectoria del electrón localizada en $\vec{r} = (b, 0, vt)$.

Se espera que la contribución de la TMA debida únicamente al campo externo ΔL_{ext} se anule, porque cuando se remueve la NP el electrón no interactúa con nada. Por lo tanto, el electrón no transfiere ni energía ni momento, lo que significa en particular que $\Delta L_{\text{ext}} = 0$. Para comparar los resultados obtenidos en esta sección con algún valor mínimo de referencia de TMA, se utilizará el valor más pequeño reportado ($\Delta L_{\text{min}} \sim 10^{-4}\hbar$) en el caso de la TMA a NPs de Au y Bi con un radio de $a = 1$ [22, 28, 29]. Este valor $\Delta L_{\text{min}} \sim 10^{-4}\hbar$ se utilizará como referencia en la TMA debida al campo electromagnético externo calculada en esta sección. También se compararán los resultados obtenidos con el error numérico de la cuadratura de Gauss-Kronrod (GKQ), el cual se obtiene al calcular el valor absoluto de la diferencia entre

el resultado de la integral obtenida mediante una cuadratura de Gauss de orden n (IG_n) y el resultado de la integral obtenida con una GKQ de orden $2n + 1$ (IGK_{2n+1}) [36]. En otras palabras, el error se define como $|IGK_{2n+1} - IG_n|$.

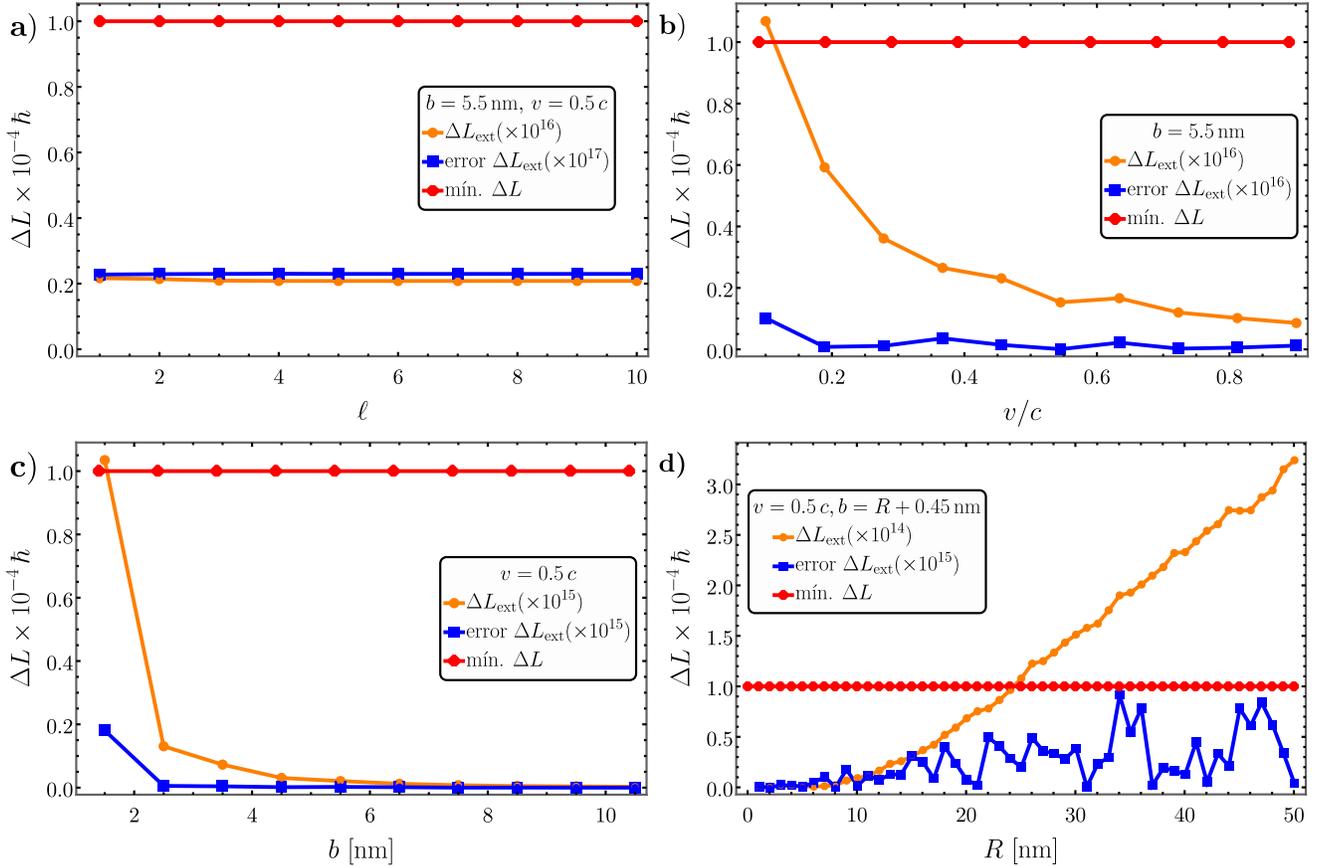


Figura 2.2: Transferencia de momento angular debida al campo externo del electrón, unidos por una línea continua como ayuda visual **a)** en función del orden multipolar ℓ , con $b = 5.5$ nm y $v = 0.5c$; **b)** en función de la rapidez del electrón v , con $b = 5.5$ nm; **c)** en función del parámetro de impacto, con $v = 0.5c$ nm; y **d)** en función del radio R de la superficie de integración S y con $b = R + 0.45$ nm, donde se ha tenido cuidado de que la superficie de integración no contenga a la trayectoria del electrón.

En la Fig. 2.2a) se muestran los resultados de la TMA en función del orden multipolar ℓ , manteniendo constante el parámetro de impacto $b = 5.5$ nm y la rapidez del electrón $v = 0.5c$. Para una mejor visualización, se unieron los puntos con una línea continua. Se observa que la TMA es 16 órdenes de magnitud más pequeña que $\Delta L_{\min} \sim 10^{-4}\hbar$. Por lo tanto se puede concluir que ΔL_{ext} no contribuye a la TMA y que lo que se obtiene del cálculo es error numérico, pues está en un orden de magnitud similar al de ΔL_{ext} . En las subfiguras posteriores, se consideró hasta el orden multipolar $\ell = 10$ para realizar los cálculos. La Fig. 2.2b) muestra la TMA en función de la rapidez del electrón, manteniendo constante el parámetro de impacto $b = 5.5$ nm. Se puede observar que, para rapidezces pequeñas, la TMA crece abruptamente, pero sigue siendo 16 órdenes de magnitud más pequeña que ΔL_{\min} para cualquier valor de v . Además, el error numérico nuevamente está cercano al valor de ΔL . En la Fig. 2.2c) se presenta la TMA en función del parámetro de impacto, manteniendo constante la rapidez del electrón $v = 0.5c$. Para parámetros de impacto pequeños, la TMA también crece abruptamente, pero sigue siendo 15 órdenes de magnitud más pequeña que ΔL_{\min} sin importar la cercanía del electrón a la superficie de integración S . Se observa que el error numérico se encuentra nuevamente cercano al valor de ΔL . Por último, en la

Fig. 2.2d) se muestra la TMA en función del radio R de la superficie de integración S , manteniendo el parámetro $b = R + 0.45$ nm y la rapidez del electrón $v = 0.5c$, donde se ha tenido cuidado de que la superficie de integración no interseque a la trayectoria del electrón. Se puede observar que mientras crece R , la TMA crece linealmente, pero sigue siendo 14 órdenes de magnitud más pequeña que ΔL_{\min} para cualquier tamaño de superficie S y el error numérico sigue cercano al valor de ΔL .

Conclusiones y trabajo a futuro

3.1. Conclusiones

En esta tesis se calculó la transferencia de momento angular (TMA) de un haz de electrones a una nanopartícula esférica dentro de un microscopio electrónico de transmisión y de barrido (STEM), desarrollando una nueva metodología, utilizando un enfoque de electrodinámica clásica, que permite estudiar la transferencia de momento angular con alta eficiencia computacional. Se obtuvieron expresiones analíticas exactas y cerradas de la densidad espectral de TMA, modelando la respuesta electromagnética de la nanopartícula mediante su función dieléctrica.

En el cálculo de la transferencia de momento angular es necesario integrar la densidad espectral de TMA en todo el espacio de frecuencias. Anteriormente, empleando otra metodología de cálculo numérico basado en cubaturas, solamente se logró estudiar la TMA para nanopartículas de hasta 10 nm de radio para nanopartículas modeladas a partir de una función dieléctrica dada por el modelo de Drude, o bien de hasta 5 nm de radio para nanopartículas hechas de materiales plasmónicos como oro, bismuto y plata. Una metodología análoga a la que se presenta en esta tesis se desarrolló anteriormente para la transferencia de momento lineal, mostrando que es eficiente, permitiendo analizar partículas de hasta 50 nm de radio. Por lo anterior, se espera que la metodología presentada en esta tesis permitirá estudiar la transferencia de momento angular a nanopartículas de cualquier tamaño en la nanoescala, es decir, nanopartículas de hasta 50 nm de radio.

Adicionalmente, se desarrolló un código en lenguaje C que calcula la contribución del campo electromagnético externo del electrón a la transferencia de momento angular (la cual es cero), a modo de prueba de las expresiones obtenidas. Se realizaron los cálculos de la TMA en función del orden multipolar, del parámetro de impacto, de la rapidez del electrón y del radio de la superficie esférica de integración. Al obtener siempre resultados que se anulan, se ha ganado confianza en las soluciones semi-analíticas.

A partir de las expresiones de las integrales obtenidas en este trabajo, que contienen también a los campos electromagnéticos esparcidos por las nanopartículas, se puede explorar la dinámica angular en la interacción de haces de electrones con nanopartículas en un amplio rango de tamaños y materiales. En conclusión, el presente trabajo proporciona una herramienta poderosa y computacionalmente eficiente para el estudio teórico de la transferencia de momento angular dentro de un STEM, lo que puede tener

importantes aplicaciones en campos como la nanotecnología y la medicina, con el desarrollo de las pinzas electrónicas.

3.2. Trabajo a futuro

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

Como continuación a este trabajo, se planea utilizar esta metodología para calcular la transferencia de momento angular de electrones rápidos a nanopartículas de diferentes tamaños y materiales (dieléctricos y plasmónicos) en toda la escala nano. Para ello, solo será necesario conocer la función dieléctrica causal que caracterice la respuesta electromagnética del material del que está hecha la nanopartícula. Para poner a prueba el nuevo código, se compararán los resultados con los obtenidos previamente para el caso de nanopartículas pequeñas, de hasta 5 nm de radio, para diferentes materiales. Posteriormente, se extenderán los resultados para nanopartículas más grandes de hasta 50 nm de radio, analizando la TMA en función de los parámetros relevantes del problema: parámetro de impacto y rapidez de los electrones.

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

Apéndice A

Método de los potenciales escalares

En el [Capítulo 1](#) se aborda la teoría y los métodos utilizados para calcular la transferencia de momento angular (TMA) de un electrón rápido a una nanopartícula (NP) esférica. Debido a la simetría esférica de la NP, es conveniente expresar los campos electromagnéticos del electrón en términos de una solución en base esférica. En este contexto, se presenta el método de los potenciales escalares, el cual se basa en una identidad vectorial para el campo electromagnético, la implementación de tres operadores diferenciales vectoriales y la definición de tres funciones escalares para construir las expresiones del campo electromagnético externo, debido al electrón, en términos de una base esférica en el espacio de frecuencias. Se define la transformada de Fourier espaciotemporal como

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

donde T.E. significa integrar sobre todo el espacio y T.E.R. significa integrar sobre todo el espacio recíproco. Si ahora se calcula solamente la Transformada de Fourier temporal de las Ecuaciones de Maxwell, Ecs. (1.2), se obtiene

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) &= (4\pi\epsilon_0) \frac{\rho_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega)}{\epsilon_0}, & \nabla \times \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) &= i\omega \left(\frac{1}{c}\right) \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega), \\ \nabla \cdot \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) &= 0, & \nabla \times \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) &= \left(\frac{4\pi}{\mu_0 c}\right) \mu_0 \vec{\mathbf{J}}_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega) - i\omega \frac{(c)}{c^2} \vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}, \omega).\end{aligned}\tag{A.2}$$

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

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\vec{\mathbf{E}} &= 0, \\ (\nabla^2 + k^2)\vec{\mathbf{H}} &= 0,\end{aligned}$$

en donde $k = \omega/c$.

El campo eléctrico $\vec{\mathbf{E}}$ puede ser descrito de la siguiente manera [34]

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

en donde $\vec{\mathbf{L}} = -i\vec{\mathbf{r}} \times \nabla$ es el operador de momento angular orbital. A partir de la Ec. (A.3) se pueden definir las funciones escalares: longitudinal, eléctrica y magnética: [34]

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

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

$$\psi^{\text{M}} = \frac{1}{L^2} \vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{E}}, \quad (\text{A.6})$$

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

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

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

$$\vec{\mathbf{E}} = \nabla \psi^{\text{L}} + \vec{\mathbf{L}} \psi^{\text{M}} - \frac{i}{k} \nabla \times \vec{\mathbf{L}} \psi^{\text{E}}, \quad (\text{A.8})$$

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

En el problema de interés para este trabajo se considera un electrón viajando en vacío y a velocidad constante, por lo que los modos longitudinales no contribuyen ($\nabla \cdot \vec{\mathbf{E}} = 0$), es decir, $\psi^{\text{L}} = 0$. Las funciones escalares eléctrica y magnética se pueden expresar en términos de una base esférica de la siguiente manera [17]

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

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

donde $j_{\ell}(x)$ son las funciones esféricas de Bessel de orden ℓ , $Y_{\ell,m}$ son los armónicos esféricos escalares, (r, Ω_r) son las coordenadas esféricas del vector $\vec{\mathbf{r}}$, y $\psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}$ y $\psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}$ son funciones escalares a determinar. Las Ecs. (A.10) y (A.11) son válidas en la región $a < r < b$, donde a es el radio de la NP y b es el parámetro de impacto del electrón medido desde el centro de la NP, como se muestra en la Fig. 1.1.

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

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

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

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

$$\phi(\vec{\mathbf{q}}, \omega) = (4\pi\epsilon_0) \frac{1}{q^2 - \omega^2/c^2} \frac{\rho_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{q}}, \omega)}{\epsilon_0}, \quad (\text{A.14})$$

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

Calculando la transformada de Fourier de la Ec. (1.5) se sigue que

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

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

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

y calculando la Transformada Inversa de Fourier en el espacio de la Ec. (A.17), se obtiene

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

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

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

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

Considerando que la densidad de carga del electrón es $\rho_{\text{tot}}(\vec{\mathbf{r}}, t) = -e\delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t)$, donde $\vec{\mathbf{r}}_t = (b, 0, vt)$ es el vector posición del electrón, y calculando la transformada de Fourier de la Ec. (1.3), se obtiene la siguiente ecuación

$$\nabla^2 \phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega) + k^2 \phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega) = -(4\pi\epsilon_0) \frac{e}{\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_t) dt, \quad (\text{A.21})$$

donde la solución para $\phi(\vec{\mathbf{r}}, \omega)$ se escribe como [17, 32, 37]

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

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

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

con

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

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

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

Al reescribir la función de Green en una base esférica se obtiene [17]

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

donde $h_{\ell}^{(+)}(x) = i h_{\ell}^{(1)}(x)$ es la función esférica de Hankel de orden ℓ [33]. Sustituyendo la Ec. (A.27) en la Ec. (A.26) se tiene que

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

donde

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

Para calcular las constantes $\phi_{\ell,m}$ de la Ec. (A.29) se calcula la transformada de Fourier de la función de Green en el espacio de frecuencias [32]

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

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

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

y al usar la ortonormalidad de los armónicos esféricos escalares

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

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

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

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

dados por

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

donde el signo !! corresponde al doble factorial, $\beta = v/c$ y

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

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

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

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

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

y donde $B(x,y)$ es la función beta [33].

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

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

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

con

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

Finalmente, se pueden escribir los campos electromagnéticos externos como

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

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

en donde las componentes corresponden a las Ecs. (1.57)-(1.62) del texto principal.

Referencias

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

- [12] V. Oleshko y J. M. Howe. “Electron tweezers” as a Tool for In-situ Manipulation and Processing of Individual Metal Nanoparticles in a Two-Phase Partially Molten Alloy. *Microsc. Microanal.*, 11(S02):1512–1513, 2005. [citado en la pág. 11.]
- [13] V. Oleshko y J. M. Howe. Are electron tweezers possible? *Ultramicroscopy*, 111(11):1599–1606, 2011. [citado en la pág. 11.]
- [14] V. Oleshko y J. M. Howe. Chapter Three - Electron Tweezers as a Tool for High-Precision Manipulation of Nanoobjects. volumen 179 de *Advances in Imaging and Electron Physics*, págs. 203–262. Elsevier, 2013. [citado en la pág. 11.]
- [15] S. Xu, W. Sun, M. Zhang, J. Xu y L. Peng. Transmission electron microscope observation of a freestanding nanocrystal in a Coulomb potential well. *Nanoscale*, 2(2):248–253, 2010. [citado en las págs. 11, 13 y 14.]
- [16] M. Quijada, R. D. Muiño, A. G. Borisov, J. A. Alonso y P. M. Echenique. Lifetime of electronic excitations in metal nanoparticles. *New J. Phys.*, 12(5):053023, 2010. [citado en la pág. 13.]
- [17] F. J. García de Abajo. Relativistic energy loss and induced photon emission in the interaction of a dielectric sphere with an external electron beam. *Phys. Rev. B*, 59:3095–3107, Jan 1999. [citado en las págs. 13, 24, 26, 27, 40, 41 y 42.]
- [18] F. J. García de Abajo. Optical excitations in electron microscopy. *Rev. Mod. Phys.*, 82(1):209–275, 2010. [citado en las págs. 13 y 14.]
- [19] F. J. García de Abajo y V. D. Giulio. Optical Excitations with Electron Beams: Challenges and Opportunities. *ACS Photonics*, 8(4):945–974, 2021. [citado en las págs. 13 y 17.]
- [20] A. Rivacoba y P. M. Echenique. Deflection of STEM electrons by dielectric spheres. *Ultramicroscopy*, 26(4):389 – 392, 1988. [citado en la pág. 13.]
- [21] J. Krehl, G. Guzzinati, J. Schultz, P. Potapov, D. Pohl, J. Martin, J. Verbeeck, A. Fery, B. Büchner y A. Lubk. Spectral field mapping in plasmonic nanostructures with nanometer resolution. *Nat. Commun.*, 9(1):1–6, 2018. [citado en la pág. 13.]
- [22] J. Á. Castellanos-Reyes. *Transferencia de momento angular de electrones rápidos a nanopartículas*. Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias, UNAM, 2021. [citado en las págs. 13, 14, 21 y 34.]
- [23] A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, P. E. Batson, P. M. Echenique, A. Rivacoba y J. Aizpurua. Electromagnetic forces on plasmonic nanoparticles induced by fast electron beams. *Phys. Rev. B*, 82(23):235429, 2010. [citado en las págs. 13, 14 y 21.]
- [24] M. J. Lagos, A. Reyes-Coronado, A. Konečná, P. M. Echenique, J. Aizpurua y P. E. Batson. Atto-second and femtosecond forces exerted on gold nanoparticles induced by swift electrons. *Phys. Rev. B*, 93(20):205440, 2016. [citado en las págs. 13 y 14.]
- [25] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua. Nanoparticle movement: Plasmonic forces and physical constraints. *Ultramicroscopy*, 123:50–58, 2012. [citado en las págs. 13 y 14.]

- [26] J. Castrejón-Figueroa, J. Á. Castellanos-Reyes y A. Reyes-Coronado. [Effects of a noncausal electromagnetic response on the linear momentum transfer from a swift electron to a metallic nanoparticle](#). *Physical Review B*, 104(23):235416, 2021. [citado en la pág. 14.]
- [27] J. Castrejón-Figueroa. *Transferencia de momento lineal de electrones rápidos a nanopartículas*. Tesis de doctorado, Facultad de Ciencias, UNAM, 2021. [citado en las págs. 14 y 34.]
- [28] J. Á. Castellanos-Reyes, J. Castrejón-Figueroa y A. Reyes-Coronado. [Angular dynamics of small nanoparticles induced by non-vortex electron beams](#). *Ultramicroscopy*, 225:113274, 2021. [citado en las págs. 14 y 34.]
- [29] J. Á. Castellanos-Reyes, J. Castrejón-Figueroa y A. Reyes-Coronado. [Theory and simulations of angular momentum transfer from swift electrons to spherical nanoparticles in scanning transmission electron microscopy](#). *Physical Review B*, 107(5):054307, 2023. [citado en las págs. 14, 23 y 34.]
- [30] T. Hahn. [CUBA—a library for multidimensional numerical integration](#). *Comput. Phys. Commun.*, 176(11-12):712–713, 2007. [citado en la pág. 14.]
- [31] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, 3ra edición, 2007. [citado en las págs. 17, 18, 23 y 24.]
- [32] C. Maciel-Escudero y A. Reyes-Coronado. [Electromagnetic fields produced by a swift electron: A source of white light](#). *Wave Motion*, 86:137–149, 2019. [citado en las págs. 24, 41 y 42.]
- [33] M. Abramowitz, I. A. Stegun y R. H. Romer. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. American Association of Physics Teachers, 1988. [citado en las págs. 24, 31, 42 y 43.]
- [34] F. E. Low. *Classical Field Theory: Electromagnetism and Gravitation*. John Wiley & Sons, 2008. [citado en las págs. 26 y 40.]
- [35] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley & Sons, 2008. [citado en la pág. 27.]
- [36] D. Kahaner, C. Moler y S. Nash. *Numerical Methods and Software*. Prentice-Hall, Inc., 1989. [citado en las págs. 29, 31 y 35.]
- [37] G. Barton y G. Barton. *Elements of Green's functions and propagation: potentials, diffusion, and waves*. Oxford University Press, 1989. [citado en la pág. 41.]