



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

TRANSFERENCIA DE MOMENTO LINEAL DE ELECTRONES  
RÁPIDOS A NANOPARTÍCULAS

T E S I S

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

PRESENTA:  
JESÚS CASTREJÓN FIGUEROA

TUTOR:  
DR. ALEJANDRO REYES CORONADO  
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:  
DR. RUBÉN GERARDO BARRERA Y PÉREZ  
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

DR. RICARDO MÉNDEZ FRAGOSO  
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

CIUDAD DE MÉXICO, AGOSTO DE 2021



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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.

# Transferencia de Momento Lineal de Electrones Rápidos a Nanopartículas

Jesús Castrejón Figueroa

Agosto de 2021

---

## Agradecimientos

Le agradezco al Dr. Alejandro Reyes Coronado y al Dr. Rubén Gerardo Barrera por su apoyo incondicional, sin los cuales la realización de este trabajo hubiera sido imposible.

Agradezco al CONACyT por la beca de ayudante de investigador y por la beca de estudios de posgrado que me ha otorgado en los últimos años. Además, este trabajo fue parcialmente financiado por el proyecto de investigación IN 114919 de PAPIIT (DGAPA-UNAM).

---

## Resumen

Debido a su importancia para el desarrollo de nuevas tecnologías, desde la segunda mitad del siglo pasado ha habido una constante búsqueda de técnicas que permitan la manipulación de objetos a la micro- y nano-escala. En particular, se ha observado de manera experimental, que los microscopios electrónicos de transmisión pueden ser usados como herramienta para inducir movimiento en nanopartículas (NPs), al inducir sobre las NPs fuerzas de repulsión o atracción hacia el haz de electrones.

La interacción entre NPs esféricas y haces de electrones ha sido abordada de manera teórica en múltiples ocasiones desde el punto de vista de la electrodinámica clásica, resolviendo las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. En particular, dicha interacción ha sido estudiada a partir del momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP, lo que involucra una integral de superficie cerrada del tensor de esfuerzos de Maxwell y una integral en el espacio de frecuencias. Haciendo uso de reglas de Newton-Cotes (NC) para integración numérica, estudios previos mostraron que el momento lineal transferido a la NP es predominantemente atractivo hacia la trayectoria del electrón, pero se convierte en repulsivo para parámetros de impacto pequeños. Estos resultados concuerdan cualitativamente con lo que ha sido observado experimentalmente. Sin embargo, en estos trabajos teóricos previos, la NP fue caracterizada con una función dieléctrica obtenida de la interpolación (y la extrapolación) de datos experimentales, provenientes de distintos experimentos y en distintos rangos de frecuencia, lo cual no garantiza funciones dieléctricas causales y puede dar lugar a resultados no físicos. Además, las reglas de NC empleadas convergen lentamente (comparadas con una cuadratura gaussiana) y no proveen estimaciones del error sin cálculos adicionales (computacionalmente altamente demandantes). Por lo tanto, es necesaria una revisión de la validez y precisión de los resultados previamente reportados.

En este trabajo se usa la solución retardada de las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias para calcular el momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP. El tamaño de la NP, la velocidad del electrón, y el parámetro de impacto, son considerados de acuerdo a observaciones de microscopía electrónica. Se obtienen expresiones analíticas para el espectro de momento lineal transferido, y se emplean la cuadratura de Gauss-Kronrod (GK) y el método Doble-Exponencial para la integración numérica. La cuadratura GK provee una convergencia numérica más rápida que las reglas de NC y estimaciones del error sin cálculos adicionales, y las formulas del método Doble-Exponencial son óptimas para integración numérica en intervalos no acotados. Se garantiza que los resultados son físicamente confiables al probar la causalidad de las funciones dieléctricas empleadas para describir a la NP, y se discute el efecto que produce la no causalidad de la función dieléctrica en el momento lineal transferido. También se estudian las contribuciones multipolares, y las contribuciones de los campos eléctrico y magnético al momento lineal transferido, así como las contribuciones de los campos electromagnéticos producidos por el electrón y los esparcidos por la NP. Además, se reportan por primera vez resultados cuantitativamente válidos para el momento lineal transferido a NPs grandes, de hasta 50 nm de radio, hechas de aluminio, oro, plata, y bismuto.

Contrariamente a lo que estudios teóricos previos habían reportado, se encuentra que el momento lineal transferido a la NP es siempre atractivo hacia la trayectoria del haz de electrones, independientemente del tamaño de la NP, y de la energía o parámetro de impacto del haz.

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>5</b>
<b>1 Antecedentes</b>	<b>7</b>
1.1 Resultados recientes	13
<b>2 Metodología</b>	<b>17</b>
2.1 Momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP esférica	17
2.2 Campo electromagnético del electrón rápido	20
2.3 Campo electromagnético esparcido por la nanopartícula	23
2.4 Expresiones analíticas de la contribución espectral al momento lineal	26
2.5 Cálculo numérico de la contribución espectral al momento lineal	32
2.6 Integral numérica en el espacio de frecuencias	33
<b>3 Nanopartícula pequeña</b>	<b>36</b>
3.1 Nanopartícula de aluminio	36
3.1.1 Interacción en función del tiempo	39
3.2 Nanopartículas de oro, plata y bismuto	41
3.3 Interacción repulsiva causada por una respuesta no causal de la NP	44
3.3.1 Nanopartícula de oro con respuesta no causal	46
<b>4 Nanopartícula grande</b>	<b>49</b>
4.1 Nanopartícula de aluminio	49
4.1.1 Relación del tamaño de la nanopartícula y el número máximo de multipolos con el momento lineal transferido	51
4.2 Nanopartículas de oro, plata, y bismuto	53
4.2.1 Interacción repulsiva en una nanopartícula no causal de oro	55
4.3 Interacción repulsiva en una nanopartícula cargada	57
<b>Conclusiones</b>	<b>59</b>
<b>A. Método de potencial escalar para el cálculo de los campos electromagnéticos</b>	<b>62</b>
<b>B. Funciones auxiliares para el cálculo analítico de la integral de superficie</b>	<b>66</b>
<b>C. Expresiones analíticas de la parte magnética de la contribución espectral al momento lineal transferido</b>	<b>70</b>

---

D. Momento lineal longitudinal transferido a la nanopartícula	75
Referencias	78

---

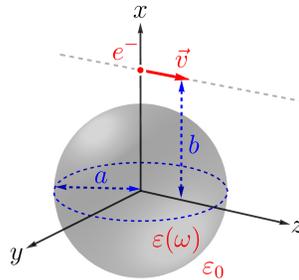
# Introducción

---

Debido a su importancia para el desarrollo de nuevas tecnologías, desde la segunda mitad del siglo pasado ha habido una constante búsqueda de técnicas que permitan la manipulación de objetos a la micro- y nano-escala.<sup>1-8</sup> Las pinzas ópticas, son un ejemplo que es útil para este propósito. En esta técnica, las fuerzas electromagnéticas producidas por haces de luz altamente enfocados permiten mover y atrapar micro-objetos<sup>3-7</sup> e incluso nanopartículas (NPs).<sup>8</sup> En este contexto, se ha observado experimentalmente que los microscopios electrónicos de transmisión pueden ser usados como herramienta para inducir movimiento en NPs, al inducir sobre las NPs fuerzas de repulsión o atracción hacia el haz de electrones.<sup>9-16</sup> Notablemente, la reciente habilidad de alcanzar resolución espacial por debajo de los Ångströms en el STEM (Scanning Transmission Electron Microscope) con corrección de aberraciones,<sup>17-21</sup> junto con los esfuerzos paralelos para lograr resolución espectral en el orden de milielectronvolts,<sup>22-24</sup> hacen al STEM una atractiva herramienta alternativa para nanomanipulación de NPs con alta resolución espacial y espectral. Futuros desarrollos de estas técnicas requieren una comprensión detallada de la interacción entre NPs y haces de electrones.

La interacción entre NPs esféricas y haces de electrones ha sido abordada de manera teórica en múltiples trabajos desde el punto de vista de la electrodinámica clásica,<sup>25-28</sup> resolviendo las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. En particular, dicha interacción ha sido estudiada a partir del momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP, lo que involucra una integral de superficie cerrada alrededor de la NP y una integral en el espacio de frecuencias. Haciendo uso de reglas de Newton-Cotes para integración numérica, estudios previos mostraron que el momento lineal transferido a la NP es predominantemente atractivo hacia la trayectoria del electrón, pero se convierte en repulsivo para parámetros de impacto pequeños.<sup>25-28</sup> Estos resultados concuerdan cualitativamente con lo que ha sido observado experimentalmente.<sup>9-16</sup> Sin embargo, en estos trabajos teóricos previos, la NP fue caracterizada con una función dieléctrica obtenida de la interpolación (y la extrapolación) de datos experimentales, provenientes de distintos experimentos y en distintos rangos de frecuencia,<sup>29</sup> lo cual no garantiza funciones dieléctricas causales y puede dar lugar a resultados no físicos.<sup>30</sup> Además, las reglas de NC empleadas convergen lentamente (comparadas con una cuadratura gaussiana) y no proveen estimaciones del error sin cálculos adicionales (computacionalmente altamente demandantes).<sup>31</sup> Por lo tanto, es necesaria una revisión de la validez y precisión de los resultados previamente reportados, así como de los métodos numéricos previamente empleados.

Los haces de electrones producidos en STEMs modernos alcanzan una energía cinética de hasta 400 keV con corrientes eléctricas del orden de decenas de pA, o equivalente a un tren de electrones rápidos viajando a velocidad constante ( $\sim 0.83c$ , con  $c$  la velocidad de la luz), cada uno emitido cada  $10^{-8}$  s. Dado que la vida media de las excitaciones electrónicas en metales es  $\sim 10^{-14}$  s,<sup>32</sup> es posible asumir que la NP interactúa con un solo electrón rápido a la vez.<sup>33-35</sup> Además, cálculos sin retardo



**Figura 1:** Nanopartícula (esfera gris) de radio  $a$  con una función dieléctrica  $\varepsilon(\omega)$  y suspendida en el vacío. La NP interactúa con un electrón rápido (punto rojo) viajando a velocidad constante  $\vec{v}$  (eje  $z$ , dirección longitudinal) y con un parámetro de impacto  $b$  (eje  $x$ , dirección transversal).

y observaciones experimentales han mostrado que el ángulo de desviación del haz de electrones es muy pequeño ( $\sim 10^{-3}$  radianes),<sup>36,37</sup> por lo que se asume que el electrón incidente se mueve en línea recta. Se considera a la NP como una esfera no-magnética en el vacío, con radio  $a$  y caracterizada por una función dieléctrica homogénea  $\varepsilon(\omega)$ , seleccionando el origen del sistema cartesiano como el centro de la NP, y asumiendo al electrón rápido como una partícula puntual que viaja a velocidad constante  $\vec{v}$  a una distancia  $b$  (parámetro de impacto) del origen, como se muestra en la Fig. 1. Es relevante mencionar que, tal y como ha sido discutido en la referencia [35], bajo estas condiciones no es necesaria una descripción cuántica para el electrón incidente o para la NP, y en este trabajo, así como en los trabajos teóricos previos, se emplea el enfoque de la electrodinámica clásica para describir la interacción entre el electrón rápido y la NP.

En el siguiente capítulo, se muestran los principales resultados previamente reportados acerca de la interacción de un electrón rápido con una NP esférica. De esta forma, se da una visión más amplia del problema y sus antecedentes, mostrando la brecha que pretende ser llenada con este trabajo.

---

## Capítulo 1

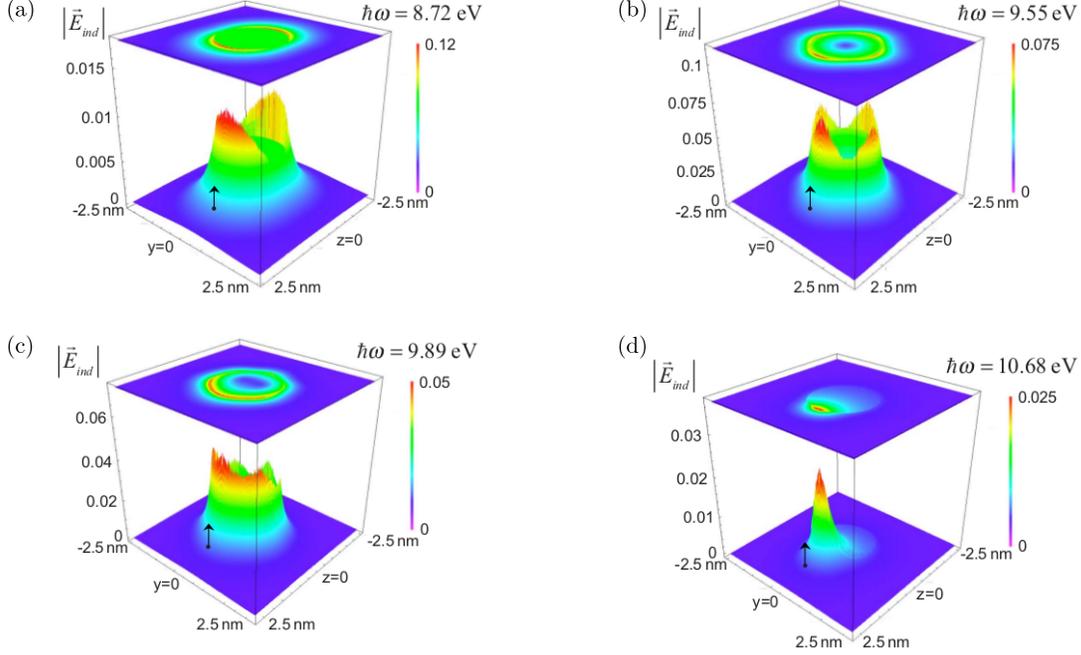
# Antecedentes

---

En el 2004 García de Abajo<sup>25</sup> publica un trabajo que, hasta donde se tiene conocimiento, es el primero en abordar de manera teórica la transferencia de momento lineal de electrones rápidos a NPs metálicas esféricas, usando la solución retardada de las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. En este trabajo se obtiene el momento lineal transferido de un electrón rápido (con energía de 200 keV) a una NP de plata de 10 nm de radio, y se muestra que su componente longitudinal (paralela a la trayectoria del electrón, eje  $z$  en la Fig. 1) es siempre positiva, y se encuentra relacionada con la pérdida de energía por parte del electrón rápido (fenómeno estudiado en espectroscopia de pérdida de energía de electrones, *EELS* por sus siglas en inglés).<sup>33</sup> También se muestra que la componente transversal (perpendicular a la trayectoria del electrón, eje  $x$  en la Fig. 1) del momento lineal transferido es positiva para parámetros de impacto grandes, pero se vuelve negativa para parámetros de impacto suficientemente pequeños. Un valor positivo del momento lineal transversal transferido a la NP significa que la NP es atraída hacia la trayectoria del electrón, mientras que un valor negativo significa que la NP es repelida. En la referencia [25] no se discute a profundidad la interacción repulsiva ni se le da explicación satisfactoria. Posteriormente, en 2008 Batson observa de manera experimental el movimiento de NPs de oro bajo la exposición del haz de electrones de un STEM (con corrección de aberraciones),<sup>9</sup> y se inicia un estudio sistemático del problema de interacción de electrones rápidos y NPs metálicas.

En 2010 se publica el trabajo teórico de A. Reyes-Coronado et al.,<sup>26</sup> en el que se estudia la transferencia de momento lineal a una NP. Se muestra que la repulsión experimentada por la NP está relacionada con los modos multipolares plasmónicos de alto orden, excitados en la NP por el electrón incidente. En la Fig. 1.1, tomada de la referencia [26], se muestra la magnitud del campo eléctrico esparcido por la NP, y el electrón incidente se indica con una flecha negra. Se considera una función dieléctrica dada por el modelo de Drude, considerando una frecuencia de plasma de  $\hbar\omega_p = 15.1$  eV y un parámetro de amortiguamiento de  $\hbar\Gamma = 0.15$  eV, con el fin de imitar al aluminio.<sup>38</sup> En el límite de partícula pequeña, la frecuencia de resonancia del modo polar  $l$  es  $\omega_l = \omega_p \sqrt{l/(2l+1)}$ ,<sup>39</sup> por lo que las energías  $\hbar\omega = 8.72$  eV, 9.55 eV, 9.89 eV y 10.68 eV, mostradas en la Fig. 1.1, corresponden a  $l = 1, 2, 3$ , y  $l \rightarrow \infty$ . Por un lado, en las Figs. 1.1.(a) y 1.1.(b), correspondientes a  $\hbar\omega = 8.72$  eV y 9.55 eV, es posible reconocer al modo dipolar y cuadrupolar, respectivamente, mientras que la Fig. 1.1.(c), correspondiente a  $\hbar\omega = 9.89$  eV, se aprecia el modo octupolar. Por otro lado, en la Fig. 1.1.(d), se muestra que para el modo multipolar correspondiente al plasmón de superficie del plano ( $l \rightarrow \infty$ ),<sup>37</sup> la densidad de carga está fuertemente localizada en una región muy pequeña de la NP, cercana a la trayectoria del electrón rápido.

En la referencia [25], se mostró que a partir de la ecuación de conservación de momento lineal,<sup>40</sup>



**Figura 1.1:** Magnitud del campo eléctrico inducido por un electrón rápido viajando en la cercanía de una NP de aluminio (con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude) de 1 nm de radio. Para (a)  $\hbar\omega = 8.72$  eV, (b) 9.55 eV, (c) 9.89 eV, y (d) 10.68 eV. El electrón rápido (flecha negra) se considera con  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$ , acorde a la Fig. 1 (adaptada de A. Reyes-Coronado et al. Phys. Rev. B 82, 235429, 2010).<sup>26</sup>

es posible obtener el momento lineal transferido del electrón rápido a la NP de la siguiente manera

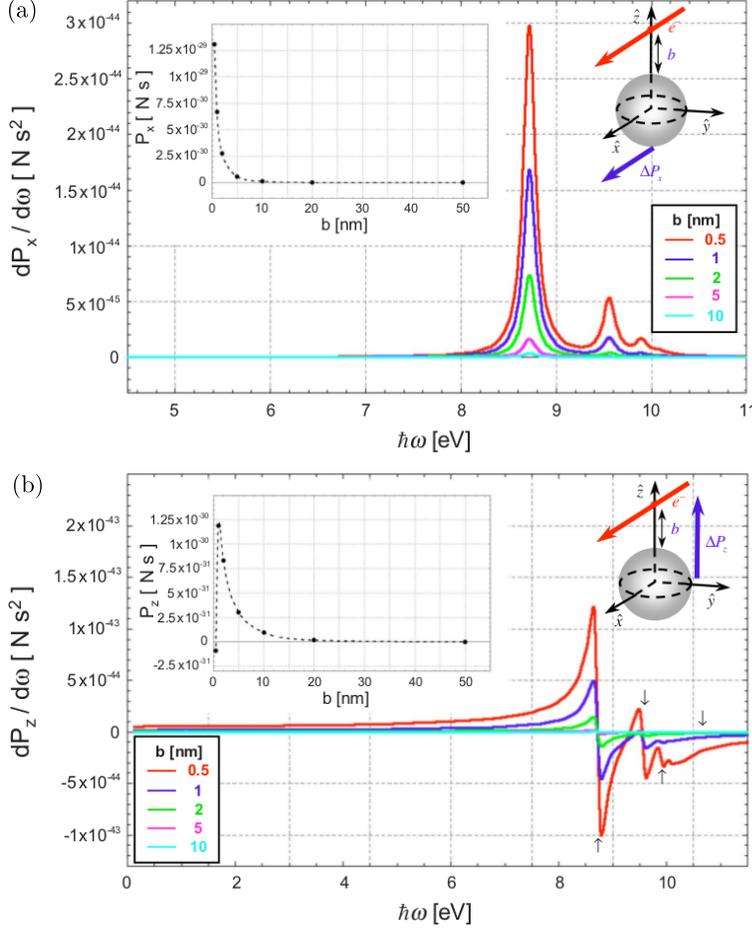
$$\Delta\vec{P} = \int_0^\infty \frac{d\vec{P}(\omega)}{d\omega} d\omega, \quad (1.1)$$

con la contribución espectral al momento lineal dada (en unidades cgs) por

$$\frac{d\vec{P}(\omega)}{d\omega} = \frac{1}{4\pi^2} \oint_S \text{Re} \left[ \vec{E}(\vec{r}; \omega) \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{1}{2} \vec{I} \vec{E}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) + \vec{H}(\vec{r}; \omega) \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{1}{2} \vec{I} \vec{H}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) \right] \cdot d\vec{a}, \quad (1.2)$$

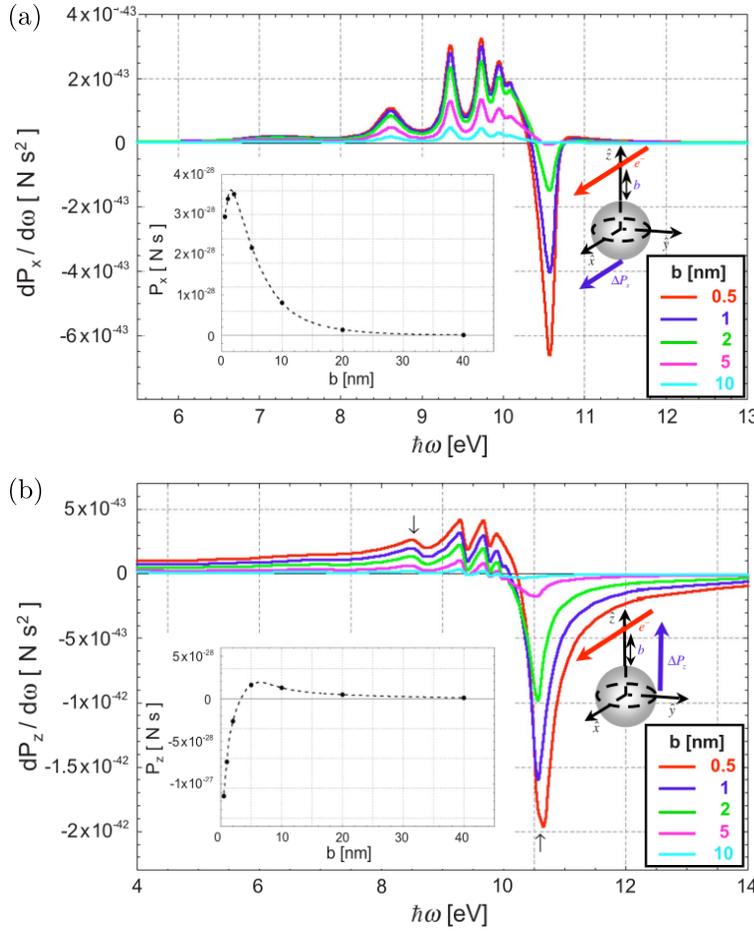
en donde la integral de superficie cerrada se realiza sobre un cascarón esférico centrado en la NP y que no interseca la trayectoria del electrón rápido,  $\vec{E}$  y  $\vec{H}$  son los campos eléctrico y H totales, la suma de los campos producidos por el electrón rápido y los esparcidos por la NP. Los campos electromagnéticos esparcidos por la NP se obtuvieron mediante un enfoque tipo solución de Mie<sup>41</sup> (ver Sección 2.3) en donde, a diferencia de la solución de Mie que considera el esparcimiento de una onda plana por parte de una partícula esférica, en este caso se considera el esparcimiento del campo electromagnético producido por el electrón rápido.

En la Fig. 1.2, reproducida de la referencia [26], se muestra la contribución espectral al momento lineal,  $d\vec{P}(\omega)/d\omega$ , transferido del electrón rápido a una NP de aluminio (con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude) de 1 nm de radio, en función de  $\hbar\omega$ , y para los parámetros de impacto (considerados desde la superficie de la NP) mostrados en el recuadro. En la Fig. 1.2(a), se observa



**Figura 1.2:** Contribución espectral al momento lineal,  $d\vec{P}/d\omega$ , transferido de un electrón rápido a una NP de 1 nm de radio hecha de aluminio (con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude), en función de  $\hbar\omega$ , y para los parámetros de impacto (considerados desde la superficie de la NP) mostrados en el recuadro. (a) Contribución espectral al momento lineal longitudinal,  $dP_x/d\omega$ , y (b) contribución espectral al momento lineal transversal,  $dP_z/d\omega$ . Se muestra el sistema cartesiano considerado: el eje  $x$  corresponde a la dirección longitudinal y el eje  $z$  a la dirección transversal. Además, se muestra en cada caso el momento lineal transferido, dado por la Ec. (1.1), en función de  $b$  (reproducida de A. Reyes-Coronado et al. Phys. Rev. B 82, 235429, 2010).<sup>26</sup>

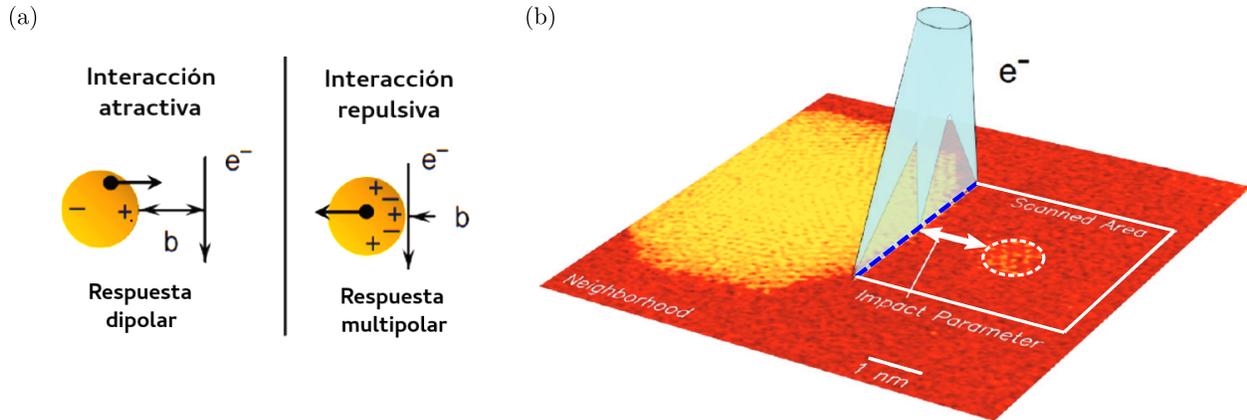
que la contribución espectral al momento lineal longitudinal (eje  $x$ , según el esquema del recuadro),  $dP_{\parallel}/d\omega$ , presenta una serie de máximos a frecuencias que corresponden a las resonancias plasmónicas de la NP. Para las curvas magenta y azul claro, correspondientes a parámetros de impacto grandes (es decir, electrones que pasan lejos de la NP,  $b = 5$  y  $10$  nm, respectivamente), se observa únicamente la resonancia correspondiente al modo dipolar. A medida que el haz de electrones se aproxima a la NP, aparecen contribuciones multipolares de mayor energía: para la curva azul ( $b = 1$  nm) se observa claramente la contribución dipolar y cuadrupolar, y para la curva roja ( $b = 0.5$  nm) se observa hasta la contribución octupolar. Además, en el recuadro de la Fig. 1.2(a), se muestra el momento lineal transferido (integral de la contribución espectral al momento lineal sobre el espacio de frecuencias, Ec. 1.1) a lo largo de la dirección longitudinal  $\Delta P_{\parallel}$ , en función del parámetro de impacto. Se observa que  $\Delta P_{\parallel}$  es siempre positivo, por lo que el electrón rápido arrastra a la NP mientras pierde energía cinética. Por otro lado, la contribución espectral al momento lineal transversal (eje  $z$ , de acuerdo al esquema del recuadro)  $dP_{\perp}/d\omega$ , mostrado en la Fig. 1.2(b), está compuesto por una serie de funciones que tienen la forma de la derivada de una función lorentziana. En este caso, cada cruce por cero corresponde a las frecuencias de resonancia plasmónicas. A medida que el electrón rápido se acerca a la NP, la parte positiva de cada modo polar se superpone con la parte negativa de los modos polares restantes, por lo que no es claro el signo de su contribución al momento lineal transversal transferido. En el recuadro de la Fig. 1.2(b) se muestra el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , en función del parámetro de impacto medido desde la superficie de la NP. Es interesante notar que



**Figura 1.3:** Contribución espectral al momento lineal,  $d\vec{P}/d\omega$ , transferido de un electrón rápido a una NP de 40 nm de radio hecha de aluminio (con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude), en función de  $\hbar\omega$ , y para los parámetros de impacto (considerados desde la superficie de la NP) mostrados en el recuadro. (a) Contribución espectral al momento lineal longitudinal,  $dP_x/d\omega$ , y (b) contribución espectral al momento lineal transversal,  $dP_z/d\omega$ . Se muestra el sistema cartesiano considerado: el eje  $x$  corresponde a la dirección longitudinal y el eje  $z$  a la dirección transversal. Además, se muestra en cada caso el momento lineal transferido, dado por la Ec. (1.1), en función de  $b$  (reproducida de A. Reyes-Coronado et al. Phys. Rev. B 82, 235429, 2010).<sup>26</sup>

para parámetros de impacto pequeños ( $b = 0.5$  nm)  $\Delta P_{\perp}$  es negativo, por lo que la NP es repelida de la trayectoria del electrón rápido.<sup>26</sup> Como se mencionó anteriormente, previamente había sido reportada una interacción repulsiva entre el electrón rápido y la NP para parámetros de impacto pequeños.<sup>25</sup>

Adicionalmente, en la referencia [26] se reportan resultados para el momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP grande de 40 nm de radio, hecha de aluminio (con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude). En la Fig. 1.3, reproducida de la referencia [26], se muestra la contribución espectral al momento lineal,  $d\vec{P}/d\omega$ , transferido del electrón rápido a la NP, en función de  $\hbar\omega$ , y para los parámetros de impacto (considerados desde la superficie de la NP) mostrados en el recuadro. De manera análoga al caso de NP pequeña mostrado en la Fig. 1.2, se observa en la Fig. 1.3 que la contribución espectral al momento lineal, tanto longitudinal [Fig. 1.3(a)] como transversal [Fig. 1.3(b)], presenta una serie de máximos (y cruces por cero para el caso transversal) a frecuencias que corresponden a las resonancias plasmónicas. Sin embargo, al comparar las Figs. 1.2 y 1.3, es posible notar que las resonancias se encuentran corridas ligeramente hacia el rojo (lo cual es de esperarse al incrementar el radio de la NP), y que los modos multipolares de orden superior al dipolo ( $\ell > 1$ ) contribuyen en mayor medida que en el caso de NP pequeña (Fig. 1.2). Es interesante notar que la contribución espectral al momento lineal longitudinal es negativa para algunas frecuencias, como se observa en la Fig. 1.3(a) para  $\hbar\omega = 10.6$  eV. En el recuadro de la Fig. 1.3(a), se muestra el momento lineal longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$ , en función del parámetro de impacto. Es posible notar que  $\Delta P_{\parallel}$

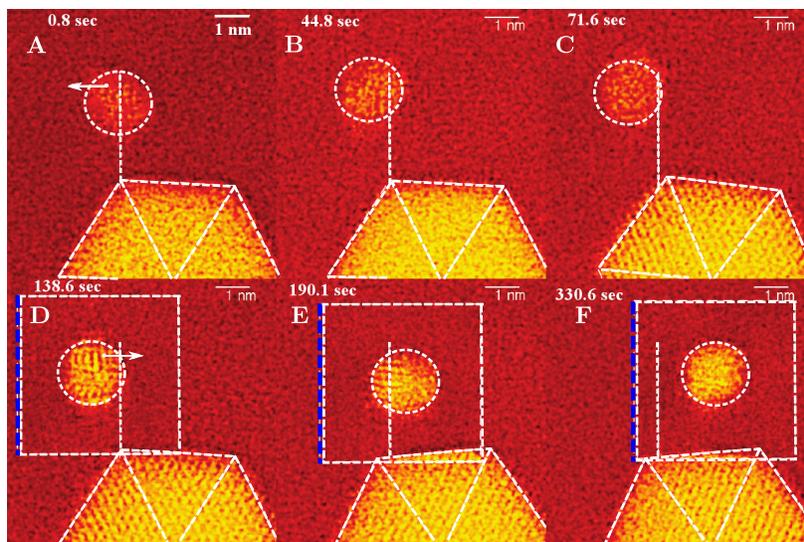


**Figura 1.4:** (a) Configuraciones de carga que resultan en una interacción repulsiva o atractiva entre el electrón rápido y la NP. (b) Formación de la imagen de una NP mediante el haz de electrones de un STEM (reproducida y adaptada de P. E. Batson et al. *Nano Lett.* 11, 3388, 2011).<sup>10</sup>

presenta un máximo en  $b \approx 2$  nm. Adicionalmente, en el recuadro de la Fig. 1.3.(b), se muestra el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , en función del parámetro de impacto. Al igual que para el caso de NP pequeña, se observa que  $\Delta P_{\perp}$  es negativo para parámetros de impacto pequeños, por lo que la NP grande también es repelida de la trayectoria del electrón rápido. Además de NPs hechas de aluminio, en la referencia [26], también se estudia el caso de NPs hechas de oro, considerando su función dieléctrica a partir de interpolación (y extrapolación) de datos experimentales,<sup>29</sup> y se reporta (al igual que para la NP de aluminio) que la interacción entre un electrón rápido y una NP de oro es repulsiva a parámetros de impacto pequeños.

Es posible identificar dos regímenes en el momento lineal transferido a lo largo de la dirección transversal  $\Delta P_{\perp}$ : (i) para parámetros de impacto pequeños, la densidad superficial de carga inducida en la NP tiene un comportamiento multipolar, y la interacción entre el electrón rápido y la NP es repulsiva; (ii) para parámetros de impacto grandes, la densidad superficial de carga inducida en la NP tiene un comportamiento dipolar, y la interacción entre el electrón rápido y la NP es atractiva. Ambos regímenes se muestran de manera esquemática en la Fig. 1.4(a).

La tecnología de corrección de aberraciones en el STEM, permitió que en el 2011 fueran observadas NPs que interactúan de manera atractiva o repulsiva con el haz de electrones.<sup>10</sup> En la Fig. 1.4(b), se muestra un esquema del mecanismo usado en un STEM para la formación de imágenes. Se muestra con un rectángulo punteado la zona que se desea escanear con el STEM. La imagen se forma al barrer el haz de electrones línea por línea sobre el área deseada. Durante un 20% del tiempo total de barrido por línea, el haz de electrones se detiene a esperar una señal de sincronización. En la Fig. 1.4(b), se muestra con una línea azul punteada, la zona en la cual el haz se detiene a esperar dicha señal de sincronización. En el experimento de la referencia [10], las NPs se encuentran soportadas por un sustrato de carbono amorfo con una alta rugosidad, y debido que las NPs interactúan con el sustrato (modificando su superficie), la velocidad de movimiento de las NPs (inducido por el haz de electrones) es relativamente pequeña, aproximadamente 0.03 nm/s.<sup>10</sup> Durante el barrido del haz de electrones, la NP experimenta campos de polarización en todas direcciones que en promedio se anulan entre sí, dado el tiempo de respuesta de la NP sobre el sustrato. Sin embargo, los campos electromagnéticos producidos por el haz de electrones en reposo [línea azul punteada en la Fig. 1.4(b)] no se anulan, y su efecto neto sobre la NP se observa a escalas de tiempo mayores al tiempo

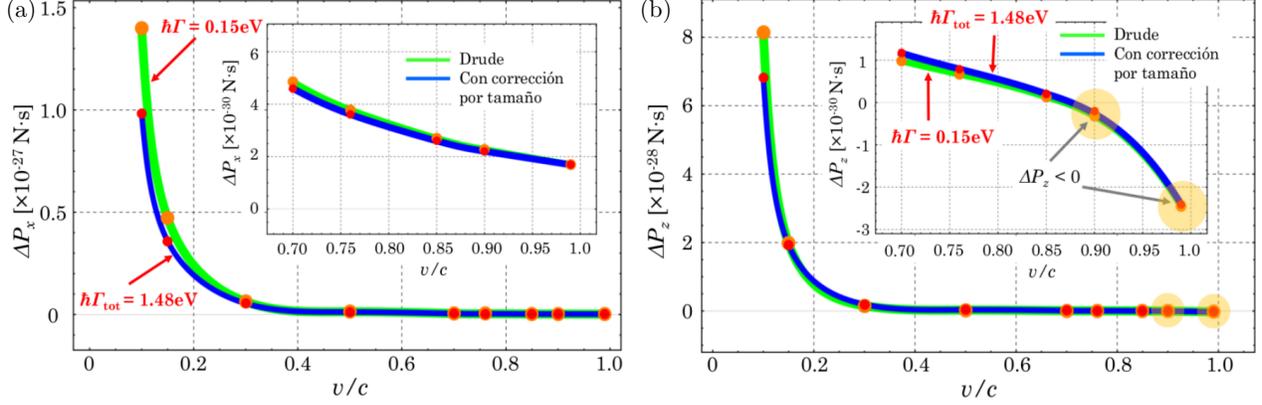


**Figura 1.5:** Serie de imágenes obtenidas por un STEM y con etiquetas **A-F**, correspondientes al tiempo indicado en la parte superior. Se muestra una NP pequeña (hecha de oro y de 1.5 nm de diámetro), y una NP de mayor tamaño (5 nm de diámetro), la cual se usa como referencia para observar el movimiento de la NP pequeña bajo la influencia del haz de electrones. En las imágenes **D-F** se considera un parámetro de impacto de de 1 nm (ver línea azul punteada), y en **A-C** se considera un parámetro de impacto de 4.5 nm (reproducida y adaptada de P. E. Batson et al. Nano Lett. 11, 3388, 2011).<sup>10</sup>

de escaneo del haz. La distancia más corta desde la superficie de la NP a la línea de reposo del haz del electrones [línea azul punteada en la Fig. 1.4(b)], se considera como un parámetro de impacto efectivo.

En el experimento reportado en la referencia [10], se observó el movimiento de una NP de 1.5 nm de diámetro bajo la influencia del haz de electrones de un STEM, al usar una NP de 4.5 nm de diámetro como referencia y empleando una geometría diseñada para minimizar la interacción entre las dos NPs. En la Fig. 1.5 se muestra una serie de imágenes obtenidas con un STEM y etiquetadas con letras **A-F**, correspondientes a los tiempos indicados en cada imagen. Por un lado, en **A** se empleó un parámetro de impacto efectivo de aproximadamente 4.5 nm, y se observa en los cuadros consecutivos, **B** y **C**, que la NP pequeña se mueve hacia la izquierda, por lo que el momento lineal transferido es atractivo hacia el haz de electrones. Por otro lado, en **D** el parámetro de impacto efectivo es de aproximadamente 1 nm, indicado por la línea azul punteada, se observa en los cuadros consecutivos, **E** y **F**, que la NP pequeña se mueve hacia la derecha, por lo que el momento lineal transferido es repulsivo.

Cabe mencionar que en las referencias [10, 26, 28], también se estudia la interacción de haces de electrones con dímeros de NPs (hechas de oro u aluminio), encontrando teórica y experimentalmente condiciones bajo las cuales las fuerzas inter-nanopartícula son atractivas o repulsivas. La magnitud de las fuerzas involucradas en la interacción de haces de electrones y NPs resulta ser de decenas de piconewtons, mismo orden de magnitud que en la técnica de pinzas ópticas,<sup>4-8</sup> la cual consiste en usar las fuerzas inducidas por campos ópticos para atrapar partículas de tamaño micro- y submicro-métrico, tal y como se mencionó en la Introducción. Lo cual abre la posibilidad de una nueva técnica para manipulación controlada de NPs usando haces de electrones, seleccionando la energía del haz de electrones y su posición. A esta técnica se le ha llamado *pinzas electrónicas*, en alusión a las



**Figura 1.6:** Momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP de aluminio de 1 nm de radio, en función de  $v/c$  y considerando  $b = 0.5 \text{ nm}$  (desde la superficie de la NP). (a) Momento lineal transferido a lo largo de la dirección longitudinal (eje  $x$  en este caso), y (b) momento lineal transferido a lo largo de la dirección transversal (eje  $z$ ). La curva verde corresponde a un parámetro de amortiguamiento de  $\hbar\Gamma = 0.15 \text{ eV}$ , y la curva azul ( $\hbar\Gamma = 1.48 \text{ eV}$ ) incluye la corrección (a la función dieléctrica) debido al tamaño de la NP (reproducida y adaptada de la Tesis de maestría de A. Santos Gómez, 2014).<sup>42</sup>

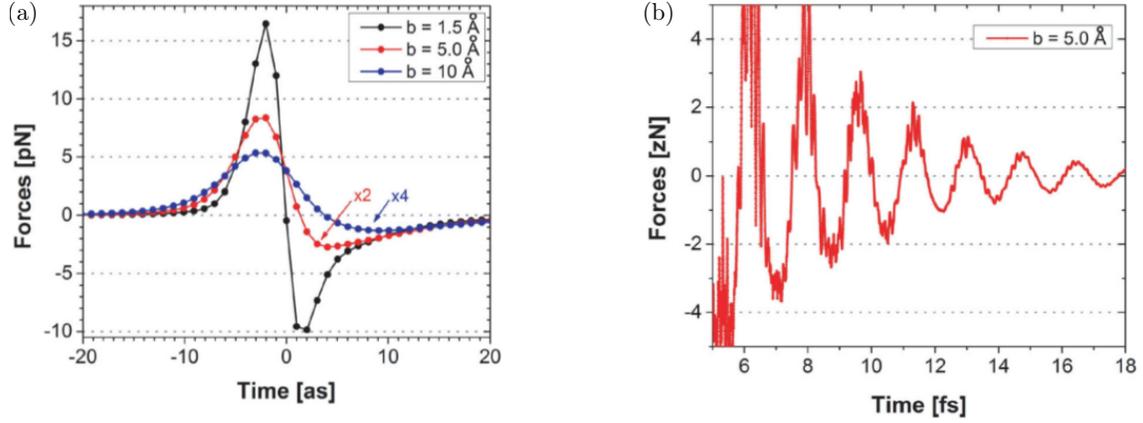
pinzas ópticas.<sup>15</sup>

## 1.1. Resultados recientes

Trabajos experimentales más recientes constatan que es posible inducir movimiento a NPs mediante haces de electrones,<sup>11–16</sup> lo que ha renovado el interés por el estudio de la interacción entre NPs y electrones rápidos. Los trabajos previos mencionados en la sección anterior<sup>10,25,26,28</sup> han abonado al entendimiento del problema de la interacción de haces de electrones con NPs. Sin embargo, quedaron cuestiones por estudiar como: (i) el comportamiento del momento lineal transferido a la NP en función de la velocidad del electrón, (ii) una descripción de la interacción en función del tiempo, y (iii) una descripción de la interacción de haces de electrones con NPs dieléctricas. Recientemente estos puntos fueron tratados de manera teórica, y los resultados se describen a continuación.

En 2014 y como parte de su tesis de maestría,<sup>42</sup> A. Santos Gómez calcula el momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP en función de la velocidad del electrón, considerando una NP de 1 nm de radio hecha de aluminio, con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude con  $\hbar\omega_p = 15.1 \text{ eV}$  y  $\hbar\Gamma = 0.15 \text{ eV}$ . Para NPs pequeñas es necesario considerar correcciones de tamaño a la función dieléctrica,<sup>1</sup> hecho que no había sido considerado en estudios anteriores. En la Fig. 1.6, obtenida de la referencia [42], se muestra el momento lineal transferido,  $\Delta\vec{P}$ , de un electrón rápido a una NP de aluminio de 1 nm de radio, en función de  $v/c$  y considerando  $b = 0.5 \text{ nm}$  (desde la superficie de la NP). La curva verde considera  $\hbar\Gamma = 0.15 \text{ eV}$ , y la curva azul ( $\hbar\Gamma = 1.48 \text{ eV}$ ) incluye la corrección de tamaño a la función dieléctrica. En la Fig. 1.6(a) se muestra el momento lineal transferido a lo largo de la dirección longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$ , y en la Fig. 1.6(b) se muestra el momento lineal transferido a lo largo de la dirección transversal,  $\Delta P_{\perp}$ . Se observan tres características relevantes en la Fig. 1.6: (i) tanto  $\Delta P_{\parallel}$  como  $\Delta P_{\perp}$  decrecen con  $v/c$ , (ii) la curva azul

<sup>1</sup>Cuando el tamaño de la NP es menor al camino libre medio de los electrones de conducción del material de la NP, el desplazamiento de los electrones es afectado por las colisiones con la frontera de la NP, resultando en un incremento de la constante de amortiguamiento  $\Gamma$  en el modelo de Drude.<sup>43</sup>

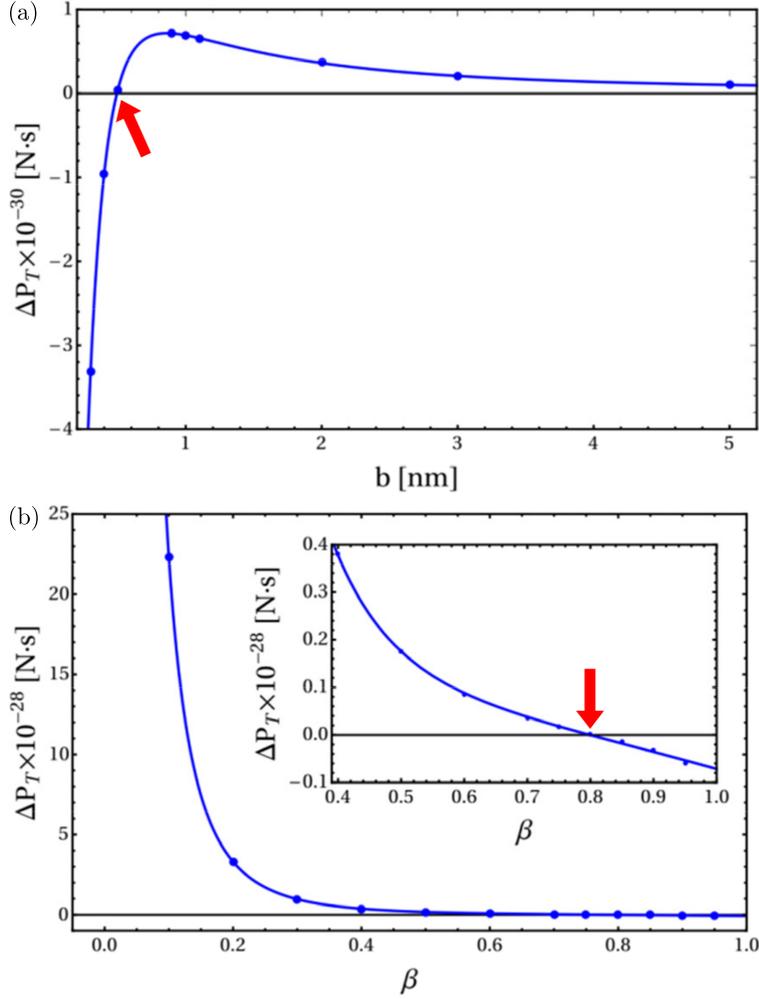


**Figura 1.7:** Fuerza, inducida por un electrón rápido, sobre una NP de oro de 1 nm de radio, en función del tiempo y a lo largo de la dirección transversal. (a) Escala de atto-segundos de la fuerza, considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y parámetro de impacto (desde la superficie de la NP) de  $b = 1.5 \text{ \AA}$  (línea negra),  $5 \text{ \AA}$  (línea roja), y  $10 \text{ \AA}$  (línea azul). (b) Escala de femto-segundos de la fuerza, considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y  $b = 5 \text{ \AA}$  (reproducida y adaptada de M. J. Lagos et al. Phys. Rev. B 93, 205440, 2016).<sup>27</sup>

y la curva verde están prácticamente sobrepuestas para  $v \gtrsim 0.2c$ , y (iii)  $\Delta P_{\parallel}$  es siempre positivo, y  $\Delta P_{\perp}$  es positivo pero se vuelve negativo para  $v \gtrsim 0.9c$ , tal y como se muestra en el recuadro de la Fig. 1.6(b). Por un lado, de (iii) se concluye que existe una transición de momento lineal atractivo a repulsivo para velocidades del electrón cercanas a  $c$ . Por otro lado, de (ii) se concluye que, debido a que  $\Delta \vec{P}$  se obtiene mediante una integral sobre todo el espacio de frecuencias [Ec. (1.1)], la contribución al momento lineal transferido por parte de la corrección por tamaño a la función dieléctrica es despreciable.

En 2016 se estudió por primera vez la interacción de haces de electrones y NPs en función del tiempo. Mediante una transformada numérica de Fourier del espacio de frecuencias al espacio del tiempo de los campos electromagnéticos esparcidos, se obtuvo la fuerza sobre la NP en función del tiempo.<sup>27</sup> En la Fig. 1.7, obtenida de la referencia [27], se muestra la fuerza, a lo largo de la dirección transversal, en función del tiempo sobre una NP de oro de 1 nm de radio. Se encuentra que existen dos escalas temporales para la fuerza sobre la NP: (i) una escala de attosegundos, mostrada en la Fig. 1.7(a), en donde la fuerza tiene una magnitud del orden de piconewtons; y (ii) una escala de femtosegundos, mostrada en la Fig. 1.7(b), en donde la fuerza alterna entre positiva y negativa, con una magnitud del orden de zettanewtons. La mayor parte del momento lineal es transferido en un intervalo de tiempo del orden de decenas de attosegundos. Es importante mencionar que, en la referencia [27], se sugiere que el comportamiento diamagnético del material de la NP es el responsable de la fuerza de interacción repulsiva sobre la NP.

En 2019 J. A. Castellanos-Reyes et al. publica un trabajo en el que se estudia, por primera vez, la interacción de haces de electrones con NPs dieléctricas hechas de MgO,<sup>44</sup> tratando el problema en el espacio de frecuencias [Ec. (1.1)], y considerando la función dieléctrica del MgO a partir de datos experimentales. En la Fig. 1.8, obtenida de la referencia [44], se muestra el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido de un electrón rápido a una NP de MgO de 1 nm de radio. La Fig. 1.8(a) muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $b$  (desde la superficie de la NP), considerando un electrón con  $v = 0.9c$ , y la Fig. 1.8(b) muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $\beta = v/c$ , considerando un electrón con  $b = 0.3 \text{ nm}$ . De la Fig. 1.8 se observa que  $\Delta P_{\perp}$  es positivo para parámetros de impacto  $b \gtrsim 0.5 \text{ nm}$ , indicando una interacción



**Figura 1.8:** Momento lineal transferido a lo largo de la dirección transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , de un electrón rápido a una NP de MgO de 1 nm de radio. (a)  $\Delta P_{\perp}$  para un electrón con  $v = 0.9c$  y en función del parámetro de impacto  $b$ , y (b)  $\Delta P_{\perp}$  para un electrón con  $b = 0.3$  nm y en función de  $\beta = v/c$  (reproducida y adaptada de J. Á Castellanos-Reyes et al., Mater. Today-Proc 13, 341, 2019).<sup>44</sup>

atractiva entre el electrón rápido y la NP. Sin embargo,  $\Delta P_{\perp}$  se vuelve negativo para parámetros de impacto pequeños ( $b \lesssim 0.5$  nm) y velocidades  $v \gtrsim 0.8c$ , tal y como puede verse en la Figs. 1.8(a) y 1.8(b). Lo anterior sugiere que la interacción repulsiva no es una cualidad única presente en NPs metálicas.

Cabe mencionar que en los trabajos previos mencionados anteriormente,<sup>26–28,42,44</sup> las NPs de oro y de MgO fueron caracterizadas con una función dieléctrica obtenida de la interpolación (y la extrapolación) de datos experimentales, provenientes de distintos experimentos y en diferentes rangos de frecuencia, lo cual no necesariamente conduce a funciones dieléctricas causales y puede llevar a resultados no físicos.<sup>30</sup> Además, la integral de superficie cerrada [Ec. (1.2)] y la integral sobre el espacio de frecuencias [Ec. (1.1)], fueron obtenidas numéricamente empleando reglas de Newton-Cotes (NC), las cuales convergen lentamente (comparado con una cuadratura gaussiana) y no proveen estimaciones del error sin cálculos adicionales (computacionalmente altamente demandantes).<sup>31</sup> Por lo tanto, es necesario un método eficiente para la integración numérica capaz de proveer resultados con estimaciones precisas del error. En el siguiente capítulo, se muestran las expresiones analíticas y los métodos numéricos empleados para obtener el momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP, desde el punto de vista de la electrodinámica clásica y empleando la solución retardada de las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. Se obtienen expresiones analíticas para la contri-

bución espectral al momento lineal transferido, y se emplea la cuadratura de Gauss-Kronrod (GK) y al método Doble-Exponencial para la integración numérica. La cuadratura GK provee convergencia numérica más rápida que las reglas de NC y estimaciones del error sin cálculos adicionales,<sup>31,45</sup> y las fórmulas del método Doble-Exponencial son óptimas para integración numérica en intervalos no acotados.<sup>46,47</sup> Se garantiza que los resultados son físicamente confiables al comprobar la causalidad de las funciones dieléctricas empleadas para describir a la NP, y se discute el efecto que produce la no causalidad de una función dieléctrica en el momento lineal transferido. Se estudian las contribuciones multipolares, y las contribuciones de los campos eléctrico y magnético al momento lineal transferido, así como las contribuciones de los campos electromagnéticos producidos por el electrón y los esparcidos por la NP. A partir de las expresiones analíticas para la contribución espectral al momento lineal, se reportan resultados para el momento lineal transferido a NPs grandes, de hasta 50 nm de radio, hechas de aluminio, oro, plata, y bismuto. Finalmente, se concluye que los resultados previamente reportados que mostraban una interacción repulsiva (entre un electrón rápido y la NP), presentan un alto error numérico y/o fueron obtenidos empleando una función dieléctrica no-causal, por lo que no son físicamente aceptables.

Como se mencionó anteriormente, en la referencia [35] se aborda el problema de la interacción de electrones rápidos y nanoestructuras desde el punto de vista de mecánica cuántica, concluyendo que bajo las condiciones establecidas en la [Introducción](#) no es necesaria una descripción cuántica de la interacción. En este capítulo se muestra el enfoque de la electrodinámica clásica empleado para describir la interacción de un electrón rápido y una nanopartícula (NP) esférica. En particular, se estudia la interacción a partir del momento lineal transferido del electrón a la NP.

En este trabajo se usa el sistema internacional (SI) de unidades, a menos que se indique lo contrario.

## 2.1. Momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP esférica

El momento lineal que un electrón rápido transfiere a la NP puede ser obtenido a partir de la ecuación de conservación de momento lineal:<sup>40</sup>

$$\frac{d\vec{P}_{mec}(t)}{dt} + \frac{d\vec{P}_{EM}(t)}{dt} = \oint_S \overset{\leftrightarrow}{T}(\vec{r}; t) \cdot d\vec{a}, \quad (2.1)$$

en donde  $\vec{P}_{mec}$  es el momento lineal mecánico,  $\vec{P}_{EM}$  es el momento lineal asociado a los campos electromagnéticos,  $S$  es una superficie que encierra a la NP, y  $\overset{\leftrightarrow}{T}$  es el tensor de esfuerzos de Maxwell, dado por<sup>40</sup>

$$\begin{aligned} \overset{\leftrightarrow}{T}(\vec{r}; t) = & \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}; t) \vec{E}(\vec{r}; t) - \frac{\epsilon_0}{2} \overset{\leftrightarrow}{I} \vec{E}(\vec{r}; t) \cdot \vec{E}(\vec{r}; t) \\ & + \mu_0 \vec{H}(\vec{r}; t) \vec{H}(\vec{r}; t) - \frac{\mu_0}{2} \overset{\leftrightarrow}{I} \vec{H}(\vec{r}; t) \cdot \vec{H}(\vec{r}; t), \end{aligned} \quad (2.2)$$

con  $\overset{\leftrightarrow}{I}$  el tensor identidad. Los campos eléctrico y magnético,  $\vec{E}(\vec{r}; t)$  y  $\vec{H}(\vec{r}; t)$  en la Ec. (2.2), son los campos electromagnéticos totales, dados por

$$\vec{E}(\vec{r}; t) = \vec{E}^{scat}(\vec{r}; t) + \vec{E}^{ext}(\vec{r}; t), \quad (2.3)$$

$$\vec{H}(\vec{r}; t) = \vec{H}^{scat}(\vec{r}; t) + \vec{H}^{ext}(\vec{r}; t), \quad (2.4)$$

con  $\vec{E}^{scat}$  y  $\vec{H}^{scat}$  los campos electromagnéticos esparcidos por la NP, y  $\vec{E}^{ext}$  y  $\vec{H}^{ext}$  los campos electromagnéticos externos (es decir los producidos por el electrón rápido). El momento lineal de los

campos electromagnéticos es<sup>40</sup>

$$\Delta \vec{P}_{EM}(t) = \varepsilon_0 \mu_0 \int_V \vec{E}(\vec{r}; t) \times \vec{H}(\vec{r}; t) d^3 r, \quad (2.5)$$

con  $V$  el volumen encerrado por la superficie  $S$ .

El momento lineal  $\Delta \vec{P}$  que el electrón rápido transfiere a la NP se obtiene integrando la fuerza que la NP experimenta  $[d\vec{P}_{mec}(t)/dt]$ , dada por la Ec. (2.1)] sobre el tiempo total de interacción:

$$\Delta \vec{P} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \vec{P}_{mech}(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \vec{T}(\vec{r}; t) \cdot d\vec{a} dt - \vec{P}_{EM}(t) \Big|_{t=-\infty}^{t=+\infty}. \quad (2.6)$$

Por simplicidad, en este trabajo se considera que  $S$  es una esfera centrada en el origen y que no interseca la trayectoria del electrón rápido. Es importante notar que, cuando el electrón rápido se encuentra lejos de la NP a  $t = -\infty$ , los campos electromagnéticos dentro de  $V$  son cero, por lo que el momento lineal asociado a los campos electromagnéticos satisface  $\vec{P}_{EM}(t = -\infty) = \vec{0}$ . Similarmente, a  $t = +\infty$  el electrón rápido está lejos de la NP y los campos electromagnéticos externos dentro de  $V$  nuevamente son cero. Además, debido a procesos disipativos, los campos electromagnéticos inducidos por la NP dentro de  $V$  también son cero. Por lo que los campos electromagnéticos totales dentro de  $V$  a  $t = +\infty$  son cero, y  $\vec{P}_{EM}(t = +\infty) = \vec{0}$ . Entonces, la Ec. (2.6) puede ser escrita como

$$\Delta \vec{P} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dt} \vec{P}_{mech}(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \vec{T}(\vec{r}; t) \cdot d\vec{a} dt. \quad (2.7)$$

Mediante una transformada de Fourier del espacio de tiempo al espacio de frecuencias es posible expresar los campos electromagnéticos en función de la frecuencia. Dado que los campos electromagnéticos en función del tiempo son funciones reales, cumplen que  $\vec{E}^*(\vec{r}; \omega) = \vec{E}(\vec{r}; -\omega)$  y  $\vec{H}^*(\vec{r}; \omega) = \vec{H}(\vec{r}; -\omega)$ , y además cumplen que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \vec{E}(\vec{r}; \omega) \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) d\omega = 2 \int_0^{\infty} \text{Re} \left[ \vec{E}(\vec{r}; \omega) \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) \right] d\omega, \quad (2.8)$$

y

$$\int_{-\infty}^{\infty} \vec{H}(\vec{r}; \omega) \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) d\omega = 2 \int_0^{\infty} \text{Re} \left[ \vec{H}(\vec{r}; \omega) \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) \right] d\omega. \quad (2.9)$$

Sustituyendo  $\vec{E}(\vec{r}; t)$  por  $\vec{E}(\vec{r}; \omega)$  y  $\vec{H}(\vec{r}; t)$  por  $\vec{H}(\vec{r}; \omega)$  en la Ec. (2.7), y empleando las Ecs. (2.8) y (2.9), se obtiene que el momento lineal transferido del electrón rápido a la NP es<sup>25,26</sup>

$$\Delta \vec{P} = \int_0^{\infty} \vec{\mathcal{P}}(\omega) d\omega, \quad (2.10)$$

en donde  $\vec{\mathcal{P}}$  se define como la contribución espectral al momento lineal transferido, dada por

$$\vec{\mathcal{P}}(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_S \vec{T}(\vec{r}; \omega) \cdot d\vec{a}, \quad (2.11)$$

con el tensor  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}$  dado por

$$\begin{aligned} \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}(\vec{r}; \omega) = \text{Re} \left[ \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}; \omega) \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{\varepsilon_0}{2} \overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}} \vec{E}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) \right. \\ \left. + \mu_0 \vec{H}(\vec{r}; \omega) \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{\mu_0}{2} \overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}} \vec{H}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) \right]. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Es interesante notar que la contribución espectral al momento lineal, dada por la Ec (2.11), se puede separar en sus contribuciones eléctrica y magnética:

$$\vec{\mathcal{P}}(\omega) = \frac{1}{\pi} \oint_S \left[ \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{E}}(\vec{r}; \omega) + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{H}}(\vec{r}; \omega) \right] \cdot d\vec{a}. \quad (2.13)$$

con

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{E}}(\vec{r}; \omega) = \text{Re} \left[ \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r}; \omega) \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{\varepsilon_0}{2} \overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}} \vec{E}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) \right], \quad (2.14)$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{H}}(\vec{r}; \omega) = \text{Re} \left[ \mu_0 \vec{H}(\vec{r}; \omega) \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{\mu_0}{2} \overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}} \vec{H}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{H}^*(\vec{r}; \omega) \right]. \quad (2.15)$$

Denotando a  $R$  como el radio de la superficie esférica de integración  $S$  y a  $\hat{r}$  como el vector unitario en la dirección radial, es posible expresar la componente de  $\vec{\mathcal{P}}$  a lo largo de  $\hat{n}$  de la siguiente manera:

$$\mathcal{P}_n(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \oint_S \left[ \hat{n} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{E}}(\vec{r}; \omega) \cdot \hat{r} + \hat{n} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{H}}(\vec{r}; \omega) \cdot \hat{r} \right] d\Omega, \quad (2.16)$$

con  $\Omega$  el ángulo sólido. De manera explícita, a partir de la Ec. (2.3), la componente eléctrica del tensor de esfuerzos puede ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{E}} &= \varepsilon_0 \text{Re} \left[ \vec{E}(\vec{r}; \omega) \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} \vec{E}(\vec{r}; \omega) \cdot \vec{E}^*(\vec{r}; \omega) \right] \\ &= \varepsilon_0 \text{Re} \left[ (\vec{E}^{\text{scat}} + \vec{E}^{\text{ext}}) (\vec{E}^{\text{scat}*} + \vec{E}^{\text{ext}*}) - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} (\vec{E}^{\text{scat}} + \vec{E}^{\text{ext}}) \cdot (\vec{E}^{\text{scat}*} + \vec{E}^{\text{ext}*}) \right] \\ &= \varepsilon_0 \text{Re} \left[ (\vec{E}^{\text{scat}} \vec{E}^{\text{scat}*} + \vec{E}^{\text{scat}} \vec{E}^{\text{ext}*} + \vec{E}^{\text{ext}} \vec{E}^{\text{scat}*} + \vec{E}^{\text{ext}} \vec{E}^{\text{ext}*}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} (\vec{E}^{\text{scat}} \cdot \vec{E}^{\text{scat}*} + \vec{E}^{\text{scat}} \cdot \vec{E}^{\text{ext}*} + \vec{E}^{\text{ext}} \cdot \vec{E}^{\text{scat}*} + \vec{E}^{\text{ext}} \cdot \vec{E}^{\text{ext}*}) \right]. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Entonces es posible expresar la contribución de los campos eléctricos al tensor de esfuerzos como

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}^{\text{E}} = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ss}^{\text{E}} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{int}^{\text{E}} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ee}^{\text{E}}, \quad (2.18)$$

en donde

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ss}^{\text{E}} = \varepsilon_0 \text{Re} \left[ \varepsilon_0 \vec{E}^{\text{scat}} \vec{E}^{\text{scat}*} - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} \vec{E}^{\text{scat}} \cdot \vec{E}^{\text{scat}*} \right], \quad (2.19)$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ee}^{\text{E}} = \varepsilon_0 \text{Re} \left[ \vec{E}^{\text{ext}} \vec{E}^{\text{ext}*} - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} \vec{E}^{\text{ext}} \cdot \vec{E}^{\text{ext}*} \right], \quad (2.20)$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{int}^{\text{E}} = \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{se}^{\text{E}} + \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{es}^{\text{E}}, \quad (2.21)$$

con

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{es}^E = \varepsilon_0 \operatorname{Re} \left[ \vec{E}^{\text{ext}} \vec{E}^{\text{scat}*} - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} \vec{E}^{\text{ext}} \cdot \vec{E}^{\text{scat}*} \right], \quad (2.22)$$

$$\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{se}^E = \varepsilon_0 \operatorname{Re} \left[ \vec{E}^{\text{scat}} \vec{E}^{\text{ext}*} - \frac{\overset{\leftrightarrow}{\mathbb{I}}}{2} \vec{E}^{\text{scat}} \cdot \vec{E}^{\text{ext}*} \right]. \quad (2.23)$$

Análogamente, al remplazar  $\varepsilon_0 \rightarrow \mu_0$  y  $\vec{E} \rightarrow \vec{H}$  en las Ecs. (2.19) a (2.21), se obtienen las contribuciones de los campos magnéticos al tensor  $\mathcal{T}$ .

Es importante mencionar que, la componente  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{int}$  [ver Ec. (2.21)] está relacionada con la interacción del campo electromagnético del electrón con las cargas y corrientes inducidas en la NP. Anteriormente se mostró que la componente  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ee}$  no contribuye al momento total transferido,<sup>39</sup> por lo que no será considerada en los cálculos mostrados en las siguientes secciones. También es interesante notar que la componente  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ss}$ , al depender únicamente de los campos esparcidos por la NP, está relacionada con la interacción de la NP consigo misma, referida por algunos autores como autofuerza o reacción de radiación.<sup>40</sup>

Hasta este punto se han presentado las expresiones generales para el cálculo del momento lineal transferido de un electrón rápido a una NP. Sin embargo, aun es necesario obtener expresiones para los campos electromagnéticos totales en función de la frecuencia que aparecen en la Ec. (2.12). En las siguientes secciones, se presentan las expresiones analíticas de los campos electromagnéticos externos (producidos por el electrón) y de los esparcidos por la NP.

## 2.2. Campo electromagnético del electrón rápido

El campo electromagnético externo producido por un electrón rápido, considerado como una partícula puntual de carga  $-e$  viajando a velocidad  $\vec{v}$  constante a lo largo del eje  $z$  [ver Fig. 2.1], se puede obtener mediante una transformación de Lorentz de un sistema de referencia en el que el electrón se encuentra en reposo, a un sistema de referencia en el que el electrón que se mueve a velocidad constante  $\vec{v}$ , obteniendo:<sup>40</sup>

$$\vec{E}^{\text{ext}}(x, y, z; t) = \frac{-e}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\gamma [(x-b)\hat{x} + y\hat{y} + (z-vt)\hat{z}]}{[(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2]^{3/2}}, \quad (2.24)$$

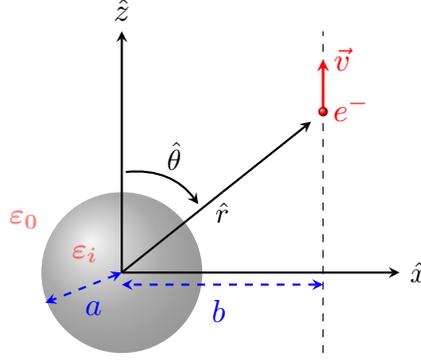
$$\vec{H}^{\text{ext}}(x, y, z; t) = \frac{-e}{4\pi} \frac{\gamma v [(x-b)\hat{y} - y\hat{x}]}{[(x-b)^2 + y^2 + \gamma^2(z-vt)^2]^{3/2}}, \quad (2.25)$$

en donde  $\gamma = [1 - \beta^2]^{-1/2}$ , con  $\beta = v/c$ . Mediante una transformada de Fourier del espacio de tiempo al espacio de frecuencias de las Ecs. (2.24) y (2.25), se obtienen los campos eléctrico y magnético externos en función de la frecuencia:<sup>49</sup>

$$\vec{E}^{\text{ext}}(\vec{r}; \omega) = -\frac{2e\omega}{v^2\gamma} e^{i\omega(z/v)} \left\{ \frac{\operatorname{sign}(\omega)}{R_x} K_1 \left( \frac{|\omega|R_x}{v\gamma} \right) [(x-b)\hat{x} + y\hat{y}] - \frac{i}{\gamma} K_0 \left( \frac{|\omega|R_x}{v\gamma} \right) \hat{z} \right\}, \quad (2.26)$$

$$\vec{H}^{\text{ext}}(\vec{r}; \omega) = \frac{2e\beta}{R_x v^2 \gamma} |\omega| e^{i\omega(z/v)} K_1 \left( \frac{|\omega|R_x}{v\gamma} \right) [y\hat{x} - (x-b)\hat{y}], \quad (2.27)$$

con  $K_1(x)$  y  $K_2(x)$  las funciones modificadas de Bessel del segundo tipo y de orden 1 y 2, respectivamente, y  $R_x = \sqrt{(x-b)^2 + y^2}$ .



**Figura 2.1:** Nanopartícula (esfera gris) de radio  $a$  con una función dieléctrica  $\varepsilon_i$  y embebida en el vacío. La nanopartícula interactúa con un electrón rápido (punto rojo) viajando a velocidad constante  $\vec{v}$  (eje  $z$ ) y con un parámetro de impacto  $b$ . Se muestran los vectores unitarios de la base esférica  $\hat{r}$  y  $\hat{\theta}$ .

Las Ecs. (2.26) y (2.27) son expresiones generales cerradas para los campos eléctrico y magnético externos en función de la frecuencia, con una simetría cilíndrica. Sin embargo, para el cálculo del momento lineal transferido del electrón a la NP, es necesario obtener expresiones para los campos esparcidos por la NP, que tienen simetría esférica. Por tanto, es conveniente escribir al campo electromagnético externo en la representación de coordenadas esféricas centradas en la NP. En la Fig. 2.1 se muestra la base esférica que resulta natural para estudiar el esparcimiento de la NP.

El campo eléctrico producido por el electrón rápido también puede ser obtenido a partir de la función de Green dependiente del tiempo: <sup>33,39,49</sup>

$$\vec{E}^{\text{ext}}(\vec{r}) = \left( \nabla - \frac{ik\vec{v}}{c} \right) \int dt e^{i\omega t} G_0(\vec{r} - \vec{r}_t), \quad (2.28)$$

en donde la función de Green  $G_0$  está dada por <sup>33</sup>

$$G_0(\vec{r} - \vec{r}_t) = \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}_t|}}{|\vec{r} - \vec{r}_t|}, \quad (2.29)$$

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  $t$ . Por un lado, mediante una transformada de Fourier del espacio de tiempo al espacio de frecuencias, y dado que en este problema la posición del electrón rápido es  $\vec{r}_t = b\hat{x} + vt\hat{z}$ , se tiene que <sup>40,49</sup>

$$\int dt e^{i\omega t} \frac{e^{ik|\vec{r} - (b, 0, vt)|}}{|\vec{r} - (b, 0, vt)|} = \frac{2}{v} K_0 \left( \frac{\omega}{v\gamma} \sqrt{(x-b)^2 + y^2} \right) e^{i\omega z/v}. \quad (2.30)$$

Sustituyendo la Ec. (2.30) en la Ec. (2.28), se obtiene

$$\vec{E}^{\text{ext}}(\vec{r}) = \left( \nabla - \frac{ik\vec{v}}{c} \right) \left[ \frac{2}{v} K_0 \left( \frac{\omega}{v\gamma} \sqrt{(x-b)^2 + y^2} \right) e^{i\omega z/v} \right], \quad (2.31)$$

a partir de donde el campo eléctrico externo puede ser expresado como se muestra en la Ec. (2.26). A partir de la ley de Faraday-Lenz y de la Ec. (2.26), se obtiene el campo magnético externo dado en la Ec. (2.27).

La función de Green en términos de la base esférica mostrada en la Fig. 2.1, está dada por<sup>33</sup>

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}_t) = 4\pi k \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(k r) h_{\ell}^{(+)}(k r_t) Y_{\ell,m}(\Omega_r) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}), \quad (2.32)$$

en donde  $h_{\ell}^{(+)}(x) = i h_{\ell}^{(1)}(x)$  es la función de Hankel esférica de orden  $\ell$ .<sup>50</sup> Sustituyendo la Ec. (2.32) en la Ec. (2.28), se obtiene

$$\vec{E}^{\text{ext}}(\vec{r}) = \left( \nabla - \frac{ik\vec{v}}{c} \right) \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(k r) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \phi_{\ell,m}, \quad (2.33)$$

con

$$\phi_{\ell,m} = 4\pi k \int dt e^{i\omega t} h_{\ell}^{(+)}(k r_t) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}). \quad (2.34)$$

En el Apéndice A se muestran los detalles del cálculo de la Ec. (2.34). Es importante mencionar que, como se muestra en el Apéndice A, es posible obtener expresiones para el campo electromagnético externo en representación multipolar esférica:

$$\vec{E}^{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \mathcal{E}_{\ell,m}^{er} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{e\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{e\phi} \hat{\phi}, \quad (2.35)$$

$$\vec{H}^{\text{ext}} = \sum_{\ell,m} \mathcal{H}_{\ell,m}^{er} \hat{r} + \mathcal{H}_{\ell,m}^{e\theta} \hat{\theta} + \mathcal{H}_{\ell,m}^{e\phi} \hat{\phi}, \quad (2.36)$$

con

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{er} = e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{j_{\ell}(k_0 r)}{k_0 r}, \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\ell,m}^{e\theta} = & -e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(k_0 r) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \right. \\ & \left. \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[ (\ell+1) \frac{j_{\ell}(k_0 r)}{k_0 r} - j_{\ell+1}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\ell,m}^{e\phi} = & ie^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} j_{\ell}(k_0 r) \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) + \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \\ & + ie^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \left[ (\ell+1) \frac{j_{\ell}(k_0 r)}{k_0 r} - j_{\ell+1}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (2.39)$$

y

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{er} = e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{j_{\ell}(k_0 r)}{k_0 r}, \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{e\theta} = & e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin\theta} j_{\ell}(k_0 r) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \right. \\ & \left. \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[ (\ell+1) \frac{j_{\ell}(k_0 r)}{k_0 r} - j_{\ell+1}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{e\phi} = & i e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{ext}} \frac{m}{\sin \theta} P_{\ell}^m(\cos \theta) \left[ (\ell + 1) \frac{j_{\ell}(k_0 r)}{k_0 r} - j_{\ell+1}(k_0 r) \right] \\ & - i e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{ext}} j_{\ell}(k_0 r) \left[ (\ell + 1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_{\ell}^m(\cos \theta) - \frac{(\ell - m + 1)}{\sin \theta} P_{\ell+1}^m(\cos \theta) \right], \end{aligned} \quad (2.42)$$

en donde  $j_{\ell}$  es la función esférica de Bessel de orden  $\ell$ ,  $P_{\ell}^m$  son las funciones asociadas de Legendre,<sup>50</sup> y los coeficientes escalares externos están dados como

$$C_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \quad (2.43)$$

$$D_{\ell,m}^{\text{ext}} = i^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \quad (2.44)$$

con los potenciales escalares externos,  $\psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}$  y  $\psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}$ , definidos en el Apéndice A.

### 2.3. Campo electromagnético esparcido por la nanopartícula

Los campos electromagnéticos totales satisfacen la ecuación de Helmholtz sin fuentes (ver Apéndice A para los detalles):

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{E} = 0, \quad (2.45)$$

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{H} = 0, \quad (2.46)$$

con  $k = \omega/c$  la magnitud del vector de onda en el vacío. La solución a las ecuaciones de Helmholtz, Ecs. (2.45) y (2.46), se puede escribir en términos de funciones escalares como<sup>53</sup>

$$\vec{E} = \nabla \psi^{\text{L}} + \vec{L} \psi^{\text{M}} - \frac{i}{k} \nabla \times \vec{L} \psi^{\text{E}}, \quad (2.47)$$

$$\vec{H} = -\frac{i}{k} \nabla \times \vec{L} \psi^{\text{M}} - \vec{L} \psi^{\text{E}}, \quad (2.48)$$

en donde  $\vec{L} = -i \vec{r} \times \nabla$  es el operador de momento angular orbital. Las funciones escalares  $\psi^{\text{L}}$ ,  $\psi^{\text{E}}$ , y  $\psi^{\text{M}}$ , satisfacen la ecuación escalar de Helmholtz sin fuentes, dada por

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = 0. \quad (2.49)$$

Para medios con simetría esférica, las condiciones de frontera se reducen a la continuidad de  $\psi^{\text{M}}$ ,  $\varepsilon \psi^{\text{E}}$ ,  $\partial \psi^{\text{M}} / \partial r$ , y  $(1 + r \partial / \partial r) \psi^{\text{E}}$ .<sup>33,52</sup>

Es importante notar que los campos electromagnéticos externos no son campos de radiación, por lo que pueden ser expresados como una superposición de ondas planas con vector de onda  $\vec{k}$  perpendicular a los campos eléctrico y magnético. Por lo tanto, la función escalar  $\psi^{\text{L}}$  no aparece en la solución a la Ecs. de Helmholtz (2.45) y (2.46). Las funciones escalares  $\psi^{\text{E,ext}}$  y  $\psi^{\text{M,ext}}$  pueden ser

expresadas en términos de la base esférica mostrada en la Fig. 2.1, como

$$\psi^{\text{E,ext}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (i)^{\ell} h_{\ell}^{(+)}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \quad (2.50)$$

$$\psi^{\text{M,ext}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (i)^{\ell} h_{\ell}^{(+)}(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \quad (2.51)$$

en donde  $h_{\ell}^{(+)}(x) = i h_{\ell}^{(1)}(x)$  es la función de Hankel esférica y  $Y_{\ell,m}$  son los armónicos esféricos.<sup>50,54</sup> Aplicando las condiciones a la frontera mencionadas anteriormente, se obtiene que la relación entre los coeficientes de las funciones escalares esparcidas,  $\psi_{\ell,m}^{\text{(E,M),scat}}$ , y externas,  $\psi_{\ell,m}^{\text{(E,M),ext}}$ , está dada por la matriz de esparcimiento (ver apéndice A):<sup>33,52</sup>

$$\psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}} = t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \quad (2.52)$$

$$\psi_{\ell,m}^{\text{M,scat}} = t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}. \quad (2.53)$$

Para esferas homogéneas, los coeficientes de proporcionalidad en las Ecs. (2.52) y (2.53) se reducen al resultado familiar de la solución de Mie:<sup>41</sup>

$$t_{\ell}^{\text{E}} = \frac{-j_{\ell}(x_0) [x_i j_{\ell}(x_i)]' + \epsilon_i j_{\ell}(x_i) [x_0 j_{\ell}(x_0)]'}{h_{\ell}^{(+)}(x_0) [x_i j_{\ell}(x_i)]' - \epsilon_i j_{\ell}(x_i) [x_0 h_{\ell}^{(+)}(x_0)]'}, \quad (2.54)$$

$$t_{\ell}^{\text{M}} = \frac{-x_i j_{\ell}(x_0) j_{\ell}'(x_i) + x_0 j_{\ell}'(x_0) j_{\ell}(x_i)}{x_i h_{\ell}^{(+)}(x_0) j_{\ell}'(x_i) - x_0 h_{\ell}^{(+)}(x_0) j_{\ell}(x_i)}, \quad (2.55)$$

en donde  $j_{\ell}$  es la función de Bessel esférica,  $x_0 = ka$  y  $x_i = ka\sqrt{\epsilon_i}$ , con  $a$  el radio de la NP y  $\epsilon_i$  su permitividad eléctrica. La prima en las Ecs. (2.54) y (2.55) denota derivada de la función respecto a su argumento. Sustituyendo los potenciales escalares [Ecs. (2.52) y (2.53)] en la expresión para el campo electromagnético esparcido por la NP [Ecs. (2.47) y (2.48)], se obtiene:

$$\vec{E}^{\text{scat}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{E}_{\ell,m}^{sr} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{s\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell,m}^{s\phi} \hat{\phi}, \quad (2.56)$$

con

$$\mathcal{E}_{\ell,m}^{sr} = e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r}, \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\ell,m}^{s\theta} = & -e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{(+)}(k_0 r) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \right. \\ & \left. - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[ (\ell+1) \frac{h_{\ell}^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{\ell+1}^{(+)}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\ell,m}^{s\phi} = & ie^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} h_{\ell}^{(+)}(k_0 r) \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \\ & + ie^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \left[ (\ell+1) \frac{h_{\ell}^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{\ell+1}^{(+)}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (2.59)$$

mientras que el campo magnético esparcido por la NP es

$$\vec{H}^{\text{scat}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \mathcal{H}_{\ell,m}^{sr} \hat{r} + \mathcal{H}_{\ell,m}^{s\theta} \hat{\theta} + \mathcal{H}_{\ell,m}^{s\phi} \hat{\phi}, \quad (2.60)$$

con

$$\mathcal{H}_{\ell,m}^{sr} = e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \ell(\ell+1) P_{\ell}^m(\cos\theta) \frac{h_{\ell}^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r}, \quad (2.61)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{s\theta} = & e^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} h_{\ell}^{(+)}(k_0 r) P_{\ell}^m(\cos\theta) - e^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \right. \\ & \left. - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right] \left[ (\ell+1) \frac{h_{\ell}^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{\ell+1}^{(+)}(k_0 r) \right], \end{aligned} \quad (2.62)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\ell,m}^{s\phi} = & ie^{im\phi} C_{\ell,m}^{\text{scat}} \frac{m}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) \left[ (\ell+1) \frac{h_{\ell}^{(+)}(k_0 r)}{k_0 r} - h_{\ell+1}^{(+)}(k_0 r) \right] \\ & - ie^{im\phi} D_{\ell,m}^{\text{scat}} h_{\ell}^{(+)}(k_0 r) \left[ (\ell+1) \frac{\cos\theta}{\sin\theta} P_{\ell}^m(\cos\theta) - \frac{(\ell-m+1)}{\sin\theta} P_{\ell+1}^m(\cos\theta) \right], \end{aligned} \quad (2.63)$$

en donde los coeficientes  $C^{\text{scat}}$  y  $D^{\text{scat}}$  están dados por

$$C_{\ell,m}^{\text{scat}} = (i)^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}}, \quad (2.64)$$

$$D_{\ell,m}^{\text{scat}} = (i)^{\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}. \quad (2.65)$$

Una vez que se conocen los campos electromagnéticos externos y esparcidos, es posible construir el tensor de esfuerzos  $\vec{T}$ , dado por la Ec. (2.12). La componente  $\hat{n}$  de la contribución espectral al momento lineal transferido del electrón a la NP, está dada por la integral de superficie cerrada [Ec. (2.16)]:

$$\mathcal{P}_n(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \oint_S \hat{n} \cdot \vec{T} \cdot \hat{r} d\Omega,$$

con  $\hat{n}$  cualquiera de los vectores unitarios de la base cartesiana.

A continuación se presentan dos enfoques para el cálculo de la integral de superficie cerrada:

- **Cálculo analítico:** al usar la expresión multipolar esférica del campo externo [Ecs. (2.35) y (2.36)] es posible calcular de forma analítica la integral de superficie cerrada, y obtener expresiones analíticas para la contribución espectral al momento lineal. Sin embargo, este

método presenta una desventaja: el campo del electrón, el cual tiene simetría cilíndrica, al ser expandido en representación multipolar esférica, converge de forma no trivial.

- **Cálculo numérico:** consiste en usar la forma cartesiana del campo externo [Ecs. (2.26) y (2.27)]. Sin embargo, esto conduce a expresiones que dependen de integrales que no han podido ser resueltas de manera analítica, por lo que es necesario resolverlas de forma numérica. A pesar de que este método no permite tener expresiones analíticas para el momento transferido y es mucho más lento desde el punto de vista numérico, permite una comparación directa con resultados reportados en estudios previos.

## 2.4. Expresiones analíticas de la contribución espectral al momento lineal

Para calcular el momento lineal transferido del electrón rápido a la NP, es conveniente escribir de forma explícita cada uno de los productos  $\hat{n} \cdot \overleftrightarrow{\mathcal{T}} \cdot \hat{r}$  que aparecen en la Ec. (2.16). En particular, sustituyendo en la Ec. (2.23) la representación multipolar de los campos eléctricos externo y esparcido [Ecs. (2.35) y (2.56)], se obtiene

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathcal{T}}_{se}^E \cdot \hat{r} &= \varepsilon_0 \operatorname{Re} \left[ \vec{E}^{\text{scat}} (\vec{E}^{\text{ext}*} \cdot \hat{r}) - \frac{1}{2} (\vec{E}^{\text{scat}} \cdot \vec{E}^{\text{ext}*}) \hat{r} \right] \\ &= \varepsilon_0 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \operatorname{Re} \left[ \mathcal{E}_{l'm'}^{er*} (\mathcal{E}_{lm}^{sr} \hat{r} + \mathcal{E}_{lm}^{s\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{lm}^{s\phi} \hat{\phi}) - \frac{1}{2} (\mathcal{E}_{lm}^{sr} \mathcal{E}_{l'm'}^{er*} + \mathcal{E}_{lm}^{s\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{e\theta*} + \mathcal{E}_{lm}^{s\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{e\phi*}) \hat{r} \right]. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Para las demás componentes del tensor de esfuerzos [ver Ecs. (2.19) a (2.23)], se puede escribir en forma general

$$\overleftrightarrow{\mathcal{T}}_{ba}^E \cdot \hat{r} = \varepsilon_0 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \operatorname{Re} \left[ \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} (\mathcal{E}_{lm}^{br} \hat{r} + \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \hat{\phi}) - \frac{1}{2} (\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} + \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\theta*} + \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*}) \hat{r} \right], \quad (2.67)$$

en donde los índices  $a$  y  $b$  indican la componente del tensor de esfuerzos que está siendo considerada. Al remplazar  $a, b$  por  $s$  se obtienen las expresiones para el campo eléctrico esparcido, y al remplazar  $a, b$  por  $e$  se obtienen las expresiones para el campo eléctrico externo. Es relevante notar que únicamente la parte real de la Ec. (2.67) contribuye al momento lineal transferido [ver Ecs. (2.14) y (2.15)].

La transformación de la base Cartesiana a la base esférica (mostrada en la Fig. 2.1) está dada por

$$\begin{pmatrix} \hat{r} \\ \hat{\theta} \\ \hat{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix}. \quad (2.68)$$

Expresando al vector  $\overleftrightarrow{\mathcal{T}} \cdot \hat{r}$  en términos de los vectores unitarios cartesianos, a través de la transfor-

mación de la Ec. (2.68), se obtiene

$$\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^E \cdot \hat{r} = \varepsilon_0 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{2} (\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} - \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\theta*} - \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*}) \sin \theta \cos \phi + \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \cos \theta \cos \phi - \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \sin \phi \right], \quad (2.69)$$

$$\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^E \cdot \hat{r} = \varepsilon_0 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{2} (\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} - \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\theta*} - \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*}) \sin \theta \sin \phi + \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \cos \theta \sin \phi + \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \cos \phi \right], \quad (2.70)$$

$$\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^E \cdot \hat{r} = \varepsilon_0 \sum_{l,m} \sum_{l',m'} \operatorname{Re} \left[ \frac{1}{2} (\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} - \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\theta*} - \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*}) \cos \theta - \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \sin \theta \right]. \quad (2.71)$$

Es relevante resaltar que la contribución de los campos magnéticos al tensor de esfuerzos,  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}} \cdot \hat{r}$ , se obtiene al remplazar  $\varepsilon_0$  por  $\mu_0$ , y  $\mathcal{E}_{lm}$  por  $\mathcal{H}_{lm}$  en las Ecs. (2.69) a (2.71), con  $\mathcal{H}_{lm}$  las componentes del campo magnético [Ecs. (2.40) a (2.42) para el campo magnético externo y Ecs. (2.61) a (2.63) para el campo magnético esparcido].

Para calcular la contribución espectral al momento lineal,  $\vec{\mathcal{P}}(\omega)$ , a lo largo del vector unitario  $\hat{n}$ , es necesario realizar la integral de superficie dada por la Ec. (2.16). El término  $\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*}$  del vector  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^E \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] puede ser expresado como

$$\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} = D_{lm}^b D_{lm}^{a*} l l' (l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} e^{i(m-m')\phi} P_l^m P_{l'}^{m'}, \quad (2.72)$$

en donde  $a$  y  $b$  indican la elección arbitraria de componentes del campo esparcido (denotado por  $s$ ) o del externo (denotado por  $e$ ), mientras que  $Z_l^s \rightarrow h_l^+(k_0 r)$  para el campo esparcido y  $Z_l^e \rightarrow j_l(k_0 r)$  para el campo externo.

Dependiendo de la componente a lo largo de  $\hat{n}$  del tensor que se desee escribir, es necesario expresar la integral de cada uno de los términos que componen a  $\hat{n} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}} \cdot \hat{r}$ . Para la componente a lo largo de  $x$  [Ec. (2.69)], se tiene que

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \sin \theta \cos \phi d\Omega = D_{lm}^b D_{lm}^{a*} l l' (l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} \pi (\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) I N_{l,l'}^{m,m'}, \quad (2.73)$$

para la componente  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^E \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)], se obtiene

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \sin \theta \sin \phi d\Omega = D_{lm}^b D_{lm}^{a*} l l' (l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} i\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) I N_{l,l'}^{m,m'}, \quad (2.74)$$

y la componente  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)] puede ser expresada como

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \cos \theta d\Omega = D_{lm}^b D_{lm}^{a*} l'(l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} 2\pi \delta_{m,m'} IM_{l,l'}^{m,m'}, \quad (2.75)$$

con  $IN_{l,l'}^{m,m'}$  y  $IM_{l,l'}^{m,m'}$  cantidades escalares definidas en el Apéndice B.

El término  $\mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] está dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} &= iC_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} l'(l'+1) e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} \right] \\ &+ i e^{i(m-m')\phi} D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) m \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \frac{P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta}, \end{aligned} \quad (2.76)$$

en donde se define:

$$f_l^a(k_0 r) = (l+1) \frac{Z_l^a(k_0 r)}{k_0 r} - Z_{l+1}^a(k_0 r), \quad (2.77)$$

con la notación para  $Z_l^a$  descrita anteriormente. Al realizar las integrales de superficie de las Ecs. (2.69) y (2.70), se tiene que la contribución de este término [Ec. (2.76)] para  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$ , [Ec. (2.69)], es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \cos \phi d\Omega &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ iC_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} l'(l'+1) \left[ (l+1) IW_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ &\left. \left. - (l-m+1) IU_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + iD_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) m \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} IU_{l,l'}^{m,m'} \right\}, \end{aligned} \quad (2.78)$$

y para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$ , [Ec. (2.70)], es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} \sin \phi d\Omega &= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ iC_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} l'(l'+1) \left[ (l+1) IW_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ &\left. \left. - (l-m+1) IU_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + iD_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) m \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} IU_{l,l'}^{m,m'} \right\}, \end{aligned} \quad (2.79)$$

con  $\delta_{m,m'}$  la delta de Kronecker, y  $IU_{l,l'}^{m,m'}$  y  $IW_{l,l'}^{m,m'}$  definidas en el Apéndice B.

El término  $\mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] puede ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*} &= -C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} m l'(l'+1) e^{i(m-m')\phi} \frac{P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} - D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \\ &\times \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} \right], \end{aligned} \quad (2.80)$$

y su contribución a la integral de superficie de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)], está dada por

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{bb\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{aa^*} \cos \theta \cos \phi d\Omega = -\pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a^*}}{k_0 r} \left[ (l+1) IV_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ \left. \left. - (l-m+1) IW_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a^*}}{k_0 r} ml'(l'+1) IW_{l,l'}^{m,m'} \right\}. \quad (2.81)$$

La contribución del término  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  a la integral de superficie cerrada [Ec. (2.70)], puede ser expresado como

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{bb\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{aa^*} \cos \theta \sin \phi d\Omega = -i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a^*}}{k_0 r} \left[ (l+1) IV_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ \left. \left. - (l-m+1) IW_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a^*}}{k_0 r} ml'(l'+1) IW_{l,l'}^{m,m'} \right\}, \quad (2.82)$$

mientras que la contribución de  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)], es

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{bb\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{aa^*} \sin \theta d\Omega = -2\pi\delta_{m,m'} \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a^*}}{k_0 r} \left[ (l+1) IM_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) \Delta_{l+1,l'} \right] \right. \\ \left. + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a^*}}{k_0 r} ml'(l'+1) \Delta_{l,l'} \right\}. \quad (2.83)$$

Los coeficientes  $IV_{l,l'}^{m,m'}$  y  $\Delta_{l,l'}$ , se muestran explícitamente en el Apéndice B.

El término  $\mathcal{E}_{lm}^{bb\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{aa^*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)], puede ser expresado como

$$\mathcal{E}_{lm}^{bb\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{aa^*} = C_{lm}^b C_{l'm'}^{a^*} mm' Z_l^b Z_{l'}^{a^*} \frac{e^{i(m-m')\phi} P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} m Z_l^b f_{l'}^{a^*} e^{i(m-m')\phi} \\ \times \left[ (l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'-m'+1) \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a^*} m' f_l^b Z_{l'}^{a^*} e^{i(m-m')\phi} \\ \times \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} f_l^b f_{l'}^{a^*} e^{i(m-m')\phi} \\ \times \left[ (l+1)(l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} - (l+1)(l'-m'+1) \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'+1) \right. \\ \left. \times (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} + (l-m+1)(l'-m'+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right]. \quad (2.84)$$

La contribución de este término [Ec. (2.84)] a la integral de superficie de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{bb\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{aa^*} \sin \theta \cos \phi d\Omega = \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a^*} mm' Z_l^b Z_{l'}^{a^*} IU_{l,l'}^{m,m'} \right. \\ \left. + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a^*} m Z_l^b f_{l'}^{a^*} \left[ (l'+1) IW_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1) IU_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \right\} \quad (2.85)$$

$$\begin{aligned}
 & + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)IW_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1)IU_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\
 & + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1)IV_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1)IW_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\
 & \left. - (l'+1)(l-m+1)IW_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1)IU_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\},
 \end{aligned}$$

para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)] es

$$\begin{aligned}
 \oint \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\theta*} \sin \theta \sin \phi \, d\Omega &= i\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m-1,m'}) \Big\{ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m m' Z_l^b Z_{l'}^{a*} IU_{l,l'}^{m,m'} \tag{2.86} \\
 & + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l'+1)IW_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1)IU_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\
 & + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)IW_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1)IU_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\
 & + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1)IV_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1)IW_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\
 & \left. - (l'+1)(l-m+1)IW_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1)IU_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\},
 \end{aligned}$$

y para  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)] es

$$\begin{aligned}
 \oint \mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\theta*} \cos \theta \, d\Omega &= 2\pi \delta_{m,m'} \Big\{ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m m' Z_l^b Z_{l'}^{a*} IY_{l,l'}^{m,m'} \tag{2.87} \\
 & + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l'+1)IX_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1)IY_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\
 & + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)IX_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1)IY_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\
 & + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1)IZ_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1)IX_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\
 & \left. - (l'+1)(l-m+1)IX_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1)IY_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\},
 \end{aligned}$$

con  $IX_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IY_{l,l'}^{m,m'}$  y  $IZ_{l,l'}^{m,m'}$  definidas en el Apéndice B.

Finalmente el término  $\mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] es

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*} &= D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} \frac{e^{i(m-m')\phi} P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m f_l^b Z_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \tag{2.88} \\
 & \times \left[ (l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'-m'+1) \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] \\
 & + C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] \\
 & + C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1)(l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} - (l+1)(l'-m'+1) \right]
 \end{aligned}$$

$$\times \left[ \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'+1)(l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} + (l-m+1)(l'-m'+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right].$$

La contribución de este término [Ec. (2.88)] a la integral de superficie de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ab} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*} \sin \theta \cos \phi d\Omega = \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} I U_{l,l'}^{m,m'} \right. \quad (2.89)$$

$$+ D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l'+1) I W_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1) I U_{l,l'+1}^{m,m'} \right]$$

$$+ C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1) I W_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{l+1,l'}^{m,m'} \right]$$

$$+ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1) I V_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1) I W_{l,l'+1}^{m,m'} \right.$$

$$\left. - (l'+1)(l-m+1) I W_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1) I U_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \left. \right\},$$

para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)] es

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*} \sin \theta \sin \phi d\Omega = i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} I U_{l,l'}^{m,m'} \right. \quad (2.90)$$

$$+ D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l'+1) I W_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1) I U_{l,l'+1}^{m,m'} \right]$$

$$+ C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1) I W_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) I U_{l+1,l'}^{m,m'} \right]$$

$$+ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1) I V_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1) I W_{l,l'+1}^{m,m'} \right.$$

$$\left. - (l'+1)(l-m+1) I W_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1) I U_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \left. \right\},$$

y para  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)] es

$$\oint \mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{l'm'}^{a\phi*} \cos \theta d\Omega = 2\pi \delta_{m,m'} \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} I Y_{l,l'}^{m,m'} \right. \quad (2.91)$$

$$+ D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l'+1) I X_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1) I Y_{l,l'+1}^{m,m'} \right]$$

$$+ C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1) I X_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) I Y_{l+1,l'}^{m,m'} \right]$$

$$+ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1) I Z_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1) I X_{l,l'+1}^{m,m'} \right.$$

$$\left. - (l'+1)(l-m+1) I X_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1) I Y_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \left. \right\}.$$

Con las expresiones para las integrales presentadas en esta sección, se tiene de forma completa una representación analítica de la contribución espectral al momento lineal transferido. Por completez, las expresiones analíticas de la parte magnética,  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}} \cdot \hat{r}$ , se muestran en el Apéndice C.

## 2.5. Cálculo numérico de la contribución espectral al momento lineal

Con el fin de comparar directamente con resultados de estudios previos<sup>26–28</sup> y resultados obtenidos a partir de las expresiones mostradas en la Sección 2.4, se necesita obtener la contribución espectral al momento lineal,  $\vec{\mathcal{P}}$ , a partir de las expresiones en coordenadas cartesianas de los campos electromagnéticos externos [Ecs. (2.26) y (2.27)]. Sin embargo, esto conduce una familia de integrales que contienen términos del tipo

$$\oint_S \frac{ye^{i(\omega z/v - m\phi)}}{\sqrt{(x-b)^2 + y^2}} K_1\left(\frac{\omega}{v\gamma} \sqrt{(x-b)^2 + y^2}\right) P_l^m(\cos\theta) \cos\theta \cos\phi d\Omega. \quad (2.92)$$

Estas integrales no han podido ser resueltas de forma analítica. En esta sección, se describen los métodos empleados para obtener numéricamente la contribución espectral al momento lineal,  $\vec{\mathcal{P}}$ .

Como se mencionó en la [Introducción](#), se ha reportado que la NP puede ser atraída o repelida de la trayectoria del electrón rápido<sup>25–28</sup>. En particular, la información de la posible atracción o repulsión está contenida en la componente transversal (eje  $x$ , ver Fig. 1) del momento lineal transferido,  $\Delta P_{\perp}$ . Por esta razón, a continuación se muestra únicamente el método numérico empleado para obtener  $\mathcal{P}_{\perp}$ . Al igual que en la referencia [26], se considera una NP de aluminio de radio  $a = 1$  nm caracterizada por una función dieléctrica dada por el modelo de Drude, con una frecuencia de plasma de  $\hbar\omega_p = 15.1$  eV y un parámetro de amortiguamiento de  $\hbar\Gamma = 0.15$  eV.

En el estudio previo de la referencia [26],  $\vec{\mathcal{P}}$  fue calculado numéricamente usando una regla compuesta de Simpson 3/8, esto es, una regla de Newton-Cotes (NC) de tercer orden, para la integral de superficie mostrada en la Ec. (2.16). Sin embargo, una cuadratura gaussiana converge más rápido que una regla de NC respecto al número de evaluaciones del integrando.<sup>31</sup> La cuadratura de Gauss-Kronrod (GKQ, por su siglas en inglés *Gauss-Kronrod quadrature*) se construye añadiendo  $N + 1$  puntos a una cuadratura de Gauss-Legendre de orden  $N$ , resultando en un total de  $2N + 1$  puntos. La GKQ proporciona una estimación al error por integración numérica al comparar el resultado de la integral con el resultado obtenido con la cuadratura anidada de Gauss-Legendre.<sup>31,45</sup> Por esta razón, en este trabajo se elige a la GKQ como método de integración numérica.

La superficie  $S$  en la Ec. (2.11), se elige como un cascarón esférico concéntrico a la NP y con radio  $R = a + 0.05$  nm. Considerando el sistema de coordenadas esféricas mostrado en la Fig. 2.1, es posible expresar a la contribución espectral al momento lineal como

$$\vec{\mathcal{P}}(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}(R, \theta, \phi; \omega) \cdot \hat{r} \sin\theta d\theta d\phi. \quad (2.93)$$

Esta integral de superficie cerrada se calcula numéricamente usando GKQ. Se definen a  $g_j$  y  $\theta_j$  como los pesos y nodos para la integración en  $\theta$ , y  $g_k$  y  $\phi_k$  como los pesos y nodos para la integración en  $\phi$ . En particular, la componente transversal de la contribución espectral al momento lineal está

dada por

$$\mathcal{P}_\perp(\omega) = \frac{R^2}{\pi} \sum_{k=1}^{N_\phi} \sum_{j=1}^{N_\theta} g_j g_k T_\perp(R, \theta_j, \phi_k; \omega) \sin \theta_j \pm \epsilon_{\mathcal{P}_\perp}(\omega), \quad (2.94)$$

en donde  $T_\perp = \hat{x} \cdot \vec{\mathcal{T}} \cdot \hat{r}$ ,  $N_\theta = 2n_\theta + 1$  y  $N_\phi = 2n_\phi + 1$ , con  $n_\theta$  y  $n_\phi$  los órdenes de las cuadraturas anidadas de Gauss-Legendre. Es importante resaltar que el error absoluto  $\epsilon_{\mathcal{P}_\perp}$  [Ec. (2.94)] es una función que depende de la frecuencia, y está dado por la diferencia entre los resultados de la integral de la GKQ y la cuadratura de Gauss-Legendre, como se mencionó anteriormente.

A continuación se calcula  $\mathcal{P}_\perp(\omega)$  para una NP de aluminio con  $a = 1$  nm usando los dos métodos de integración numérica: (i) la regla de Simpson 3/8 y (ii) la GKQ, con el fin de comparar ambos métodos. En la Tabla 2.1 se muestra el error relativo de la contribución espectral al momento lineal transversal,  $\delta\mathcal{P}_\perp = \epsilon_{\mathcal{P}_\perp}/\mathcal{P}_\perp$ , en función del número de evaluaciones  $N$  sobre la superficie  $S$ . En la Tabla 2.1  $N = 2n_{NC}^2$  es el número de evaluaciones en la superficie  $S$  para la regla de NC, con  $n_{NC}$  el número de evaluaciones para  $\theta$  y  $2n_{NC}$  el número de evaluaciones para  $\phi$ . Para  $\delta\mathcal{P}_\perp^{GKQ}$ , el número de evaluaciones no necesariamente coincide con  $N$ , por lo que se elige  $N \geq N_\theta \times N_\phi$  con  $N_\phi \geq N_\theta + 10$ . En la Tabla 2.1 se observa que la GKQ ( $\delta\mathcal{P}_\perp^{GKQ}$ ) tiene un error relativo menor que la regla de NC ( $\delta\mathcal{P}_\perp^{NC}$ ), lo que indica una convergencia numérica más rápida. Por lo que en los cálculos reportados en el capítulo siguiente, se emplea la GKQ para calcular  $\mathcal{P}_\perp$  numéricamente.

$N$	$\delta\mathcal{P}_\perp^{NC}$	$\delta\mathcal{P}_\perp^{GKQ}$
288	$6.4 \times 10^{-2}$	$2 \times 10^{-3}$
450	$1.1 \times 10^{-2}$	$5.5 \times 10^{-5}$
882	$9.7 \times 10^{-4}$	$2.5 \times 10^{-9}$
1800	$7.6 \times 10^{-5}$	$7.4 \times 10^{-12}$

**Tabla 2.1:** Error relativo de la integral de superficie cerrada [ver Ec. (2.94)] en función del número de evaluaciones  $N$  sobre la superficie  $S$ , obtenido mediante una regla de Newton-Cotes (NC) de tercer orden ( $\delta\mathcal{P}_\perp^{NC}$ ) y obtenido con una cuadratura de Gauss-Kronrod ( $\delta\mathcal{P}_\perp^{GKQ}$ ). Se considera una NP de aluminio de 1 nm de radio, un electrón rápido con  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$ , y la energía  $\hbar\omega = 8.7$  eV.

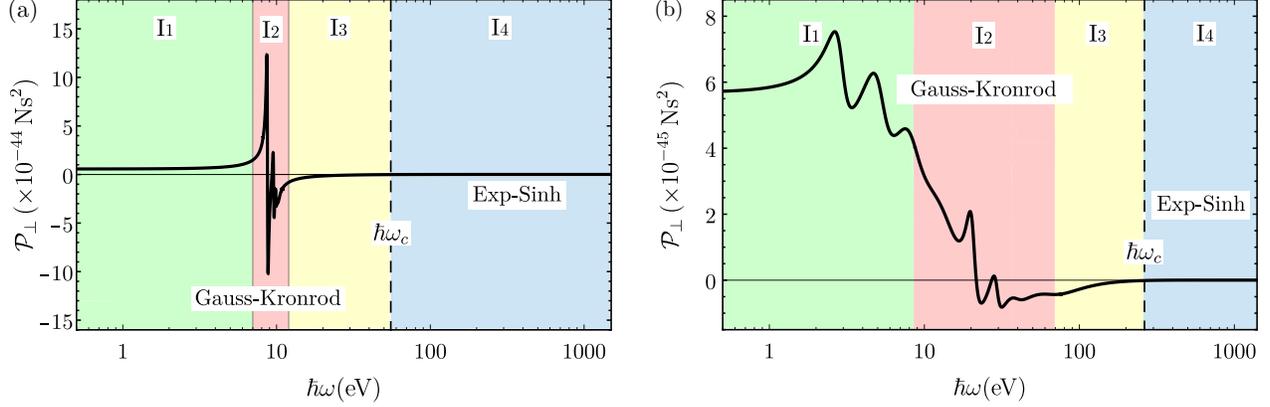
## 2.6. Integral numérica en el espacio de frecuencias

La GKQ es útil para obtener la integral de funciones sobre intervalos acotados. Para emplear la GKQ en la integral de frecuencias mostrada en la Ec. (2.10), es conveniente definir una frecuencia de corte  $\omega_c$ , de tal forma que la integral se calcula sobre el intervalo  $(0, \omega_c)$  en vez de  $(0, \infty)$ . Definiendo  $g_i$  y  $\omega_i$  como la colección de pesos y nodos de la GKQ para el intervalo  $(0, \omega_c)$ , el momento lineal transferido a la NP puede ser escrito como

$$\Delta P_\perp = \sum_i g_i \mathcal{P}_\perp(\omega_i) \pm \epsilon_{P_\perp}, \quad (2.95)$$

en donde  $\epsilon_{P_\perp}$  es el error numérico absoluto, dado por

$$\epsilon_{P_\perp} = \epsilon_{GKQ} + \omega_c \text{Max}[\epsilon_{\mathcal{P}_\perp}(\omega_i)] + \tilde{\epsilon}_{cut}, \quad (2.96)$$



**Figura 2.2:** Contribución espectral al momento lineal transversal  $\mathcal{P}_\perp(\omega)$  típica para una NP hecha de (a) aluminio y (b) oro. El espacio de frecuencias se separa en cuatro regiones denotadas con colores: verde, rojo, amarillo, y azul. La región azul se usa para estimar  $\omega_c$  y  $\tilde{\epsilon}_{cut}$  con la cuadratura Exp-Sinh, mientras que las regiones verde, rojo, y amarillo se integran usando la cuadratura de Gauss-Kronrod.

con  $\epsilon_{GKQ}$  la estimación del error arrojado por la GKQ para la integración sobre el intervalo  $(0, \omega_c)$ ,  $\tilde{\epsilon}_{cut}$  es una cota superior para el error por truncamiento de frecuencia, definido como

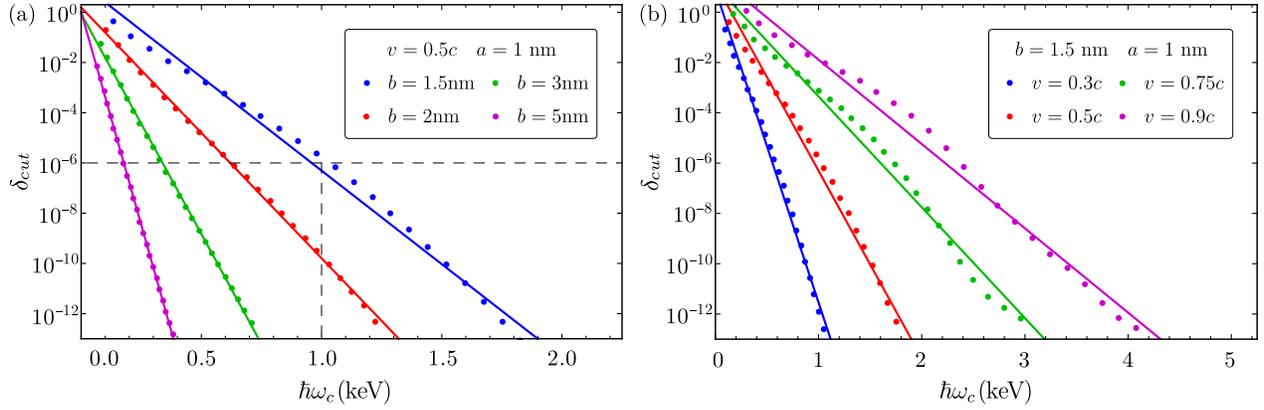
$$\tilde{\epsilon}_{cut} \geq \epsilon_{cut} = \int_{\omega_c}^{\infty} \mathcal{P}_\perp(\omega) d\omega, \quad (2.97)$$

y  $\omega_c \text{Max}[\epsilon_{\mathcal{P}_\perp}(\omega_i)]$  es una cota superior al error numérico absoluto debido a la integral de superficie cerrada:

$$\omega_c \text{Max}[\epsilon_{\mathcal{P}_\perp}(\omega_i)] \geq \int_0^{\omega_c} \epsilon_{\mathcal{P}_\perp}(\omega) d\omega. \quad (2.98)$$

A continuación, se discuten los criterios para elegir  $\omega_c$  y a la colección de nodos y pesos ( $g_i$  y  $\omega_i$ ) en la Ec. (2.95). Se consideran NPs con  $a = 1$  nm hechas de dos materiales distintos: (i) aluminio, con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude (con los parámetros  $\hbar\omega_p = 15.1$  eV y  $\hbar\Gamma = 0.15$  eV); (ii) oro, con una función dieléctrica obtenida de datos experimentales y reportada por Werner et al.<sup>51</sup>. En la Fig. 2.2(a) se muestra una contribución espectral al momento lineal,  $\mathcal{P}_\perp(\omega)$ , típica para una NP de aluminio, y en la Fig. 2.2(b) se muestra una  $\mathcal{P}_\perp(\omega)$  típica para una NP de oro. Se ha separado al espacio de frecuencias en cuatro regiones, con etiquetas I<sub>1</sub> a I<sub>4</sub>, y con colores: verde, rojo, amarillo, y azul, respectivamente. En la región roja,  $\mathcal{P}_\perp(\omega)$  presenta una mayor estructura respecto a las otras regiones, por lo que se necesita una mayor cantidad de puntos de muestreo en esta región que en las restantes. Como se mencionó anteriormente, se emplea a la GKQ para obtener  $\Delta P_\perp$  integrando sobre  $(0, \omega_c)$  en vez de  $(0, \infty)$ . Para calcular el error por truncamiento de frecuencia  $\epsilon_{cut}$  [ver Ec. (2.97)], se emplea la cuadratura Exp-Sinh (del método Doble-Exponencial) implementada en la biblioteca BOOST<sup>48</sup> para obtener la integral de  $\mathcal{P}_\perp(\omega)$  sobre  $(\omega_c, \infty)$  (región azul en la Fig. 2.2). Es importante mencionar que la cuadratura Exp-Sinh presenta limitaciones de convergencia para integrandos que cambian rápidamente, como el mostrado en la región roja de la Fig. 2.2, por lo que sólo fue empleada para la región azul.

En la Fig. 2.3 se muestra el error relativo por truncamiento de frecuencia,  $\delta_{cut} = \epsilon_{cut}/\Delta P_\perp$ , del momento lineal transversal, en función de  $\hbar\omega_c$  y para los parámetros indicados en el recuadro. Se observa que la inclinación de la recta ajustada disminuye cuando  $b$  decrece [Fig. 2.3(a)] y  $v$  crece [Fig.



**Figura 2.3:** Error relativo por truncamiento de frecuencia del momento lineal transversal,  $\delta_{cut} = \epsilon_{cut}/\Delta P_{\perp}$ , como función de  $\hbar\omega_c$ . (a) Muestra  $\delta_{cut}$  para distintos parámetros de impacto  $b$ , con  $v = 0.5c$ . (b) Muestra  $\delta_{cut}$  para distintas velocidades del electrón  $v/c$ , con  $b = 1.5$  nm. Se muestra (como ayuda a la vista) una recta ajustada a los puntos calculados.

2.3(b)]. Los resultados presentados en la Fig. 2.3 se pueden usar para replicar, dada una tolerancia para el error, los resultados mostrados en los siguientes capítulos. Por ejemplo, para obtener  $\Delta P_{\perp}$  con  $\tilde{\epsilon}_{cut} \sim 10^{-6}\Delta P_{\perp}$  para un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y  $b = 1.5$  nm, es necesario integrar hasta  $\hbar\omega_c \geq 1$  keV [mostrado con una línea negra punteada en la Fig. 2.3(a)].

Después de elegir  $\omega_c$  de acuerdo a la Fig. 2.3 de tal forma que  $\delta_{cut} < 10^{-6}$  en cada caso, se seleccionan los pesos y nodos,  $g_i$  y  $\omega_i$ , en la Ec. (2.95), y se calcula  $\Delta P_{\perp}$  usando una GKQ para las regiones  $I_1$  a  $I_3$  (ver Fig. 2.2). Para las regiones verde, rojo, y amarillo, en el caso de la NP de aluminio, se eligen los siguientes órdenes para la GKQ de 51, 201, y 151 (equivalente a 103, 403, y 303 puntos de muestreo), respectivamente; y para el caso de la NP de oro, se eligen los siguientes órdenes para la GKQ de 101, 181, y 101, respectivamente (equivalente a 203, 363, y 203 puntos de muestreo). Con estos órdenes se asegura una convergencia numérica con una precisión de  $\epsilon_{P_{\perp}} < 10^{-4}\Delta P_{\perp}$ , lo que significa que al menos las tres primeras cifras significativas son correctas.

A partir de los cálculos realizados, se observa que  $\epsilon_{GK}$  es la principal contribución al error en la Ec. (2.96), lo que significa que el número de puntos de muestreo en  $\omega \in (0, \omega_c)$  determina si se alcanza la convergencia numérica deseada, asumiendo que se eligió  $\hbar\omega_c$  en el orden de kiloelectronvolts. Es importante mencionar que la Fig. 2.3 es válida para las NPs (y los materiales de los que están hechas) estudiadas en los siguientes capítulos, es decir, la frecuencia de corte depende fuertemente de los parámetros  $v$  y  $b$ , y débilmente del tamaño o del material de la NP.

En el siguiente capítulo, se calculará  $\Delta \vec{P}$  para NPs con  $a = 1$  nm, hechas de aluminio (modelo de Drude) u oro (con una función dieléctrica obtenida de datos experimentales). Es importante mencionar que estos casos han sido reportados anteriormente en la referencia [26], mostrando  $\Delta P_{\perp} < 0$  para parámetros de impacto pequeños. Sin embargo, como se mostrará más adelante, los resultados repulsivos de deben a una convergencia numérica deficiente.

# Nanopartícula pequeña

---

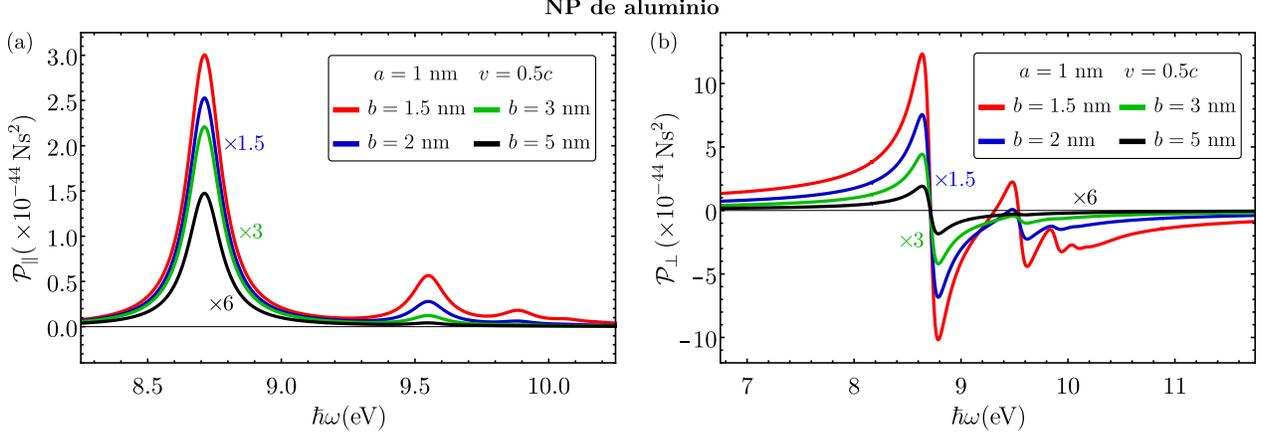
En este capítulo se presentan resultados del momento lineal total transferido a NPs pequeñas de 1 nm de radio, hechas de aluminio, oro, plata, y bismuto. Cabe destacar que aunque ya existen estudios previos para NPs de aluminio y oro,<sup>26-28,42</sup> los resultados obtenidos en este capítulo contradicen las conclusiones de dichos trabajos previos. A lo largo de las secciones que conforman este capítulo, se mostrará que el momento lineal total transferido a NPs metálicas pequeñas siempre es atractivo (hacia la trayectoria del electrón).

En todos los resultados mostrados en este capítulo, se tomaron en cuenta un número máximo de multipolos  $\ell = 30$  en los campos electromagnéticos esparcidos [ver Ecs. (2.56) y (2.60)]. Para los campos electromagnéticos externos se consideraron las expresiones cerradas dadas en términos de coordenadas cartesianas [Ecs. (2.26) y (2.27)]. La contribución espectral al momento lineal se obtuvo numéricamente usando la metodología detallada en la Sección 2.5, y el momento lineal transferido se obtuvo usando la metodología presentada en la Sección 2.6, garantizando una precisión numérica de al menos tres cifras significativas.

## 3.1. Nanopartícula de aluminio

Primero se considerará el caso más simple: el de una NP caracterizada con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude, con una frecuencia de plasma de  $\hbar\omega_p = 15.1$  eV y un parámetro de amortiguamiento de  $\hbar\Gamma = 0.15$  eV, imitando al aluminio. Dado que se desea hacer una revisión de los resultados previamente reportados, y mencionados en la Introducción, los valores para los parámetros  $\omega_p$  y  $\Gamma$  son los mismos que los usados en la referencia [26].

En la Fig. 3.1 se muestra la contribución espectral al momento lineal para una NP de aluminio con  $a = 1$  nm, a lo largo de la dirección longitudinal [ $\mathcal{P}_{\parallel}$ , Fig. 3.1(a)], y a lo largo de la dirección transversal [ $\mathcal{P}_{\perp}$ , Fig. 3.1(b)], para un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y parámetros de impacto desde  $b = 1.5$  (curva roja) hasta 5 nm (curva negra). Por un lado, es posible notar de la Fig. 3.1(a), que  $\mathcal{P}_{\parallel}$  está compuesto por una superposición de funciones lorentzianas, las cuales se encuentran centradas en (aproximadamente) las frecuencias de resonancia plasmónicas, y por otro lado, se aprecia en la Fig. 3.1(b), que  $\mathcal{P}_{\perp}$  está compuesto por una superposición de funciones con forma de derivada de una lorentziana, las cuales cruzan por cero en (aproximadamente) las frecuencias de resonancia plasmónicas. Se observa que la curva negra en la Figs. 3.1(a) y 3.1(b) (correspondiente a  $b = 5$  nm) exhibe únicamente una resonancia en  $\hbar\omega = 8.72$  eV, lo que indica que el momento dipolar [ $\ell = 1$  en las Ecs. (2.56) y (2.60)] domina sobre los momentos multipolares de orden superior, y a medida que  $b$  disminuye hasta 1.5 nm (curva roja), la contribución de multipolos superiores ( $\ell > 1$ ) aumenta, tal



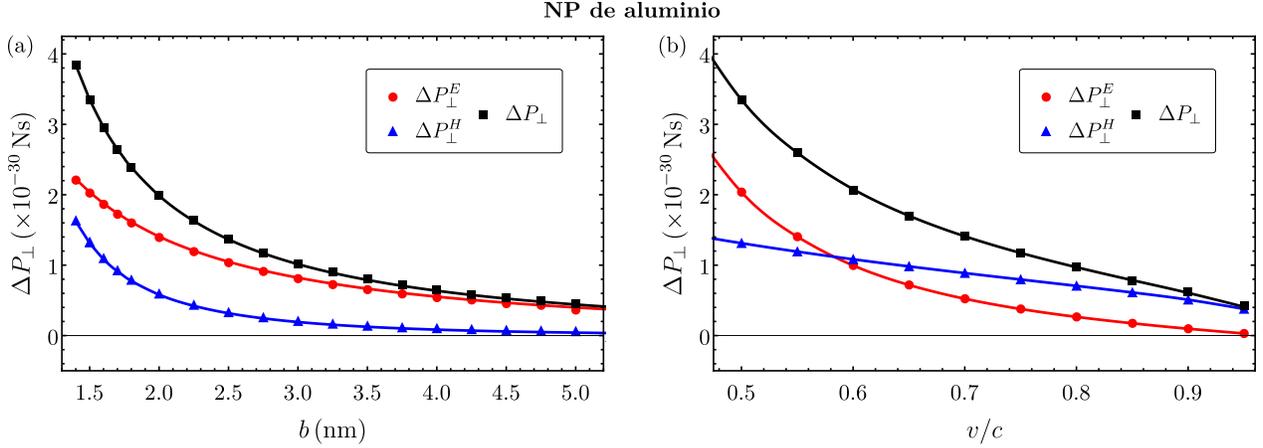
**Figura 3.1:** Contribución espectral al momento lineal transferido a una NP de aluminio con  $a = 1$  nm, (a) a lo largo de la dirección longitudinal, y (b) a lo largo de la dirección transversal. Para un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y con parámetros de impacto  $b = 1.5$  nm (línea roja), 2 nm (línea azul, multiplicada por 1.5), 3 nm (línea verde, multiplicada por 3) y 5 nm (línea negra, multiplicada por 6).

y como puede verse en la Fig. 3.1 en  $\hbar\omega > 9.5$  eV. Las Figs. 3.1 y 1.2 (mostrada en la Introducción) son las mismas, pues se han considerado los mismos parámetros para describir la función dieléctrica que caracteriza la respuesta electromagnética del aluminio.

Dado que la información acerca de la repulsión o atracción de la NP hacia el haz de electrones está relacionada con la componente transversal del momento lineal transferido,  $\Delta P_{\perp}$ , este trabajo se enfoca en analizar a  $\Delta P_{\perp}$ . Para los resultados de la componente longitudinal del momento lineal transferido,  $\Delta P_{\parallel}$ , se refiere al lector al Apéndice D.

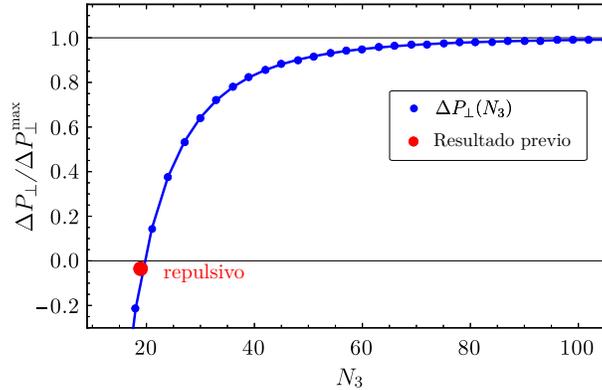
Como se discutió en la Sección 2.1, el momento lineal transferido,  $\Delta \vec{P}$ , corresponde a la integral sobre el espacio de frecuencias de la contribución espectral al momento lineal ( $\vec{P}$ , mostrado en la Fig. 3.1). En la Fig. 3.2, se muestra el momento lineal transferido a lo largo de la dirección transversal,  $\Delta P_{\perp}$  (rectángulos negros), junto con su contribución eléctrica ( $\Delta P_{\perp}^E$ , círculos rojos) y magnética ( $\Delta P_{\perp}^H$ , triángulos azules). En la Fig. 3.2(a) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  para un electrón con  $v = 0.5c$  en función del parámetro de impacto, y en la Fig. 3.2(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  para un electrón con  $b = 1.5$  nm en función de  $v/c$ . Es interesante resaltar dos importantes características de la Fig. 3.2: (i)  $\Delta P_{\perp}$  (rectángulos negros) y sus contribuciones eléctrica (círculos rojos) y magnética (triángulos azules) son siempre positivas; y (ii)  $\Delta P_{\perp}$  decrece con  $b$  [Fig. 3.2(a)] y con  $v$  [Fig. 3.2(b)]. Se refiere al lector a las Figs. D.1(a) y D.1(b) del Apéndice D para los resultados del momento lineal longitudinal transferido a la NP de aluminio.

Los resultados muestran que  $\Delta P_{\perp} > 0$  para una NP de aluminio, indicando que la NP es atraída hacia la trayectoria del electrón. Esto contradice lo encontrado en estudios previos, en donde  $\Delta P_{\perp}$  para  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$  fue reportado como negativo [indicando una interacción repulsiva, ver recuadro en la Fig. 1.2(b)].<sup>26</sup> Para averiguar el origen de las discrepancias entre los resultados aquí mostrados y los reportados en la referencia [26], se compararon los métodos numéricos empleados. Como se discutió en la Sección 2.6, se dividió el dominio de  $\mathcal{P}_{\perp}$  (espacio de frecuencias) en cuatro regiones  $I_1$  a  $I_4$  [mostradas con colores en la Fig. 2.2(a)]. La región  $I_4$  se usó para determinar la frecuencia de corte  $\omega_c$ , y las regiones restantes  $I_1$  a  $I_3$  se integraron usando la GKQ, de tal forma que se aseguren que al menos tres cifras significativas de  $\Delta P_{\perp}$  son correctas. La mayor contribución negativa (repulsiva) al momento lineal transferido proviene de la región  $I_3$  [mostrada en amarillo



**Figura 3.2:** Momento lineal transversal  $\Delta P_{\perp}$  (rectángulos negros) transferido de un electrón rápido a una NP de aluminio con  $a = 1$  nm, (a) en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$ , y (b) en función de  $v/c$  y considerando  $b = 1.5$  nm. Los círculos rojos y los triángulos azules representan la contribución eléctrica y magnética a  $\Delta P_{\perp}$ , respectivamente. Las líneas roja, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

en la Fig. 2.2(a); notando la escala logarítmica]. En la referencia [26], la integral de frecuencias se calculó con una regla de Simpson 3/8. Para entender el por qué del resultado repulsivo previo, se reprodujeron los resultados de la referencia [26], usando una regla de Simpson 3/8 en la región  $I_3$  y GKQs en las regiones  $I_1$  y  $I_2$  (ver Sección 2.6). En la Fig. 3.3 se muestra el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , en función del número de puntos de muestreo  $N_3$  en la región  $I_3$ . Se observa que cuando  $N_3 < 21$ , el momento lineal transversal  $\Delta P_{\perp}$  es negativo, indicando que la NP es repelida de la trayectoria del electrón rápido. Sin embargo, cuando  $N_3$  incrementa,  $\Delta P_{\perp}$  converge asintóticamente al resultado obtenido con la GKQ. Se indica con un punto rojo el valor repulsivo previamente reportado en la referencia [26], el cual, inferimos es incorrecto, debido a una falta de convergencia numérica en la integral de frecuencias al usar un bajo número de puntos de muestreo.



**Figura 3.3:** Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido de un electrón rápido con  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$ , a una NP de aluminio con  $a = 1$  nm. Los puntos azules muestran a  $\Delta P_{\perp}$  como función del número de puntos de muestreo  $N_3$  en la región  $I_3$  [mostrada en amarillo en la Fig. 2.2(a)], y calculados con la regla de Simpson 3/8. La línea azul se muestran como guía a la vista. El resultado repulsivo previamente reportado<sup>26</sup> es mostrado como un punto rojo.

Es relevante mencionar que la función dieléctrica usada para describir al aluminio (el modelo de Drude) es causal, es decir, que satisface las relaciones de Kramers-Kronig.<sup>30</sup> Sin embargo, se ha sugerido que una respuesta no causal en la función dieléctrica también puede conducir a resultados

repulsivos incorrectos.<sup>30</sup> Por lo tanto, resulta interesante estudiar los efectos de ambas fuentes de resultados repulsivos incorrectos: (i) pobre convergencia numérica, y (ii) una función dieléctrica no causal. En la Sección 3.3, se estudian los efectos no físicos que produce la no causalidad en el momento lineal transferido a la NP. En particular, se estudian los efectos de la no causalidad en la polarizabilidad de la NP.

### 3.1.1. Interacción en función del tiempo

Los resultados mostrados en la Sección 3.1 son válidos para cualquier combinación de parámetros del sistema (dentro de la aproximación de la electrodinámica clásica), pero al ser obtenidos en el espacio de frecuencias no proporcionan información de la interacción en función del tiempo. Por lo que para entender la interacción entre NPs pequeñas y electrones rápidos en función del tiempo, en esta sección se obtienen las fuerzas de interacción sobre la NP (y sobre el electrón rápido) en el límite dipolar, el cual es válido para NPs pequeñas y parámetros de impacto  $b$  suficientemente grandes.

La interacción entre un electrón rápido y una NP pequeña se puede estudiar al considerar que la NP responde como un dipolo eléctrico puntual (aproximación dipolar).<sup>56</sup> A partir de la fórmula de la fuerza de Lorentz, es posible obtener las fuerzas de interacción en función del tiempo. En la aproximación dipolar, el momento dipolar  $\vec{p}(\omega)$  inducido en la NP está dado por

$$\vec{p}(\omega) = \varepsilon_0 \alpha_s(\omega) \vec{E}_0^{\text{ext}}(\omega), \quad (3.1)$$

donde  $\vec{E}_0^{\text{ext}}(\omega)$  es el campo eléctrico externo evaluado en el centro de la NP, y

$$\alpha_s(\omega) = 4\pi a^3 \left[ \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_0} \right] \quad (3.2)$$

es la polarizabilidad quasiestática.<sup>40</sup> El momento dipolar  $\vec{p}$  dado por la Ec. (3.1) depende de la frecuencia, pero a través de una transformada de Fourier se puede obtener en función del tiempo:

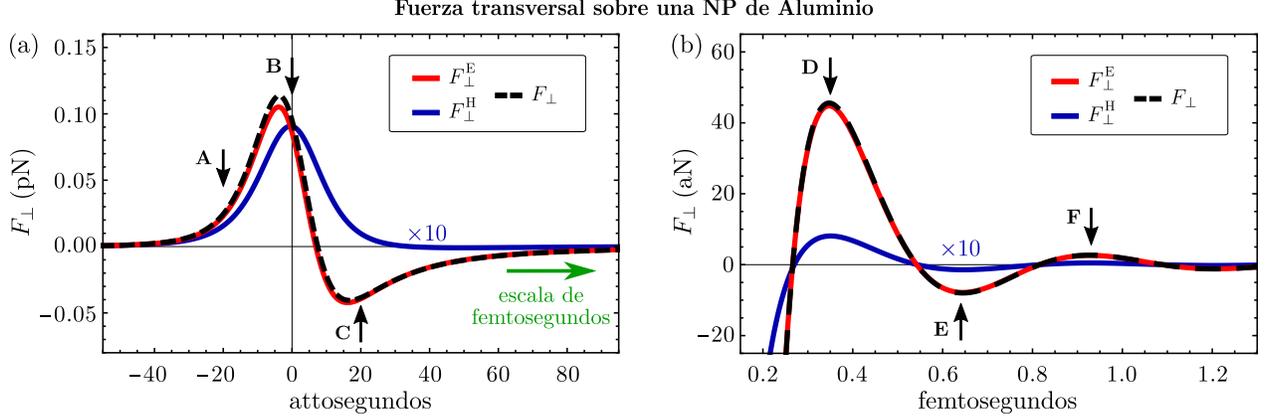
$$\begin{aligned} \vec{p}(t) &= \varepsilon_0 \int_{-\infty}^t \alpha_s(t-t') \vec{E}_0^{\text{ext}}(t') dt' \\ &= \varepsilon_0 \int_0^{\infty} \alpha_s(\tau) \vec{E}_0^{\text{ext}}(t-\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (3.3)$$

con  $\tau = t - t'$ . Entonces, la fuerza sobre el dipolo puntual  $\vec{p}$  está dada por:<sup>40</sup>

$$\vec{F}(t) = [\vec{p}(t) \cdot \nabla] \vec{E}_0^{\text{ext}}(t) + \dot{\vec{p}}(t) \times \mu_0 \vec{H}_0^{\text{ext}}(t), \quad (3.4)$$

con  $\dot{\vec{p}}$  la derivada respecto al tiempo de  $\vec{p}$ , mientras que  $\vec{E}_0^{\text{ext}}(t)$  y  $\vec{H}_0^{\text{ext}}(t)$  son los campos electromagnéticos externos producidos por el electrón [dados por las Ecs. (2.24) y (2.25)], evaluados en el centro de la NP.

En la Fig. 3.4 se muestra la componente transversal de la fuerza ( $F_{\perp}$ , línea negra punteada) experimentada por una NP de aluminio. La fuerza está separada en sus componentes eléctrica ( $F_{\perp}^E$ , línea roja) y magnética ( $F_{\perp}^H$ , línea azul). En la Fig. 3.4 se observan dos escalas temporales relevantes para la fuerza: (i) régimen de attosegundos (ii) y régimen de femtosegundos. En la escala de attosegundos la fuerza es del orden de piconewtons [Fig. 3.4(a)], mientras que en la escala de

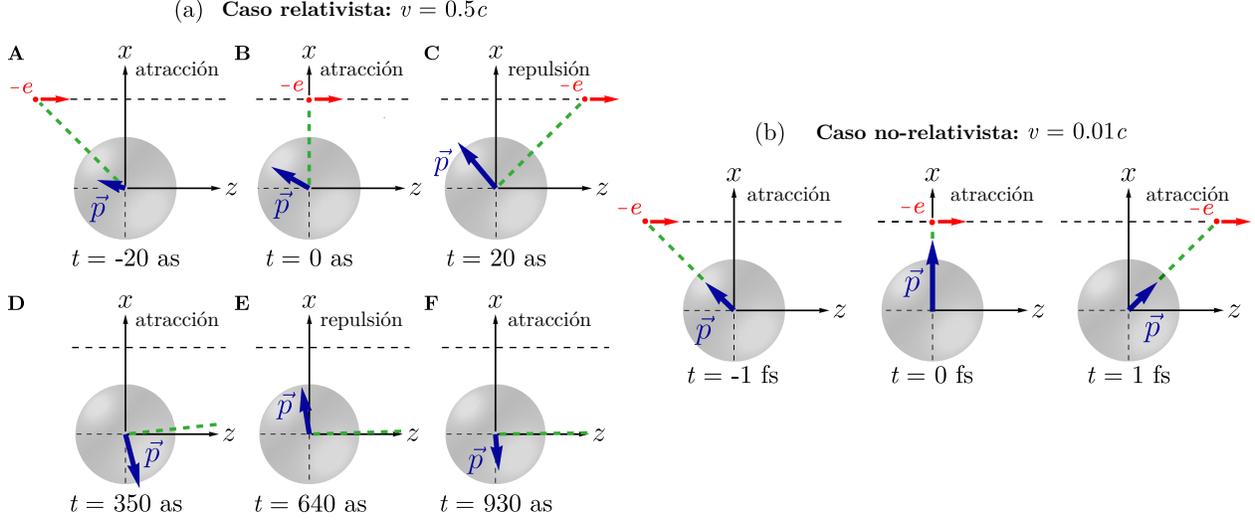


**Figura 3.4:** (a) Escala de attosegundos de  $F_{\perp}$  para una NP de aluminio con  $a = 1$  nm. El electrón rápido viaja con  $v = 0.5c$  y  $b = 3$  nm. Las líneas roja y azul representan la contribuciones eléctrica y magnética a la fuerza, y la línea negra punteada corresponde a la fuerza total. Las etiquetas **A**, **B** y **C** indican la fuerza a los tiempos  $-20$ ,  $0$  y  $20$  as. La flecha verde horizontal apunta a la escala de femtosegundos. (b) Escala de femtosegundos de  $F_{\perp}$  para la misma NP que en (a). Las etiquetas **D**, **E** y **F** indican las fuerzas a los tiempos  $350$ ,  $640$  y  $930$  as, respectivamente. Las curvas azules en (a) y (b) están multiplicadas por un factor de  $10$  (adaptada de J. Castrejón-Figueroa et al., Phys. Rev. B 103, 155413, 2021).<sup>56</sup>

femtosegundos la fuerza oscila entre valores positivos y negativos, y su magnitud decrece a orden de attonewtons [Fig. 3.4(b)]. En las Figs. 3.4(a) y 3.4(b) se observa que la contribución eléctrica a la fuerza (línea roja) domina sobre la contribución magnética (línea azul, amplificada 10 veces), por lo que la curva roja está casi sobrepuesta con la curva negra punteada. En la Fig. 3.4(a) también se observa que los tiempos  $t = -20$  as y  $t = 0$  as (etiquetas **A** y **B**, respectivamente) corresponden a instantes en los que la fuerza es positiva (la NP es atraída hacia la trayectoria del electrón rápido), en contraste, de  $t = 20$  as (etiqueta **C**) hasta aproximadamente  $t \approx 250$  as, la fuerza es negativa (la NP es repelida de la trayectoria del electrón rápido). En el régimen de femtosegundos, mostrado en la Fig. 3.4(b), la interacción cambia alternadamente entre atractiva y repulsiva, como se indica con las etiquetas **D**, **E** y **F**. La interacción repulsiva (fuerza negativa) mostrada en la Fig. 3.4(a) es causada por un retraso en la respuesta de la NP, como se discutirá a continuación.

En la Fig. 3.5(a) se muestra el momento dipolar inducido  $\vec{p}(t)$  (flecha azul) a los tiempos indicados en la Figs. 3.4(a) y 3.4(b) por las etiquetas **A-F**. El tamaño de la flecha azul en la Fig. 3.5 representa la magnitud  $\vec{p}(t)$  en cada tiempo ( $-20$ ,  $0$ ,  $20$ ,  $350$ ,  $640$  y  $930$  as), y cabe resaltar que la punta de la flecha azul representa carga positiva inducida en la NP, mientras que la cola de la flecha representa carga negativa inducida en la NP. La línea verde punteada que une la posición del electrón (punto rojo) y el centro de la NP, se emplea para visualizar el retardo en el dipolo eléctrico inducido respecto a la posición del electrón. A los tiempos  $t = -20$  as y  $t = 0$  as, se observa en la Fig. 3.5(a), etiquetas **A** y **B**, que la flecha azul apunta hacia atrás de la línea verde punteada. Para estos tiempos, la carga positiva inducida en la NP está más cerca al electrón, y por tanto la interacción es atractiva. En contraste, para  $t = 20$  as [Fig. 3.5(a), etiqueta **C**], la carga negativa inducida en la NP está más cerca al electrón, por lo que la interacción es repulsiva. A tiempos  $350$ ,  $640$  y  $930$  as [Fig. 3.5(a), etiquetas **D**, **E** y **F**], el electrón rápido está lejos de la NP y el momento dipolar  $\vec{p}$  gira en el sentido de las manecillas del reloj, lo que produce que la fuerza sobre la NP alterne entre positiva y negativa [Fig. 3.4(b)], es decir, interacción atractiva y repulsiva.

Cuando el electrón viaja lento comparado con  $c$  (caso no-relativista,  $v = 0.01c$ ), el momento



**Figura 3.5:** (a) Dipolo eléctrico inducido (flecha azul) representado en el plano  $y = 0$ , para los seis tiempos indicados en la Fig. 3.4 con las etiquetas **A-F**. El electrón rápido (punto rojo) viaja con  $v = 0.5c$  y  $b = 3$  nm en la vecindad de una NP de aluminio con  $a = 1$  nm. La línea verde punteada une al punto rojo con el origen (centro de la NP). (b) Caso análogo a (a) pero ahora el electrón viaja a  $v = 0.01c$  (adaptada de J. Castrejón-Figueroa et al., Phys. Rev. B 103, 155413, 2021).<sup>56</sup>

dipolar  $\vec{p}$  apunta hacia la posición del electrón (punto rojo) todo el tiempo, como se observa en la Fig. 3.5(b), de modo que, en esta situación, la fuerza sobre la NP es siempre atractiva. A partir de estos resultados se concluye que si el electrón viaja con una velocidad comparable a  $c$ , ocurre un retraso en la respuesta de la NP al campo eléctrico externo, lo que produce una fuerza sobre la NP repulsiva para algunos intervalos de tiempo (ver Fig. 3.4). Es interesante resaltar que a pesar de que el momento lineal transferido a lo largo de la dirección transversal es siempre atractivo, existen instantes de tiempo para los cuales las fuerzas de interacción son repulsivas.

Evaluando el campo eléctrico externo, dado por la Ec. (2.24), en el centro de la NP se obtiene:<sup>1</sup>

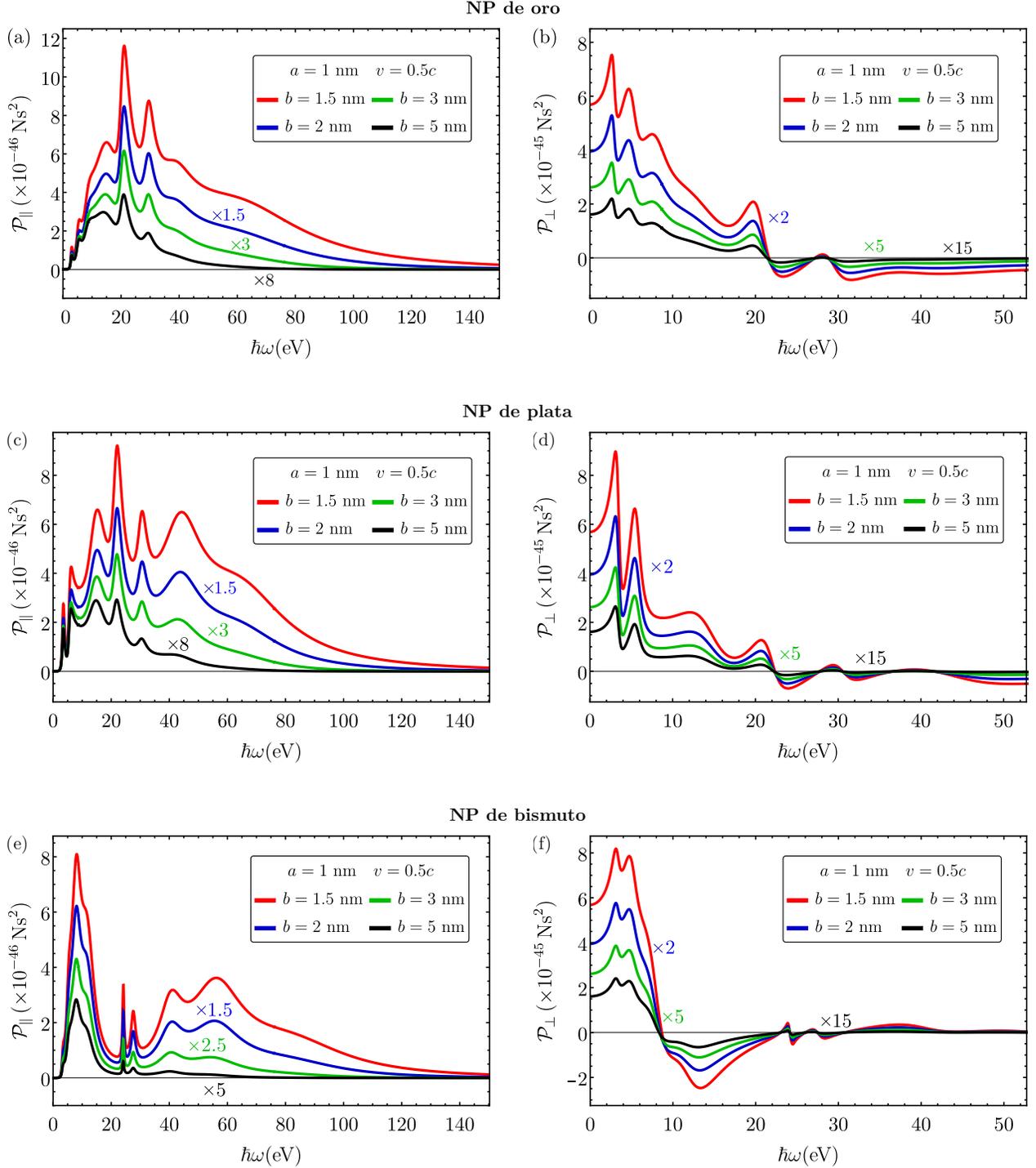
$$\vec{E}_0^{\text{ext}}(t) = \frac{e\gamma}{4\pi\epsilon_0} \frac{b\hat{x} + vt\hat{z}}{(b^2 + \gamma^2v^2t^2)^{3/2}}, \quad (3.5)$$

por lo que resulta natural elegir a  $\tau_0 = b/\gamma v$  como una medida característica del tiempo de interacción entre el electrón rápido y la NP. Por ejemplo, para un electrón con  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$ , el tiempo de interacción característico es  $\tau_0 \approx 10$  as, lo cual coincide con lo observado en la Fig. 3.4(a).

## 3.2. Nanopartículas de oro, plata y bismuto

En las secciones anteriores se estudió la respuesta de una NP caracterizada con una función dieléctrica dada por el modelo de Drude. Con el fin de analizar un caso más realista de NPs hechas de materiales reales, se consideran NPs hechas de oro, plata, y bismuto, con  $a = 1$  nm de radio. Para describir la respuesta electromagnética de dichos metales se consideraron funciones dieléctricas obtenidas experimentalmente, reportadas por Werner et al.<sup>51</sup> En la Fig. 3.6, se muestra la contri-

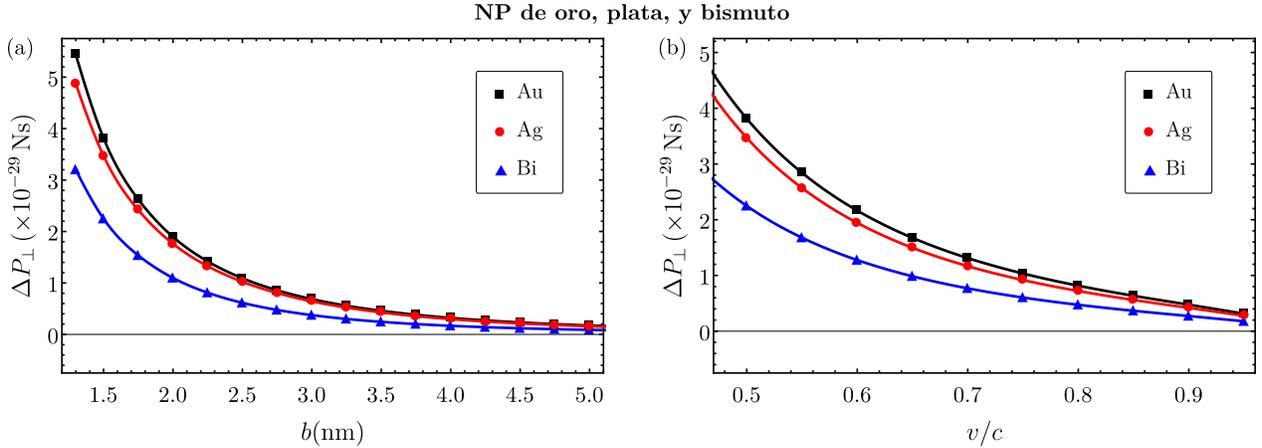
<sup>1</sup>La expansión multipolar esférica de los campos electromagnéticos externos y esparcidos se realiza alrededor del centro de la NP (origen) [ver Secciones 2.2 y 2.3], resultando natural elegir este punto.



**Figura 3.6:** Contribución espectral al momento lineal longitudinal  $\mathcal{P}_{\parallel}$  transferido a una NP de  $a = 1$  nm de radio hecha de (a) oro, (c) plata, y (e) bismuto. Contribución espectral al momento lineal transversal  $\mathcal{P}_{\perp}$  transferido a una NP de  $a = 1$  nm de radio hecha de (b) oro, (d) plata, y (f) bismuto. Los cálculos corresponden a un electrón rápido con  $v = 0.5c$ , considerando  $b = 1.5$  nm (línea roja), 2 nm (línea azul), 3 nm (línea verde), y 5 nm (línea negra).

bución espectral al momento lineal  $\vec{\mathcal{P}}$  para NPs de oro, plata, y bismuto, de 1 nm de radio. En la columna izquierda de la Fig. 3.6, etiquetas (a), (c), y (e), se muestra  $\mathcal{P}_{\parallel}$ , mientras que la columna derecha de de la Fig. 3.6, etiquetas (b), (d), y (f), se muestra  $\mathcal{P}_{\perp}$ , para una NP de oro, plata, y bismuto, respectivamente. Se considera un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y los parámetros de impacto indicados en el recuadro. En la Fig. 3.6, resaltan tres características importantes compartidas por los tres materiales: (i) la contribución espectral al momento lineal longitudinal,  $\mathcal{P}_{\parallel}$ , es siempre positiva, mientras que la contribución espectral al momento lineal transversal,  $\mathcal{P}_{\perp}$ , es tanto positiva como negativa, dependiendo de la frecuencia; (ii) la contribución espectral al momento lineal presenta contribuciones de alta energía (decenas de electronvolts), las cuales provienen de la función dieléctrica de bulto y no son de naturaleza plasmónica, y su contribución decrece al incrementar  $b$ ; (iii) la contribución negativa de  $\mathcal{P}_{\perp}$  es comparable con la contribución positiva, por lo que no es evidente si la interacción efectiva (dada por la integral en frecuencias de  $\mathcal{P}_{\perp}$ ) resultará negativa (indicando una interacción repulsiva) o positiva, para alguna combinación de parámetros.

Usando la metodología descrita en la Sección 2.6, se obtiene  $\Delta\vec{\mathcal{P}}$  transferido a NPs de  $a = 1$  nm hechas de oro, plata, y bismuto, con una precisión de al menos tres cifras significativas. Para el cálculo, se divide el espacio de frecuencias (dominio de  $\mathcal{P}_{\perp}$ ) en cuatro regiones, mostradas para la NP de oro en la Fig. 2.2(b) en colores verde, rojo, amarillo, y azul. La región azul se usa para estimar la frecuencia de corte  $\omega_c$  usando la cuadratura Exp-Sinh, y en las regiones verde, rojo y amarillo se emplea el método de integración numérica GKQ. Las regiones del espacio de frecuencias empleadas para las NPs de plata y bismuto son análogas al caso del oro, por lo que no se muestran.



**Figura 3.7:** Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido de un electrón rápido a una NP de  $a = 1$  nm de radio. (a)  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$ , y (b)  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $v/c$ , considerando  $b = 1.5$  nm. Los círculos rojos corresponden a los resultados para una NP hecha de plata, los rectángulos negros al oro, y los triángulos azules al bismuto. Las líneas rojas, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

En la Fig. 3.7 se muestra el momento lineal transferido para una NP de oro (línea negra), plata (línea roja), y bismuto (línea azul). En la Fig. 3.7(a) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $b$ , considerando  $v = 0.5c$ , y en la Fig. 3.7(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $v/c$ , considerando  $b = 1.5$  nm. La componente longitudinal del momento lineal transferido para los tres materiales se muestra en las Figs. D.2(a) y D.2(b) del Apéndice D. A partir de los resultados mostrado en las Figs. 3.7(a) y 3.7(b) se observa que: (i)  $\Delta P_{\perp}$  es positivo para los tres materiales estudiados; (ii) La curva negra (NP de oro) y la curva roja (NP de plata) tienen magnitudes similares, mientras que la curva azul (NP de

bismuto) es ligeramente menor.

Es relevante mencionar que las funciones dieléctricas usadas en esta sección para calcular la transferencia de momento lineal a NPs de oro, plata, y bismuto, tomadas del trabajo de Werner et al.,<sup>51</sup> son causales, es decir que satisfacen las relaciones de Kramers-Kronig.<sup>30</sup> Sin embargo, anteriormente se ha sugerido que una no causalidad en la función dieléctrica también puede conducir a resultados repulsivos incorrectos.<sup>30</sup> Entonces, resulta interesante estudiar los efectos que producen ambas fuentes de resultados repulsivos incorrectos: (i) convergencia numérica deficiente y (ii) una función dieléctrica no causal. En la Sección 3.1 se estudiaron los efectos de una pobre convergencia numérica en el momento lineal transferido, y en la siguiente sección se estudiará el efecto de una no causalidad en la polarizabilidad de la NP.

### 3.3. Interacción repulsiva causada por una respuesta no causal de la NP

La respuesta electromagnética de NPs esféricas pequeñas está descrita por la polarizabilidad quasiestática:<sup>56</sup>

$$\alpha_s(\omega) = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_0}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_0}, \quad (3.6)$$

donde  $\varepsilon(\omega)$  es la función dieléctrica de la NP y  $a$  su radio. A partir de la Ec. (3.6), es posible expresar a  $\varepsilon(\omega)$  en términos de  $\alpha_s(\omega)$ :

$$\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0} = \frac{2\alpha_s(\omega) + 4\pi a^3}{4\pi a^3 - \alpha_s(\omega)}. \quad (3.7)$$

Para estudiar únicamente los efectos de la no causalidad, por el momento se considera una NP de aluminio con una función dieléctrica causal dada por el modelo de Drude (con los parámetros mencionados en la Sección 3.1), cuya polarizabilidad quasiestática está dada por

$$\alpha_s(\omega) = 4\pi a^3 \frac{\omega_s^2}{\omega_s^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma}, \quad (3.8)$$

con  $\omega_s = \omega_p/\sqrt{3}$ . Mediante una transformada de Fourier del espacio de frecuencia al espacio de tiempo, se obtiene  $\alpha_s$  en función del tiempo:

$$\begin{aligned} \alpha_s(\tau) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \alpha_s(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \\ &= 4\pi a^3 \Theta(\tau) \frac{\omega_s^2}{\Omega_s} e^{-\tau\Gamma/2} \sin(\Omega_s\tau), \end{aligned} \quad (3.9)$$

en donde  $\Theta(\tau)$  es la función escalón de Heaviside y  $\Omega_s = \omega_s \sqrt{1 - (\Gamma/2\omega_s)^2}$ . Dado que  $\alpha_s(\tau < 0) = 0$  debido a la función  $\Theta(\tau)$ , la polarizabilidad quasiestática dada por la Ec. (3.9) es causal. Es posible añadir artificialmente una no causalidad a  $\alpha_s$ , definiendo una polarizabilidad quasiestática no causal  $\alpha_{nc}$  como

$$\alpha_{nc} = \alpha_s + f_{nc}. \quad (3.10)$$

Por simplicidad, se elige a  $f_{nc}(\tau)$  como una función rectángulo:

$$f_{nc}(\tau) = \begin{cases} -A & \tau \in (-T, 0) \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases}, \quad (3.11)$$

con longitud  $T$  y altura  $A$ . Por medio de una transformada de Fourier del espacio de tiempo al espacio de frecuencias se obtiene

$$f_{nc}(\omega) = -AT \operatorname{sinc}\left(\frac{\omega T}{2}\right) e^{-i\omega T/2}, \quad (3.12)$$

con  $\operatorname{sinc}(z) = \sin(z)/z$ . A partir de la Ec. (3.12), se observa que  $T$  tiene unidades de tiempo y  $AT$  tiene unidades de volumen.

Es importante mencionar que anteriormente se reportó una expresión para el momento lineal transversal, válida en el límite  $b \gg a$ , que en unidades cgs está dada por<sup>25</sup>

$$\Delta p_x = \frac{e^2}{bv^4} \left( 5.55165 + \frac{1.85055}{\gamma} \right) \operatorname{Re}[\alpha(\omega = 0)], \quad (3.13)$$

con  $e$  la carga fundamental y  $\gamma = [1 - (v/c)^2]^{-1/2}$ . A partir de la Ecs. (3.6), (3.10) y (3.12) se tiene que

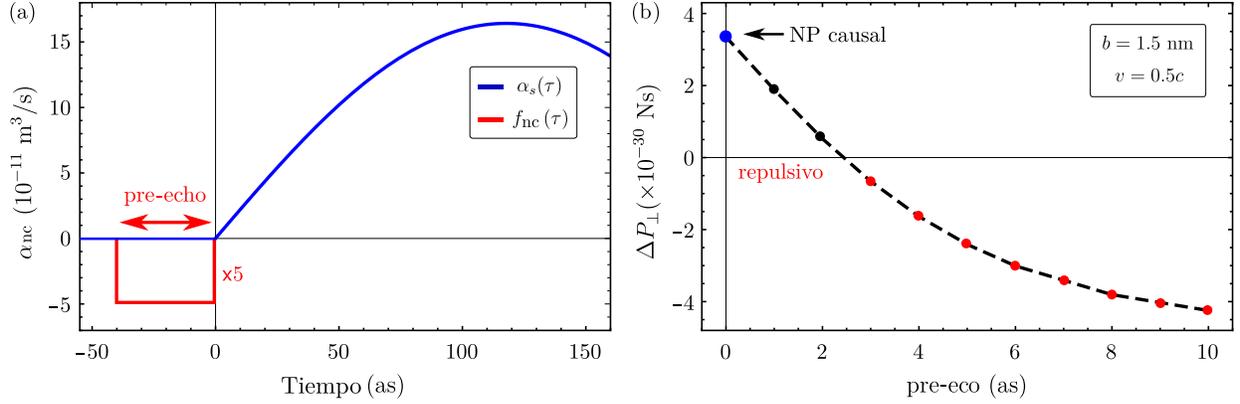
$$\alpha_{nc}(\omega = 0) = 4\pi a^3 - AT, \quad (3.14)$$

y al sustituir la Ec. (3.14) en la Ec. (3.13) se concluye que si el volumen de la no causalidad,  $AT$ , es mayor que  $4\pi a^3$ , entonces  $\Delta p_x$  es negativo, lo que significa que la NP será repelida de la trayectoria del electrón rápido. Entonces, para corroborar si una polarizabilidad no causal produce una interacción repulsiva,  $\Delta P_{\perp} < 0$ , a partir de la Ec. (3.7) se define una función dieléctrica no causal como

$$\frac{\varepsilon_{nc}(\omega)}{\varepsilon_0} = \frac{2\alpha_{nc}(\omega) + 4\pi a^3}{4\pi a^3 - \alpha_{nc}(\omega)}. \quad (3.15)$$

A continuación se muestran los cálculos para  $\Delta P_{\perp}$  considerando una NP caracterizada por una función dieléctrica dada por la Ec. (3.15), empleando la metodología descrita en las Secciones 2.5 y 2.6.

En la Fig. 3.8(a) se muestra la polarizabilidad dada por la Ec. (3.10) en función del tiempo, para una NP con una función dieléctrica dada por la Ec. (3.15) y con radio  $a = 1$  nm. Se separa  $\alpha_{nc}(\tau)$  en su contribución causal ( $\alpha_s(\tau)$  dada por la Ec. (3.9), línea azul) y no causal ( $f_{nc}(\tau)$  dada por la Ec. (3.11), rectángulo rojo). Se usará el término *pre-eco* para denotar a la longitud  $T$  del rectángulo rojo, y se elige  $A = 10^{-11} \text{ m}^3/\text{s}$  en la Ec. (3.11) (mismo orden de magnitud que  $\alpha_s$ ). En la Fig. 3.8(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función del pre-eco, para la misma NP considerada en la Fig. 3.8(a) con  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$ . Como se menciona en las referencias [27, 56], la mayor parte de la interacción ocurre en una escala de tiempo de decenas de attosegundos. En la Sección 3.1.1 se definió a  $\tau_0 = b/\gamma v$  como una medida natural del tiempo de interacción, que este caso resulta ser de  $\tau_0 \approx 10$  as. Un efecto interesante se observa a medida que el pre-eco incrementa al mismo orden de magnitud que  $\tau_0$ : el momento lineal transversal se vuelve negativo [puntos rojos en la Fig. 3.8(b)], lo que significa una interacción repulsiva entre el electrón rápido y la NP. Sin embargo, esta interacción repulsiva es el



**Figura 3.8:** (a) Polarizabilidad no causal  $\alpha_{nc}(\tau)$  en función del tiempo para una NP con  $a = 1$  nm. La línea roja corresponde a la contribución no causal  $f_{nc}(\tau)$  [Ec. (3.11)] añadida a la polarizabilidad cuasiestática  $\alpha_s(\tau)$  [línea azul, Ec. (3.9)]. (b) Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido a la misma NP de (a), en función del pre-eco, con  $b = 1.5$  nm y  $v = 0.5c$ . El punto azul muestra  $\Delta P_{\perp}$  para una NP causal de aluminio. Los puntos rojos corresponden a una NP cuya respuesta es no causal y para los cuales la interacción resulta ser repulsiva.

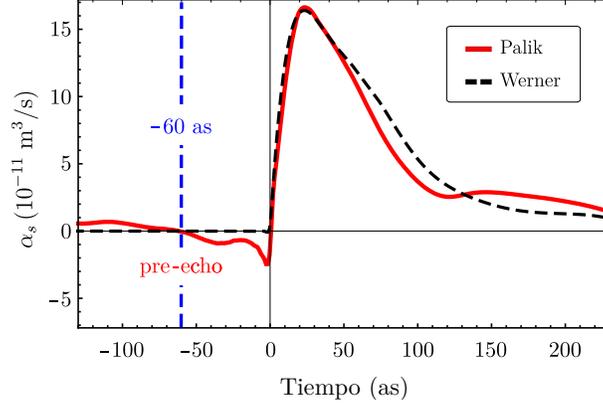
resultado de considerar una función dieléctrica no causal, por lo que se trata de un resultado no físico.

### 3.3.1. Nanopartícula de oro con respuesta no causal

Para estudiar los efectos debidos a la no causalidad en NPs hechas de materiales reales, en particular oro, se consideraron dos casos para su función dieléctrica tomada de datos experimentales: (i) una función dieléctrica de datos experimentales de distintos experimentos compilados por Palik,<sup>29</sup> y (ii) una función dieléctrica ajustada de los datos experimentales reportados por Werner et al.<sup>51</sup>

Debido a que la función dieléctrica obtenida de los datos experimentales compilados por Palik es conocida únicamente en un intervalo finito de frecuencias, es necesario realizar extrapolaciones (e interpolaciones) de los datos, lo cual no necesariamente resulta en una función dieléctrica causal.<sup>30</sup> En contraste, Werner et al. propusieron una solución a este problema al ajustar una serie de Lorentzianas a sus datos experimentales, resultando en una función dieléctrica analítica y causal.<sup>30</sup> Para analizar la causalidad de las dos funciones dieléctricas consideradas, se calcula la polarizabilidad cuasiestática en función del tiempo mediante una transformada numérica de Fourier del espacio de frecuencias al espacio del tiempo.

En la Fig. 3.9 se muestra la polarizabilidad cuasiestática en función del tiempo,  $\alpha_s(\tau)$ , para una NP de oro de  $a = 1$  nm caracterizada por una función dieléctrica obtenida de datos experimentales compilados por Palik (línea roja) y una función dieléctrica dada por un ajuste a datos experimentales reportado por Werner et al. (línea punteada negra). Dado que la función dieléctrica de Palik es obtenida mediante la extrapolación y la interpolación de datos provenientes de distintos experimentos, la polarizabilidad  $\alpha_s(\tau)$  (línea roja) presenta una parte imaginaria distinta de cero y un pre-eco, el cual no está presente para la polarizabilidad obtenida a partir del trabajo de Werner (línea negra). Esto indica que la función dieléctrica de Werner es causal, mientras que la función dieléctrica de Palik es no causal. Además, se observa en la Fig. 3.9 que el pre-eco es del orden de decenas de attosegundos (indicado por la línea vertical azul, en  $\tau = -60$  as). Como se mostrará a continuación, este pre-eco conduce a resultados repulsivos incorrectos.



**Figura 3.9:** Polarizabilidad cuasiestática en función del tiempo para una NP de oro, considerando la función dieléctrica obtenida de los datos experimentales compilados por Palik (línea roja),<sup>29</sup> y considerando la función dieléctrica reportada por Werner et al. (línea negra punteada).<sup>51</sup> La línea roja presenta un pre-eco no causal a  $\tau < 0$ . La línea vertical azul punteada indica  $\tau = -60$  as.

Es posible forzar la causalidad en la polarizabilidad obtenida de los datos de Palik,  $\alpha_s^P$ , al considerar únicamente su parte real y al eliminar el pre-eco:

$$\hat{\alpha}_s^P(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(\tau) \text{Re}[\alpha_s^P(\tau)] e^{-i\omega\tau} d\tau, \quad (3.16)$$

y a partir de la Ec. (3.16) se puede obtener una función dieléctrica causal:

$$\hat{\epsilon}_P(\omega) = \frac{2\hat{\alpha}_s^P(\omega) + 4\pi a^3}{4\pi a^3 - \hat{\alpha}_s^P(\omega)}. \quad (3.17)$$

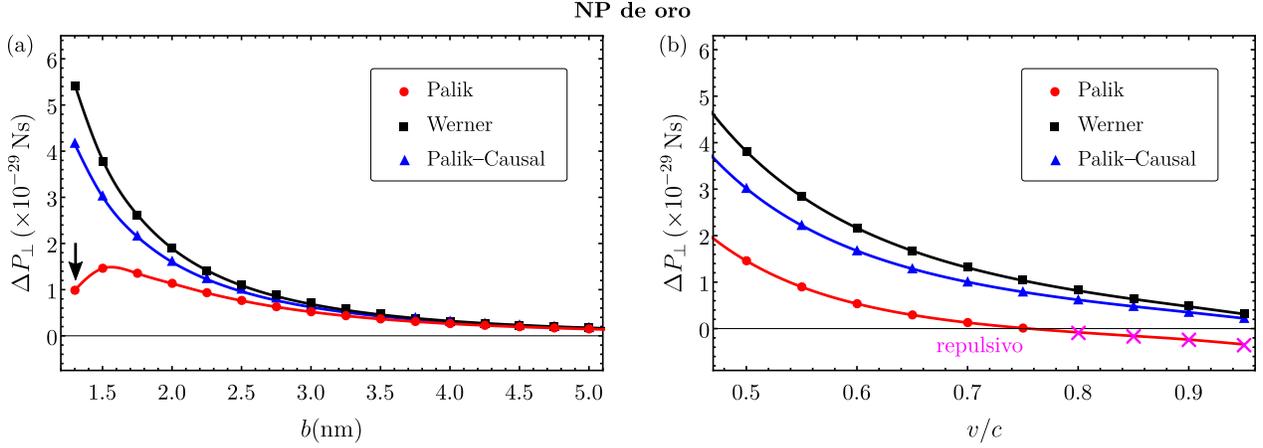
A partir de aquí se referirá a la función dieléctrica obtenida a partir de la Ec. (3.17) y los datos de Palik, como Palik-Causal.

En la Fig. 3.10(a) se muestra el momento lineal transversal  $\Delta P_{\perp}$  transferido a una NP de oro, en función de  $b$ , considerando  $v = 0.5c$ , y en la Fig. 3.10(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $v/c$ , considerando  $b = 1.5$  nm. Se muestra  $\Delta P_{\perp}$  para las tres funciones dieléctricas consideradas para el oro: (i) Palik (círculos y línea roja), (ii) Wener (rectángulos y línea negra), y (iii) Palik-Causal (triángulos y línea azul). Es posible notar en la Fig. 3.10(a) que  $\Delta P_{\perp}$  es positivo para las tres funciones dieléctricas (es decir, interacción atractiva). Sin embargo, para la curva roja (Palik), a  $b = 1.3$  nm [indicado con una flecha vertical negra en la Fig. 3.10(a)], se observa que

$$\Delta P_{\perp}(b = 1.3 \text{ nm}) < \Delta P_{\perp}(b = 1.5 \text{ nm}), \quad (3.18)$$

mostrando un máximo en  $\Delta P_{\perp}$  que no está presente para las funciones dieléctricas causales (Werner y Palik-Causal). El valor de  $\Delta P_{\perp}$  a  $b = 1.3$  nm fue previamente reportado como negativo, indicando una interacción repulsiva entre el electrón rápido y la NP.<sup>26-28</sup> Por lo tanto, se concluye que este valor fue incorrectamente reportado como repulsivo debido a una convergencia numérica deficiente en la integral sobre el espacio de frecuencias, al igual que en el caso de la NP de aluminio estudiado en la Sección 3.1.

En la Fig. 3.10(b) se observa que  $\Delta P_{\perp}$  decrece cuando  $v$  aumenta. Para la curva roja (Palik),  $\Delta P_{\perp}$  es positivo hasta  $v \leq 0.75c$ , a partir de donde se vuelve negativo (indicando una interacción



**Figura 3.10:** Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido a una NP de oro con  $a = 1$  nm, (a) como función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$ , y (b) como función de  $v/c$  y considerando  $b = 1.5$  nm. Los círculos rojos representan a  $\Delta P_{\perp}$  considerando la función dieléctrica tomada de los datos experimentales compilados por Palik,<sup>29</sup> los rectángulos negros considerando la función dieléctrica reportada por Werner et al.<sup>51</sup>, y los triángulos azules considerando la función dieléctrica de Palik después de forzar causalidad [Palik-Causal, Ec. (3.17)]. Las líneas roja, negra, y azul, se muestran como guía a la vista. La flecha vertical negra en (a) indica  $b = 1.3$  nm. En (b), las cruces magenta indican  $\Delta P_{\perp} < 0$ , es decir repulsivo.

repulsiva, resaltada con cruces magenta). Esta transición de  $\Delta P_{\perp}$  de atractivo a repulsivo desaparece para las funciones dieléctricas de Werner (rectángulos negros) y Palik-Causal (triángulos azules). A partir de estos resultados se puede concluir que la transición a  $\Delta P_{\perp}$  repulsivo no es física, y es causada por la no causalidad en la función dieléctrica usada para describir al oro.

Es importante recalcar que la no causalidad conduce a resultados incorrectos únicamente si el pre-eco y el tiempo típico de interacción entre el electrón rápido y la NP son del mismo orden de magnitud. Esto se discutirá al final del siguiente capítulo, en donde se estudiará la dependencia del momento lineal transferido con el tamaño de la NP, considerando una respuesta no causal de la NP.

# Nanopartícula grande

En este capítulo, se muestran resultados cuantitativamente válidos para el momento lineal transferido de electrones rápidos a nanopartículas grandes, calculados para NPs de hasta 50 nm de radio. Algunos factores que permiten obtener estos resultados son:

- (i) Las expresiones analíticas de la contribución espectral al momento lineal [obtenidas a partir de la expresión multipolar en coordenadas esféricas de los campos electromagnéticos externos, Ecs. (2.35) y (2.36); ver Sección 2.4], que hacen posible obtener  $\vec{\mathcal{P}}$  considerando un mayor número máximo de multipolos  $\ell_{\max}$ , sin fuentes de error numérico provenientes de la integral de superficie cerrada y con tiempos de cómputo razonables.
- (ii) Las cuadraturas de Gauss-Kronrod (GKQ) y Exp-Sinh (Doble-Exponencial), usadas para obtener la integral en el espacio de frecuencias de la contribución espectral al momento lineal<sup>1</sup> (ver Sección 2.6).
- (iii) El creciente poder computacional,<sup>2</sup> que permite que computadoras personales estándar sean capaces de obtener los resultados presentados en esta tesis.

Dada la relación entre los coeficientes de las funciones escalares esparcida y externa [ver Ecs. (2.52) y (2.53) de la Sección 2.3]:

$$\begin{aligned}\psi_{\ell,m}^{\text{E,scat}} &= t_{\ell}^{\text{E}} \psi_{\ell,m}^{\text{E,ext}}, \\ \psi_{\ell,m}^{\text{M,scat}} &= t_{\ell}^{\text{M}} \psi_{\ell,m}^{\text{M,ext}},\end{aligned}$$

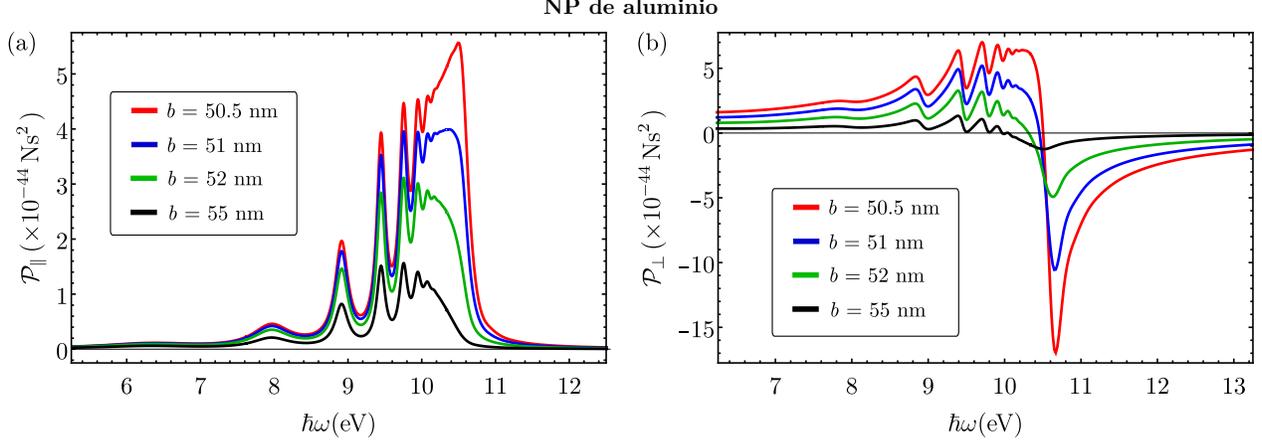
es posible apreciar que el multipolo de orden  $\ell, m$  en los campos esparcidos es inducido por el multipolo de orden  $\ell, m$  de los campos externos. Por esta razón, en los cálculos mostrados a continuación se consideran  $\ell_{\max} = 50$  tanto en los campos esparcidos como en los externos.

## 4.1. Nanopartícula de aluminio

Se considera una NP grande de aluminio de  $a = 50$  nm de radio, tomando su función dieléctrica del modelo de Drude con los parámetros  $\hbar\omega_p = 15.1$  eV y  $\hbar\Gamma = 0.15$  eV, al igual que en la Sección 3.1 y la referencia [26]. Al evaluar las expresiones analíticas mostrada en la Sección 2.4 se obtiene la

<sup>1</sup>Cabe mencionar que esto también permitió identificar que los resultados teóricos previamente reportados como repulsivos para NPs pequeñas eran incorrectos, tal y como se discutió en el Capítulo 3.

<sup>2</sup>El número de transistores en microprocesadores se ha incrementado en aproximadamente dos órdenes de magnitud desde el 2004, fecha del trabajo pionero de García de Abajo,<sup>25</sup> a la fecha.



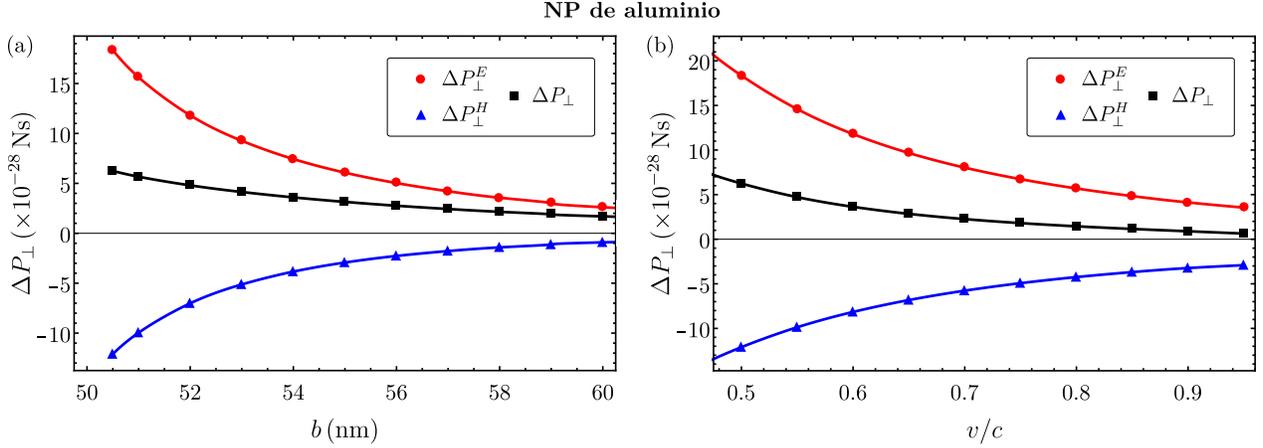
**Figura 4.1:** Contribución espectral al momento lineal transferido a una NP de aluminio de  $a = 50$  nm, (a) a lo largo de la dirección longitudinal y (b) a lo largo de la dirección transversal, para un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y con parámetros de impacto  $b = 50.5$  nm (línea roja), 51 nm (línea azul), 52 nm (línea verde), y 55 nm (línea negra).

contribución espectral al momento lineal,  $\vec{\mathcal{P}}$ . En la Fig. 4.1, se muestra  $\vec{\mathcal{P}}$  para una NP de aluminio de  $a = 50$  nm, considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y los parámetros de impacto  $b$  mostrados en el recuadro. La Fig. 4.1(a) muestra la contribución espectral al momento lineal longitudinal,  $\mathcal{P}_{\parallel}$ , y la Fig. 4.1(b) muestra la contribución espectral al momento lineal transversal,  $\mathcal{P}_{\perp}$ . Resulta interesante resaltar dos características importantes observadas al comparar el caso de NP pequeña (mostrado en la Fig. 3.1) con el presente caso de NP grande: (i) para una NP pequeña la contribución dipolar  $\ell = 1$  es dominante, mientras que para una NP grande los multipolos de orden superior  $\ell > 1$  dominan, en particular para  $b = 50.5$  nm (curva roja en la Fig. 4.1) el plasmón de superficie, de superficie  $\ell \rightarrow \infty$ , es dominante, sin embargo su contribución disminuye a medida que  $b$  aumenta; (ii) Las resonancias plasmónicas están corridas hacia el rojo.

Es importante mencionar que estudios teóricos previos mostraban  $\mathcal{P}_{\parallel} < 0$  para NPs grandes,<sup>26,28</sup> como se muestra en la Fig. 1.3(a) de la Sección 1. En estos estudios previos,  $\vec{\mathcal{P}}$  fue obtenido numéricamente mediante reglas de Newton-Cotes a partir de la integral de superficie cerrada [ver Ec. (2.11)]. Sin embargo, a medida que el tamaño de la NP aumenta es más difícil lograr convergencia numérica para  $\vec{\mathcal{P}}$ . Como se mencionó anteriormente, el enfoque mostrado en la Sección 2.4 nos permite obtener  $\vec{\mathcal{P}}$  sin error por integración numérica. La Fig. 4.1(a) muestra que  $\mathcal{P}_{\parallel}$  es siempre positivo, por lo que los resultados previos que muestran  $\mathcal{P}_{\parallel} < 0$  son incorrectos,<sup>3</sup> y podrían estar causados por una convergencia numérica deficiente en cálculo de la integral de superficie [Ec. 2.11].

El momento lineal,  $\Delta\vec{\mathcal{P}}$ , transferido del electrón rápido a la NP se calcula dividiendo el espacio de frecuencias en cuatro regiones  $I_1$  a  $I_4$ , ejemplificadas en la Fig. 2.2(a). Se elige la frecuencia de corte  $\omega_c$  en base a la Fig. 2.3 (ver Sección 2.6), y se emplea la cuadratura de Gauss-Kronrod (GKQ) para integrar numéricamente  $\vec{\mathcal{P}}$  sobre las regiones  $I_1$  a  $I_3$ . En la Fig. 4.2(a) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  (rectángulos negros) en función del parámetro de impacto  $b$  del electrón rápido y considerando  $v = 0.5c$ , mientras que en la Fig. 4.2(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de la velocidad  $v/c$  del electrón rápido y considerando  $b = 50.5$  nm de parámetro de impacto. Adicionalmente, en la Fig. 4.2 se muestran las contribuciones eléctrica ( $\Delta P_{\perp}^E$ , círculos rojos) y magnética ( $\Delta P_{\perp}^H$ , triángulos azules) a

<sup>3</sup>Un argumento adicional que refuerza esta afirmación es el hecho de que  $\mathcal{P}_{\parallel} < 0$  equivaldría a que el electrón rápido gana energía en vez de perderla.

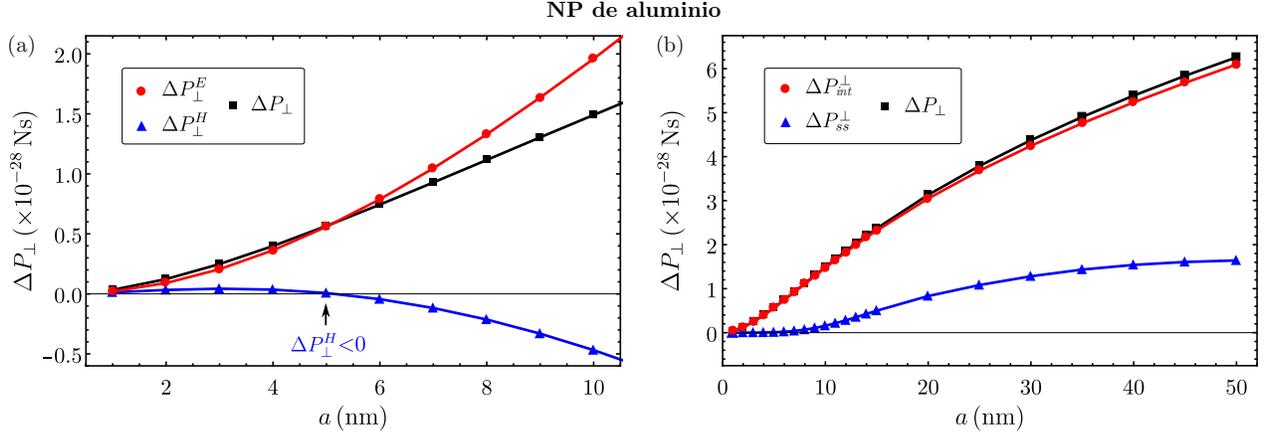


**Figura 4.2:** Momento lineal transversal ( $\Delta P_{\perp}$ , rectángulos negros) transferido de un electrón rápido a una NP de aluminio con  $a = 50$  nm, (a) en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$ , y (b) en función de  $v/c$  y considerando  $b = 50.5$  nm. Los círculos rojos representan la contribución eléctrica a  $\Delta P_{\perp}$  y los triángulos azules la contribución magnética a  $\Delta P_{\perp}$ . Las líneas roja, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

$\Delta P_{\perp}$ . Se refiere al lector a las Figs. D.1(c) y D.1(d) del Apéndice D para los resultados del momento lineal longitudinal transferido a la NP de aluminio. Existen dos características importantes a resaltar en la Fig. 4.2: (i)  $\Delta P_{\perp}$  es positivo, y decrece cuando  $b$  y  $v$  aumentan; y (ii) la contribución eléctrica (círculos rojos) es positiva, mientras que la contribución magnética (triángulos azules) es negativa, ambas contribuciones son del mismo orden de magnitud, pero la contribución eléctrica es mayor que la magnética. Por un lado, el punto (i) implica que la NP es siempre atraída hacia la trayectoria del electrón rápido, al igual que en el caso de NP pequeña. Por otro lado, el punto (ii) muestra un comportamiento distinto al mostrado en el caso de NP pequeña (Sección 3.1), en donde se encontró que la contribución magnética al momento lineal transferido ( $\Delta P_{\perp}^H$ ) era siempre positiva y de un orden de magnitud menor a la contribución eléctrica (comparar círculos rojos y triángulos azules en la Fig. 3.2). Para entender a detalle los efectos que ocurren al incrementar el tamaño de la NP, en la siguiente sección se estudia a  $\Delta P_{\perp}$  en función del radio  $a$  de la NP y en función del número máximo de multipolos  $\ell_{\max}$  considerados en los campos electromagnéticos.

#### 4.1.1. Relación del tamaño de la nanopartícula y el número máximo de multipolos con el momento lineal transferido

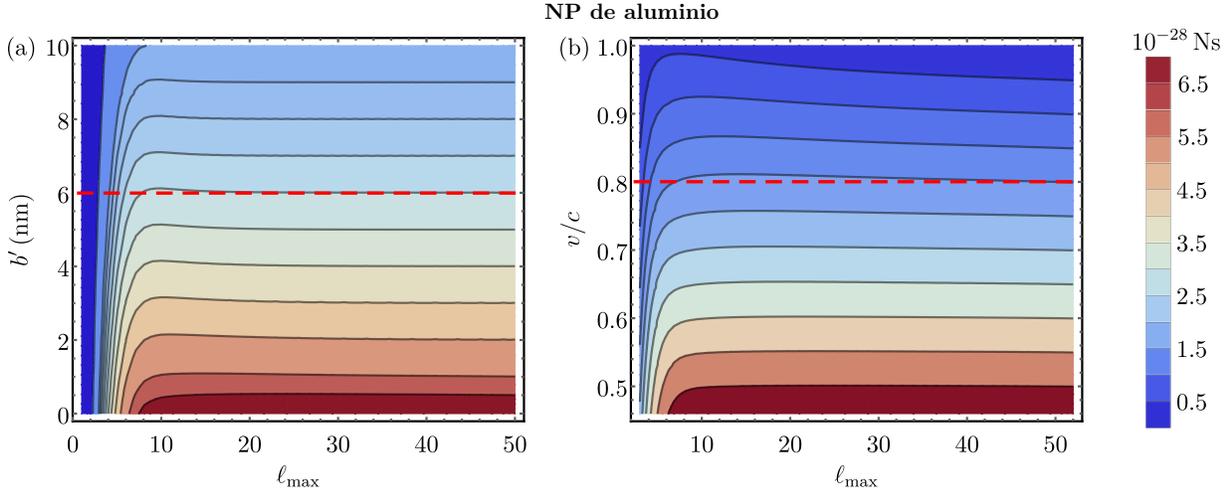
Como se mencionó en la Sección 4.1, el comportamiento de las contribuciones eléctricas y magnéticas a  $\Delta \vec{P}$  cambia al incrementar el tamaño de la NP. Para entender esto a más detalle, en la Fig. 4.3(a) se muestra a  $\Delta P_{\perp}$  (línea y rectángulos negros) en función del radio  $a$  de la NP de aluminio, considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y con un parámetro de impacto  $b' = b - a = 0.5$  nm medido desde la superficie de la NP. En la Fig. 4.3(a) se muestra la contribución eléctrica (línea y círculos rojos) y magnética (línea y triángulos azules) a  $\Delta P_{\perp}$ . Por un lado, para radios  $a$  pequeños las líneas roja y azul son positivas, y la línea roja tiene una magnitud mayor a la azul. Para  $a \approx 5$  nm (indicado con una flecha vertical negra) la línea azul cruza por cero. A medida que  $a$  incrementa, la magnitud de la línea azul incrementa, sin embargo la magnitud de la línea roja es mayor, y  $\Delta P_{\perp}$  (línea negra) es siempre positivo y crece con  $a$ . Por otro lado, en la Fig. 4.3(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  (línea y rectángulos negros) en función del radio  $a$  de la NP de aluminio, considerando  $v = 0.5c$  y



**Figura 4.3:** Momento lineal transversal ( $\Delta P_{\perp}$ , rectángulos negros) transferido de un electrón rápido a una NP de aluminio, en función del radio  $a$  de la NP y considerando como constante el parámetro de impacto medido desde la superficie de la NP,  $b' = b - a = 0.5$  nm. (a)  $\Delta P_{\perp}$  junto con sus contribuciones eléctrica (círculos rojos) y magnética (triángulos azules). (b)  $\Delta P_{\perp}$  junto a su contribución del término de interacción [círculos rojos, Ec. (2.21)] y su contribución del término de esparcimiento [triángulos azules, Ec. (2.19)]. Las líneas roja, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

$b' = 0.5$  nm. En este caso, se muestran las contribuciones del término de interacción ( $\Delta P_{int}^{\perp}$ , línea y círculos rojos) y del término de esparcimiento ( $\Delta P_{ss}^{\perp}$ , línea y triángulos azules) a  $\Delta P_{\perp}$  (ver Sección 2.1). Se observa que la línea roja es mucho mayor a la línea azul (aumentada 10 veces), y la línea roja sigue de cerca a la línea negra. Para radios grandes de la NP (ver  $a = 50$  nm), la contribución de la línea azul incrementa pero siendo mucho menor a la línea roja. Como se discutió en la Sección 2.1, el término de esparcimiento está relacionado con la reacción de radiación (o autofuerza) por parte de la NP. Por lo que es posible afirmar que la interacción del campo electromagnético externo con las cargas y corrientes inducidas en la NP ( $\Delta P_{int}^{\perp}$ ) es el principal mecanismo responsable de la transferencia de momento lineal de electrones rápidos con NPs. El momento lineal asociado a los campos electromagnéticos radiados por la NP ( $\Delta P_{ss}^{\perp}$ ) es muy pequeño, y es cero en límite de NP pequeña.<sup>56</sup> Para  $\Delta P_{\parallel}$  se observó un comportamiento similar que para  $\Delta P_{\perp}$ , por lo que no se muestra.

Es importante caracterizar el comportamiento de  $\Delta \vec{P}$  en función del número máximo de multipolos  $\ell_{max}$  considerados en los campos electromagnéticos esparcidos y externos [Ecs. (2.35), (2.36), (2.56) y (2.60)], de esta forma será posible determinar si la elección de  $\ell_{max} = 50$  es suficiente para lograr convergencia numérica. En la Fig. 4.4(a) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en escala de color en función de  $\ell_{max}$  y en función del parámetro de impacto, medido desde la superficie de la NP,  $b' = b - a$ , y en la Fig. 4.4(b) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $\ell_{max}$  y en función de  $v/c$ . Se observa, que  $\Delta P_{\perp}$  cambia de color rojo a azul, indicando que disminuye, cuando  $b'$  y  $v$  incrementan. Se observa que  $\Delta P_{\perp}$  es siempre positivo. Además, se muestran curvas de nivel para las cuales el valor de  $\Delta P_{\perp}$  es constante. Con el fin de ejemplificar el comportamiento asintótico de  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $\ell_{max}$ , se muestran líneas rojas punteadas a  $b' = 6$  nm en la Fig. 4.4(a) y  $v = 0.8c$  en la Fig. 4.4(b). A partir de las curvas de nivel, es posible notar que  $\Delta P_{\perp}$  crece con  $\ell_{max}$  y se maximiza cerca de  $\ell_{max} \approx 10$ , posteriormente decrece aproximándose de manera asintótica a la línea roja punteada. Esto indica que los primeros multipolos  $\ell_{max} \lesssim 10$  contribuyen de manera positiva (atractiva) a  $\Delta P_{\perp}$ , mientras que los multipolos de alto orden  $\ell_{max} \gtrsim 10$  contribuyen de manera negativa (repulsiva) a  $\Delta P_{\perp}$  (de manera similar a



**Figura 4.4:** Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido a una NP de aluminio con  $a = 50$  nm de radio. (a)  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $\ell_{\max}$  y en función de  $b' = b - a$ , considerando  $v = 0.5c$ . (b)  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $\ell_{\max}$  y en función de  $v/c$ , considerando  $b = 50.5$  nm. Se muestran curvas de nivel para  $\Delta P_{\perp}$ , y se resalta con una línea punteada roja su comportamiento asintótico para (a)  $b' = 6$  nm y (b)  $v = 0.8c$ .

lo mostrado en la Fig. 1.4). Sin embargo  $\Delta P_{\perp}$  es siempre positivo, indicando que la NP es siempre atraída hacia la trayectoria del electrón rápido.

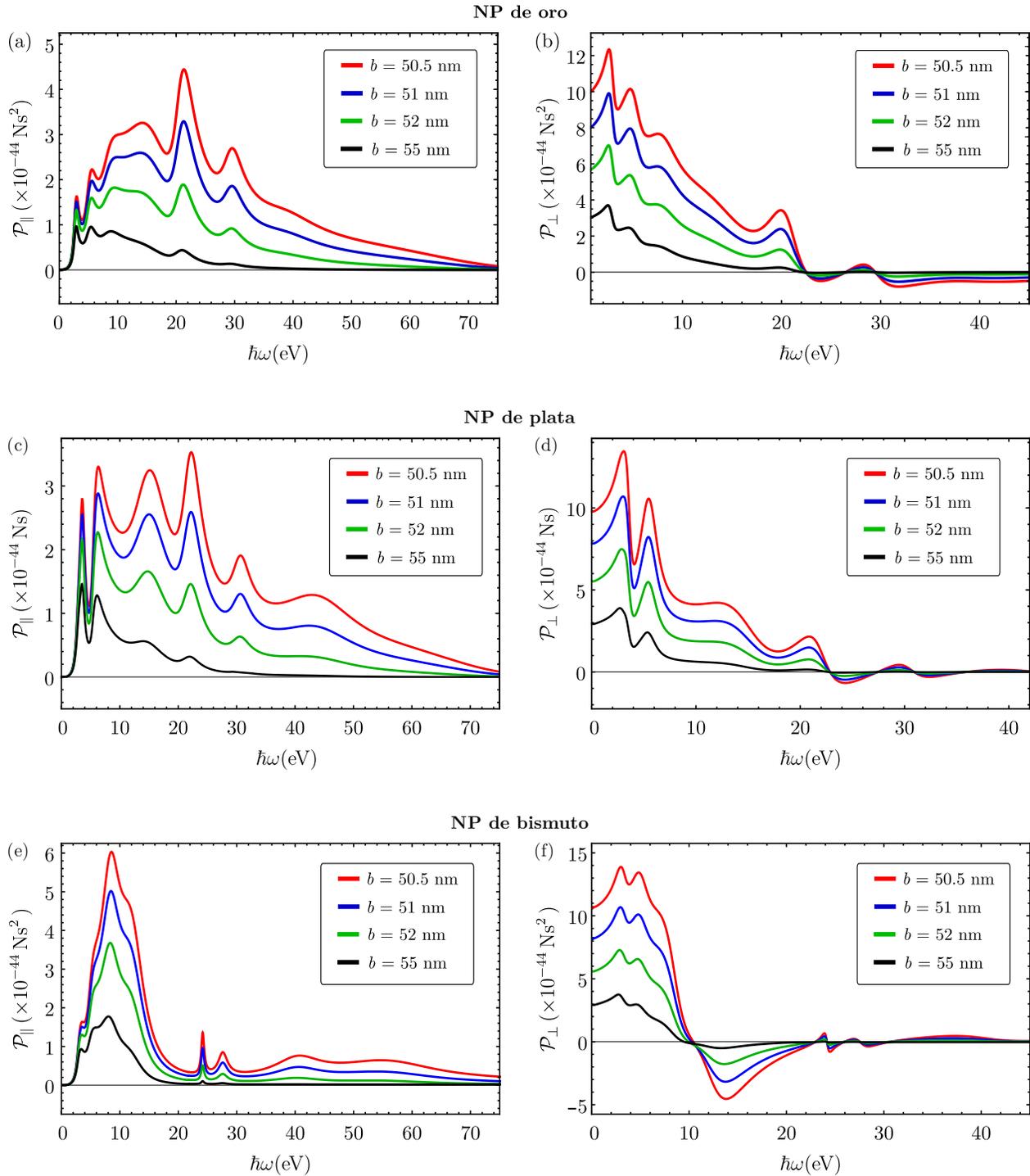
A partir de la Fig. 4.4, es posible identificar que la tasa de convergencia de  $\Delta P_{\perp}$  disminuye para parámetros de impacto  $b$  (o  $b'$ ) pequeños y velocidades cercanas a  $c$ , siendo necesario considerar un mayor número de multipolos  $\ell_{\max}$  para estos casos. Los resultados mostrados en este trabajo son correctos hasta al menos la tercera cifra decimal significativa. Esto puede verse de forma cualitativa en la Fig. 4.4, en donde es posible notar que las líneas rojas punteadas y su correspondiente curva de nivel están sobrepuestas para  $\ell_{\max} = 50$ .

## 4.2. Nanopartículas de oro, plata, y bismuto

Al igual que en la Sección 3.2, con el fin de analizar un caso más realista, se consideran NPs de 50 nm de radio hechas de oro, plata, y bismuto. Para describir la respuesta electromagnética de dichos metales, se consideró una función dieléctrica a partir de los datos experimentales reportados por Werner et al.<sup>51</sup> En la Fig. 4.5, se muestra la contribución espectral al momento lineal  $\vec{P}$  para NPs de oro, plata, y bismuto, de 50 nm de radio. En la columna izquierda de la Fig. 4.5, etiquetas (a), (c), y (e), se muestra  $\mathcal{P}_{\parallel}$ , mientras que la columna derecha de la Fig. 4.5, etiquetas (b), (d), y (f), se muestra  $\mathcal{P}_{\perp}$ , para una NP de oro, plata, y bismuto, respectivamente.

La Fig. 4.5 presenta similitudes con su contraparte de NP pequeña, mostrada en la Fig. 3.6. Sin embargo, existe una importante diferencia: cuando el tamaño de la NP incrementa, la contribución de las resonancias de alta energía disminuye, como se observa al comparar la altura relativa de los picos cercanos a  $\hbar\omega \approx 22$  eV en las Figs. 4.5(c) y 3.6(c) para la NP de plata, y la altura relativa de los picos cercanos a  $\hbar\omega \approx 60$  eV en las Figs. 4.5(e) y 3.6(e) para la NP de bismuto.

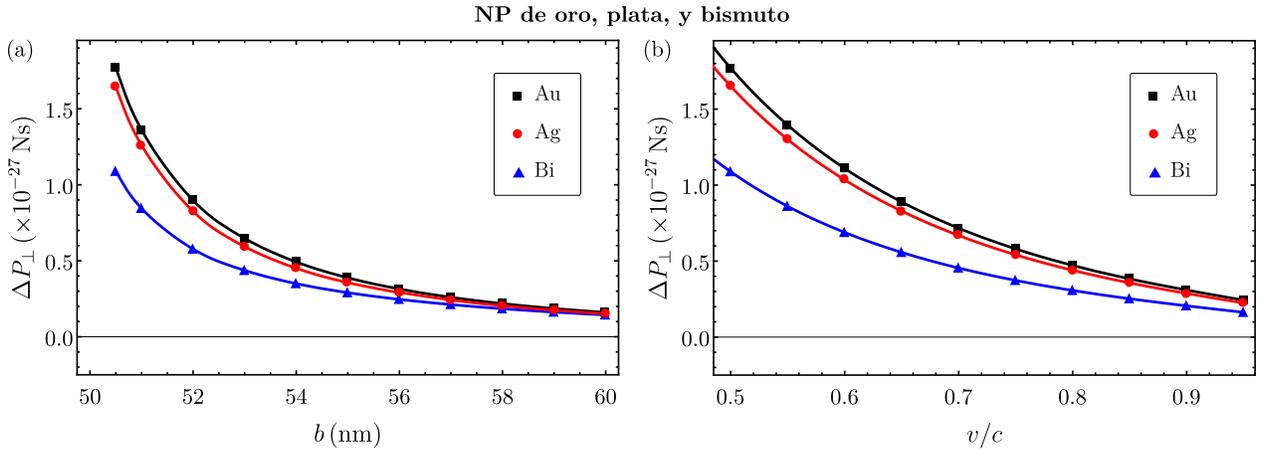
Usando la metodología descrita en las Sección 2.6, es posible obtener  $\Delta\vec{P}$  para NPs de  $a = 50$  nm hechas de oro, plata, y bismuto, con una precisión de al menos tres cifras significativas. Para ello, se divide el espacio de frecuencias en cuatro regiones, mostradas en colores verde, rojo, amarillo, y



**Figura 4.5:** Contribución espectral al momento lineal longitudinal  $\mathcal{P}_{\parallel}$  transferido a una NP de  $a = 50$  nm de radio hecha de (a) oro, (c) plata, y (e) bismuto. Contribución espectral al momento lineal transversal  $\mathcal{P}_{\perp}$  transferido a una NP de  $a = 50$  nm de radio hecha de (b) oro, (d) plata, y (f) bismuto, para un electrón rápido con  $v = 0.5c$ , considerando  $b = 50.5$  nm (línea roja), 51 nm (línea azul), 52 nm (línea verde) y 55 nm (línea negra).

azul en la Fig. 2.2(b) para la NP pequeña de oro. La región azul es usada para estimar la frecuencia de corte  $\omega_c$  usando la cuadratura Exp-Sinh, y en las regiones verde, rojo y amarillo, se usa como método de integración numérica la GKQ. Las regiones del espacio de frecuencias empleadas para las NPs grandes de oro, plata, y bismuto, son similares al caso de NP pequeña de oro, por lo que no se muestran.

En la Fig. 4.6 se muestra el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido de un electrón rápido a una NP de oro (rectángulos negros), plata (círculos rojos), y bismuto (triángulos azules). En la Fig. 4.6(a) se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función del parámetro de impacto  $b$  y considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$ , mientras que en la Fig. 4.6(b), se muestra  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $v/c$  y considerando  $b = 50.5$  nm. La componente longitudinal del momento lineal transferido para los tres materiales se muestra en las Figs. D.2(c) y D.2(d) del Apéndice D. Se observan dos características importantes en las Figs. 4.6(a) y 4.6(b): (i)  $\Delta P_{\perp}$  es positivo para las tres curvas; (ii) Los rectángulos negros y los círculos rojos tienen magnitudes similares, mientras que los triángulos azules tiene una magnitud menor; podemos concluir que el momento lineal transversal transferido a NPs de oro, plata, y bismuto, es siempre atractivo, a pesar de las contribuciones repulsivas a altas energías, observadas en la contribución espectral al momento lineal (ver Fig. 4.5).

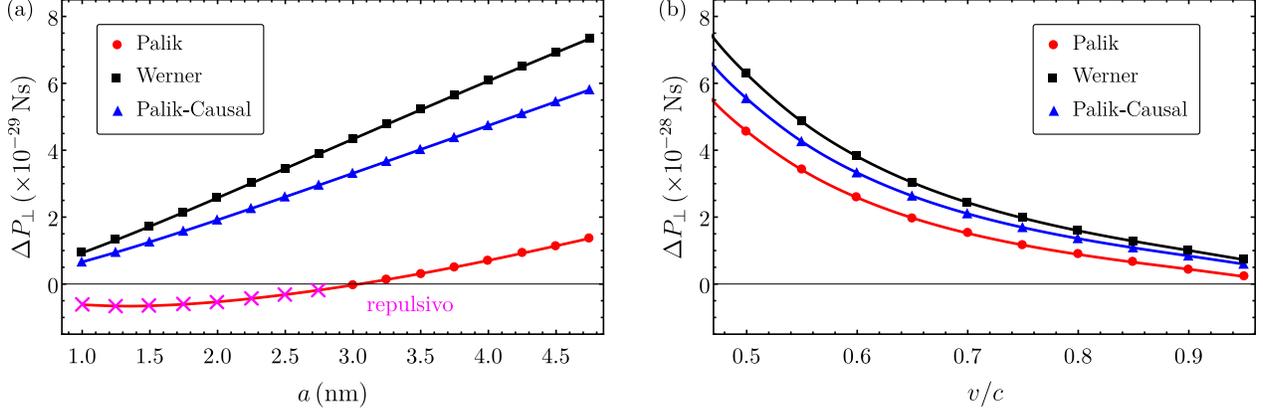


**Figura 4.6:** Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido de un electrón rápido a una NP de  $a = 50$  nm de radio. (a)  $\Delta P_{\perp}$  en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$ , y (b)  $\Delta P_{\perp}$  función de  $v/c$  y considerando  $b = 50.5$  nm. Los círculos rojos consideran una NP hecha de plata, los rectángulos negros de oro, y los triángulos azules de bismuto. Las líneas rojas, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

Es importante recalcar que la función dieléctrica para las NPs mostradas en esta sección, fue considerada como una función analítica ajustada a partir de los datos experimentales de Werner et al,<sup>51</sup> por lo tanto es una función causal. Sin embargo resulta interesante analizar el efecto que produce una función dieléctrica no causal en el momento lineal transferido a NPs grandes, lo cual se mostrará en la siguiente sección.

#### 4.2.1. Interacción repulsiva en una nanopartícula no causal de oro

Como se discutió en la Sección 3.3, una no causalidad del orden de decenas de attosegundos puede dar lugar a un momento lineal repulsivo transferido a la NP. Sin embargo este efecto repulsivo es incorrecto y aparece cuando el tiempo de interacción entre el electrón rápido y la NP es del mismo orden que la no causalidad de la función dieléctrica de la NP. En la Sección 3.1.1 se designó a



**Figura 4.7:** (a) Momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido a una NP de oro en función del radio  $a$  de la NP, considerando  $v = 0.5c$  y un parámetro de impacto  $b' = b - a = 0.3$  nm. (b)  $\Delta P_{\perp}$  en función  $v/c$  y considerando  $a = 10$  nm y  $b' = 0.5$  nm. La círculos rojos representan a  $\Delta P_{\perp}$  considerando la función dieléctrica tomada de los datos experimentales compilados por Palik,<sup>29</sup> los rectángulos negros considerando la función dieléctrica reportada por Werner et al.<sup>51</sup>, y los triángulos azules considerando la función dieléctrica de Palik después de forzar causalidad [Palik-Causal, Ec. (3.17)]. Las líneas roja, negra, y azul, se muestran como guía a la vista. Las cruces magenta indican  $\Delta P_{\perp} < 0$ , es decir repulsivo.

$\tau_0 = b/\gamma v$  como un parámetro que caracteriza el tiempo de interacción interpartícula.

Es interesante notar que, por simplicidad, en este trabajo estamos considerando trayectorias del electrón rápido que no penetran a la NP, es decir  $b > a$ . Por lo que para NPs grandes como las mostradas en este capítulo, es necesario considerar parámetros de impacto grandes. Para una NP de 50 nm de radio y un electrón rápido con  $v = 0.5c$  viajando a  $b' = 0.5$  nm de parámetro de impacto desde la superficie de la NP, el tiempo de interacción característico es  $\tau_0 \approx 390$  as. Por lo tanto, el pre-eco mostrado en la Fig. 3.9 para la NP de oro, descrita con una función dieléctrica tomada de los datos experimentales compilados por Palik,<sup>29</sup> conduce a resultados que muestran una interacción repulsiva entre electrones rápidos y NPs pequeñas de 1 nm de radio. Sin embargo, para NPs de radios  $> 1$  nm dicho pre-eco podría ser irrelevante.

Para estudiar el efecto de la no causalidad en NPs grandes ( $a > 1$  nm), en la Fig. 4.7 se muestra el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido a una NP de oro en función del radio  $a$  de la NP, y para las tres funciones dieléctricas consideradas para el oro: (i) Palik (círculos y línea roja), (ii) Werner (rectángulos y línea negra), y (iii) Palik-Causal [triángulos y línea azul; Ec. (3.17)], considerando  $v = 0.5c$  y un parámetro de impacto  $b' = b - a = 0.3$  nm. Se observa en la Fig. 4.7 que  $\Delta P_{\perp}$  crece cuando  $a$  incrementa. Para los círculos rojos (Palik),  $\Delta P_{\perp}$  es negativo para  $a \lesssim 3$  nm (indicando una interacción repulsiva, mostrada con cruces magenta), pero a medida que  $a$  incrementa,  $\Delta P_{\perp}$  se vuelve positivo. Esta transición de  $\Delta P_{\perp}$  repulsivo a atractivo no está presente para las funciones dieléctricas de Werner (rectángulos negros) y Palik-Causal (triángulos azules). Podemos concluir que la transición a  $\Delta P_{\perp}$  repulsivo no es física, y es causada por la no causalidad en la función dieléctrica usada para caracterizar al oro. Más aún, dado que  $\Delta P_{\perp} < 0$  únicamente sucede para NPs de radio  $a < 3$  nm, se concluye que a medida que el radio de la NP aumenta, la supuesta no causalidad de su función dieléctrica se vuelve menos relevante. En general, los efectos de la no causalidad disminuyen en relevancia al incrementar el tiempo característico de la interacción  $\tau_0 = b/\gamma v$ , es decir al incrementar los parámetros  $a$  y  $b$ , o disminuir  $v$ . Esto puede ser observado en la Fig. 4.7(b) (y también en la Fig. 3.10 del capítulo anterior). Se observa que para NPs de radio de 10 nm, es

decir parámetros de impacto grandes ( $b = 10.5$  nm en este caso), las curvas roja, azul, y negra, son positivas y se encuentran próximas entre sí.

### 4.3. Interacción repulsiva en una nanopartícula cargada

Como se mencionó anteriormente, algunos autores han reportado experimentalmente atracción o repulsión de la NP hacia el haz de electrones.<sup>9–15</sup> Sin embargo, los resultados de este trabajo muestran siempre una interacción atractiva entre el haz de electrones y la NP. Por lo tanto, en esta sección exploramos un posible efecto, no considerado hasta ahora en nuestros cálculos, que podría estar determinando la interacción, atractiva o repulsiva, observada experimentalmente.

Superficies bajo bombardeo de electrones experimentan procesos de desorción de electrones o iones (electron stimulated desorption).<sup>57</sup> Notablemente, se ha reportado que especímenes bajo iluminación en TEMs presentan carga eléctrica.<sup>58</sup> Esta carga eléctrica puede ser negativa y ser causada por atrapamiento de electrones incidentes,<sup>57</sup> pero comúnmente es positiva y se debe a la emisión de electrones secundarios y electrones de Auger.<sup>57,58</sup> Además, la acumulación de múltiples huecos (con carga positiva) en la red del sustrato conduce a la expulsión de iones positivos por repulsión coulombiana.<sup>57,59</sup> No obstante, no se ha dado satisfactoriamente una descripción completa de los diversos procesos de desorción y reabsorción de iones causados por los haces de electrones altamente energéticos empleados comúnmente en espectroscopía electrónica.<sup>58</sup>

Dado que no se conocen a detalle los complejos mecanismos de intercambio de carga involucrados en los experimentos de manipulación de NPs mediante haces de electrones,<sup>9,10</sup> no es posible dar una descripción cuantitativa, desde el punto de vista teórico, de la transferencia de momento observada en dichos experimentos. Sin embargo, al calcular las fuerzas involucradas en la interacción de un electrón rápido y NP cargada, es posible estimar la magnitud de los efectos que el intercambio de carga produciría en la interacción. A continuación se calcula el momento lineal transferido de un electrón rápido a un ion con carga  $q = -Ne$  en la NP. De esta forma, será posible conocer la magnitud de la carga eléctrica negativa en la NP que produce una interacción repulsiva entre la NP y el haz de electrones.

La fuerza que el electrón rápido ejerce sobre ión con carga  $q = -Ne$  situado en el origen, viene dada por la fórmula de la fuerza de Lorentz:

$$\vec{F}_q(t) = q\vec{E}_0^{\text{ext}}(t), \quad (4.1)$$

en donde  $\vec{E}_0^{\text{ext}}(t)$  es el campo eléctrico externo evaluado en el origen. Notemos de la Ec. (4.1) que el término de la fuerza de Lorentz que depende del campo magnético externo no está presente, ya que estamos suponiendo que la carga se encuentra en reposo (al igual que la NP). Remplazando la Ec. (2.24) en la Ec. (4.1), se obtiene

$$\vec{F}_q(t) = -\frac{Ne^2\gamma}{4\pi\epsilon_0} \frac{b\hat{x} + vt\hat{z}}{(b^2 + \gamma^2v^2t^2)^{3/2}}. \quad (4.2)$$

El momento lineal transversal transferido del electrón rápido al ion con carga  $q$  está dado por la

integral de la fuerza transversal [Ec. (4.1)] sobre el espacio de tiempo:

$$\Delta P_{\perp}^q = -\frac{Ne^2\gamma}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{(b^2 + \gamma^2 v^2 t^2)^{3/2}} dt, \quad (4.3)$$

y mediante el cambio de variable  $x = \gamma vt/b$ , se obtiene

$$\Delta P_{\perp}^q = -\frac{Ne^2}{4\pi\epsilon_0 b v} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{3/2}}. \quad (4.4)$$

La integral de la Ec. (4.4) puede ser calculada mediante sustitución trigonométrica, de donde se obtiene:

$$\Delta P_{\perp}^q = -\frac{Ne^2}{2\pi\epsilon_0 b v}. \quad (4.5)$$

Para un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y  $b = 50.5$  nm viajando en la vecindad de una NP de aluminio de 50 nm de radio,  $\Delta P_{\perp} \approx 6.3 \times 10^{-28}$  N/s, mientras que

$$\Delta P_{\perp}^q \approx -6N \times 10^{-29} \text{N/s}. \quad (4.6)$$

Lo cual que significa que si  $N > 11$ , el momento lineal transferido a la NP es repulsivo. Por otro lado, si consideramos una NP pequeña de aluminio de 1 nm de radio y un electrón rápido con  $v = 0.5c$  y  $b = 1.5$  nm, tenemos que  $\Delta P_{\perp} \approx 3.3 \times 10^{-30}$  N/s, mientras que

$$\Delta P_{\perp}^q \approx -2N \times 10^{-27} \text{N/s}. \quad (4.7)$$

En el caso de NP pequeña,  $N = 1$  es suficiente para obtener una interacción repulsiva entre el electrón rápido y la NP. Lo anterior muestra que en el caso de que las NPs bajo exposición del haz de electrones se carguen eléctricamente, la interacción estaría determinada por la magnitud y signo de la carga eléctrica de la NP. Por tanto, es de interés realizar estudios detallados que exploren los efectos de intercambio de carga eléctrica en la interacción de electrones rápidos y NPs.

---

## Conclusiones

---

En esta tesis doctoral se estudió teóricamente la interacción entre un haz de electrones, como aquellos producidos en microscopios electrónicos de transmisión y barrido, y una nanopartícula esférica. En particular, dicha interacción se estudió a partir del momento lineal transferido de un electrón rápido a una nanopartícula, usando la solución retardada a las ecuaciones de Maxwell en el espacio de frecuencias. El tamaño de la nanopartícula, la velocidad del electrón y el parámetro de impacto, se consideraron de acuerdo a observaciones de microscopía electrónica, asumiendo que el electrón rápido viaja por fuera la nanopartícula.

El momento lineal transferido a la nanopartícula,  $\Delta\vec{P}$ , fue calculado a partir de una integral sobre el espacio de frecuencias de la contribución espectral al momento lineal,  $\vec{P}$ . Este último es obtenido mediante una integral de superficie cerrada alrededor de la nanopartícula. Para ello se presentaron dos métodos distintos: (i) método numérico, que consiste en usar la representación cartesiana de los campos electromagnéticos externos y la cuadratura de Gauss-Kronrod para calcular la integral de superficie cerrada; y (ii) método analítico, que consiste en emplear la representación multipolar esférica de los campos electromagnéticos externos para calcular analíticamente la integral de superficie cerrada. Debido a limitaciones computacionales, el método analítico limitó el número máximo de multipolos que pueden ser considerados en los campos electromagnéticos esparcidos, restringiendo el estudio a nanopartículas pequeñas de 1 nm de radio. En contraste, el método analítico permitió estudiar nanopartículas de hasta 50 nm de radio. Posteriormente, se emplearon las cuadraturas Exp-Sinh y Gauss-Kronrod para calcular numéricamente la integral de  $\vec{P}$  sobre el espacio de frecuencias. La cuadratura Exp-Sinh (método Doble-Exponencial) se usó para encontrar una frecuencia de corte  $\omega_c$  que proporcionara la precisión numérica deseada, dado el parámetro de impacto y la velocidad del electrón. Posteriormente, se dividió el intervalo  $(0, \omega_c)$  en tres regiones, cada una integrada usando la cuadratura de Gauss-Kronrod. El error numérico en los resultados presentados en esta tesis es lo suficientemente pequeño para asegurar que las primeras tres cifras significativas de  $\Delta\vec{P}$  son correctas.

Primero se estudió el caso de una nanopartícula de aluminio de 1 nm de radio, caracterizando su respuesta electromagnética por una función dieléctrica dada por el modelo de Drude, el cual es un modelo causal (es decir cumple las relaciones de Kramers-Kronig). Se mostró que el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , transferido de un electrón rápido a una nanopartícula de aluminio de 1 nm de radio es siempre positivo, indicando que la nanopartícula es atraída hacia la trayectoria del electrón rápido. Se encontró que una convergencia numérica deficiente en la integral en el espacio de frecuencias puede llevar a resultados repulsivos incorrectos, como es el caso de aquellos reportados en la referencia [26]. Se estudió la interacción entre un electrón rápido y una nanopartícula en función del tiempo, mostrando que el tiempo de interacción entre el electrón rápido y la nanopartícula es

del orden de decenas de attosegundos, y a pesar de que el momento lineal transferido es siempre atractivo, existen fuerzas de interacción repulsivas para algunos tiempos, y que son causadas por un retraso en la respuesta de la nanopartícula a los campos electromagnéticos externos. También se estudió el caso de nanopartículas de oro, plata, y bismuto, de 1 nm de radio, considerando su función dieléctrica como una función analítica causal ajustada a partir de datos experimentales reportados por Werner et al.<sup>51</sup> A partir de los resultados obtenidos, se mostró que  $\Delta P_{\perp}$  para estas nanopartículas también es siempre atractivo, indicando que un momento lineal repulsivo tampoco está presente en nanopartículas causales hechas de estos materiales.

Se realizó un análisis de los efectos que produce en el momento lineal transferido una respuesta electromagnética de la nanopartícula no causal. Se encontró que cuando la no causalidad es del mismo orden de magnitud que el tiempo de interacción entre el electrón rápido y la nanopartícula (decenas de attosegundos), el momento lineal transversal transferido a la nanopartícula puede ser negativo, indicando una interacción repulsiva. Sin embargo, esta interacción repulsiva es el resultado de suponer una respuesta no causal de la nanopartícula, y por lo tanto es un resultado no físico. También se estudió el caso de una nanopartícula de oro considerando dos funciones dieléctricas: (i) una obtenida de datos experimentales compilados de distintos experimentos por Palik,<sup>29</sup> la cual se mostró que es no causal; y (ii) otra que resulta ser causal, ajustada por Werner et al. a partir de sus datos experimentales.<sup>51</sup> Para el caso no causal (Palik), se encontró una transición a interacción repulsiva para  $v \approx 0.75c$  y  $b = 1.5$  nm. Este comportamiento repulsivo no está presente para la nanopartícula causal de oro (Werner), y notablemente, la interacción repulsiva desaparece al forzar la causalidad en la función dieléctrica de Palik. Por lo tanto, la no causalidad en la función dieléctrica de Palik da lugar a resultados repulsivos incorrectos, este podría ser el caso de las referencias [26–28], que emplearon los datos de Palik. Concluimos que tanto la causalidad como una adecuada convergencia numérica son esenciales para obtener resultados físicamente correctos.

En esta tesis de doctorado se reportó por primera vez, hasta donde se tiene conocimiento, resultados cuantitativamente válidos (garantizando convergencia numérica de al menos tres cifras significativas) para nanopartículas grandes de hasta 50 nm de radio, empleando las expresiones analíticas de la contribución espectral al momento lineal desarrolladas en este trabajo. Para una nanopartícula de aluminio de 50 nm de radio, se encontró que la contribución espectral al momento lineal longitudinal es siempre positiva, contrariamente a lo que estudios previos habían mostrado.<sup>26</sup> Al incrementar el tamaño de la nanopartícula, la contribución al momento lineal asociada a los multipolos de alto orden incrementa, y la contribución de los campos magnéticos cambia de positiva (atracción) a negativa (repulsión). En contraste, la contribución de los campos eléctricos siempre es positiva (atracción). Para nanopartículas grandes, las contribuciones al momento lineal de los campos eléctrico y magnético son del mismo orden de magnitud y de signo contrario, sin embargo, la magnitud de la contribución eléctrica es mayor. Por lo tanto, el momento lineal transversal,  $\Delta P_{\perp}$ , es siempre positivo, indicando que la nanopartícula es atraída hacia la trayectoria del electrón rápido. Este comportamiento atractivo también se observó para el caso de nanopartículas de 50 nm de radio hechas de oro, plata, y bismuto, considerando su función dieléctrica a partir del ajuste causal de los datos experimentales de Werner et al.

Se mostró que es posible separar al momento lineal transferido,  $\Delta P_{\perp}$ , en tres contribuciones: (i) un término que depende únicamente de los campos electromagnéticos externos y que no contribuye a  $\Delta P_{\perp}$ ; (ii) un término de esparcimiento, que depende únicamente de los campos electromagnéticos

esparcidos y que está relacionado con la autofuerza o reacción de radiación por parte de la nanopartícula; y (iii) un término de interacción, que depende tanto de los campos electromagnéticos externos como de los esparcidos. Se mostró que la mayor parte del momento lineal transferido proviene del término de interacción. Para nanopartículas grandes, la contribución al momento lineal que proviene del término de esparcimiento es al menos un orden de magnitud menor a la contribución del término de interacción. A partir de estos resultados, se concluye que la mayor parte del momento lineal proviene de la interacción de los campos electromagnéticos externos con las cargas y corrientes inducidas en la nanopartícula. También se calculó el momento lineal transferido en función del número máximo de multipolos considerados en los campos electromagnéticos externos y esparcidos. Se encontró que la contribución al momento lineal de los primeros multipolos ( $\ell_{\max} \lesssim 10$ ) es positiva, mientras que la contribución de los multipolos de alto orden ( $\ell_{\max} \gtrsim 10$ ) es negativa. Además, la tasa de convergencia del momento lineal respecto a  $\ell_{\max}$  disminuye al incrementar el radio  $a$  de la nanopartícula y la velocidad  $v$  del electrón y disminuir el parámetro de impacto  $b$ . Es decir que, cuando  $v$  y  $a/b$  incrementan, es necesario incrementar  $\ell_{\max}$  para lograr la convergencia numérica.

En este trabajo, se definió a  $\tau_0 = b/\gamma v$  como una medida característica del tiempo de interacción entre el electrón rápido y la nanopartícula. Se mostró que  $\tau_0$  es del orden de centenas de attosegundos para nanopartículas grandes de 50 nm de radio, por lo que la no causalidad en la función dieléctrica de Palik es irrelevante para nanopartículas grandes de oro. Se obtuvo el momento lineal transferido a nanopartículas de oro en función del radio de la nanopartícula, considerando los casos de Palik, y Werner, para su función dieléctrica tomada de datos experimentales. Se mostró que nanopartículas de radio  $a < 3$  nm, la no causalidad en la función dieléctrica de Palik da lugar a momento lineal transversal negativo (repulsivo). Sin embargo, a medida que el radio de la nanopartícula incrementa, el momento lineal transversal se vuelve positivo (atractivo). Es decir, la relevancia de la no causalidad disminuye al incrementar el tiempo característico de la interacción  $\tau_0$ .

Los resultados obtenidos en este trabajo muestran que el momento lineal transferido a nanopartículas causales es siempre atractivo hacia la trayectoria del electrón rápido, independientemente del tamaño de la nanopartícula, parámetro de impacto o velocidad del electrón rápido. Sin embargo, observaciones experimentales muestran una interacción repulsiva entre el haz de electrones y la nanopartícula,<sup>9-15</sup> y algunos autores han reportado efectos de carga eléctrica en los especímenes bajo iluminación en microscopios electrónicos de transmisión.<sup>58</sup> Se realizó una estimación teórica del efecto sobre el momento lineal transferido causado por la presencia de carga eléctrica en la nanopartícula. Se concluyó que la presencia de unos cuantos iones con carga eléctrica negativa podrían dar lugar a una interacción repulsiva entre el electrón rápido y la nanopartícula. Más aún, la interacción estaría dominada por el signo y la magnitud de la carga eléctrica en la nanopartícula. Sin embargo, son necesarios estudios adicionales que exploren este y otros efectos como posible explicación de la interacción repulsiva.

## Método del potencial escalar: cálculo de los campos electromagnéticos externos y esparcidos

Partiendo de las ecuaciones de Maxwell macroscópicas en el espacio de frecuencias:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext}, \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \times \vec{E} = i\omega\vec{B}, \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J}_{ext} - i\omega\vec{D}, \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (\text{A.4})$$

las cuales, al ser desacopladas se obtienen las ecuaciones de Helmholtz con fuentes:

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{E} = \frac{1}{\varepsilon} \nabla \rho_{ext} - i\omega\mu\vec{J}_{ext}, \quad (\text{A.5})$$

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{H} = -\nabla \times \vec{J}_{ext}, \quad (\text{A.6})$$

en donde  $k^2 = \omega^2\varepsilon\mu$ , y se consideran las relaciones constitutivas  $\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$  y  $\vec{B} = \mu\vec{H}$ , donde  $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$  y  $\mu = \mu(\omega)$  son funciones homogéneas en el espacio.

Si no existen fuentes de carga y corriente externas, las Ecs. (A.5) y (A.6) se reducen a las ecuaciones de Helmholtz sin fuentes:

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

$$(\nabla^2 + k^2) \vec{H} = 0. \quad (\text{A.8})$$

A continuación, se emplea el método de potencial escalar descrito por F. J. García de Abajo<sup>33,52</sup> para resolver las Ecs. (A.7) y (A.8).

El campo eléctrico  $\vec{E}$  puede ser escrito de la siguiente manera:<sup>53</sup>

$$\vec{E} = \nabla \frac{1}{\nabla^2} (\nabla \cdot \vec{E}) + \vec{L} \frac{1}{L^2} (\vec{L} \cdot \vec{E}) - (\nabla \times \vec{L}) \frac{1}{L^2 \nabla^2} [(\vec{L} \times \nabla) \cdot \vec{E}], \quad (\text{A.9})$$

en donde  $\vec{L} = -i\vec{r} \times \nabla$  es el operador de momento angular orbital. A partir de la Ec. (A.9) es posible

definir las funciones escalares: longitudinal, eléctrica y magnética:<sup>53</sup>

$$\psi^L = \frac{1}{\nabla^2} \nabla \cdot \vec{E}, \quad (\text{A.10})$$

$$\psi^E = \frac{-ik}{L^2 \nabla^2} (\vec{L} \times \nabla) \cdot \vec{E}, \quad (\text{A.11})$$

$$\psi^M = \frac{1}{L^2} \vec{L} \cdot \vec{E}, \quad (\text{A.12})$$

en donde cada una cumple la ecuación escalar de Helmholtz sin fuentes:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi^{(L,E,M)} = 0. \quad (\text{A.13})$$

Entonces, a partir de las Ecs. (A.9) a (A.12), es posible escribir los campos electromagnéticos en términos de los potenciales escalares:<sup>33,52</sup>

$$\vec{E} = \nabla \psi^L + \vec{L} \psi^M - \frac{i}{k} \nabla \times \vec{L} \psi^E, \quad (\text{A.14})$$

$$\vec{H} = -\frac{i}{k} \nabla \times \vec{L} \psi^M - \vec{L} \psi^E. \quad (\text{A.15})$$

Es importante notar que los campos electromagnéticos externos en el límite de campo lejano  $r \rightarrow \infty$ , se pueden expresar como una superposición de ondas planas con número de onda  $\vec{k}$ , perpendicular a los campos eléctrico y magnético. Por lo tanto, la función escalar  $\psi^L$  no aparece en la solución a las ecuaciones de Helmholtz [Ecs. (A.14) y (A.15)], y las funciones escalares restantes pueden ser expresadas de la siguiente manera:<sup>33</sup>

$$\psi^{E,\text{ext}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (i)^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{E,\text{ext}}, \quad (\text{A.16})$$

$$\psi^{M,\text{ext}}(\vec{r}) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (i)^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell,m}(\Omega_r) \psi_{\ell,m}^{M,\text{ext}}, \quad (\text{A.17})$$

donde  $j_\ell(x)$  son las funciones esféricas de Bessel,  $Y_{\ell,m}$  son los armónicos esféricos,  $(r, \Omega_r)$  son las coordenadas esféricas de  $\vec{r}$ , y  $\psi_{\ell,m}^{E,\text{ext}}$  y  $\psi_{\ell,m}^{M,\text{ext}}$  son funciones escalares aun por determinar. Las expresiones de las Ecs. (A.16) y (A.17) son válidas en la región  $a < r < b$  (con  $a$  el radio de la NP y  $b$  el parámetro de impacto del electrón medido desde el centro de la NP). Por esta razón, se elige a la superficie  $S$  de la Ec. (2.1) de tal manera que no interseque a la trayectoria del electrón rápido.

Como se mencionó en la Sección 2.2, el campo eléctrico externo puede calcularse a partir de la función de Green:<sup>33,52</sup>

$$\vec{E}^{\text{ext}}(\vec{r}) = \left( \nabla - \frac{ik\vec{v}}{c} \right) \int dt e^{i\omega t} G_0(\vec{r} - \vec{r}_t), \quad (\text{A.18})$$

con la función de Green  $G_0$  dada por<sup>40</sup>

$$G_0(\vec{r} - \vec{r}_t) = \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}_t|}}{|\vec{r} - \vec{r}_t|}, \quad (\text{A.19})$$

con  $\vec{r}_t = \vec{r}_0 + \vec{v}t$ . En términos de la base esférica mostrada en la Fig. 2.1, la función de Green se

puede escribir como<sup>33,52</sup>

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}_t) = 4\pi k \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} j_{\ell}(kr) h_{\ell}^{(+)}(kr_t) Y_{\ell,m}(\Omega_r) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}), \quad (\text{A.20})$$

con  $h_{\ell}^{(+)}(x) = i h_{\ell}^{(1)}(x)$  la función esférica de Hankel de orden  $\ell$ ,<sup>50,54</sup> por lo que es posible expresar la Ec. (A.18) como

$$\vec{E}^{ext}(\vec{r}) = \left( \nabla - \frac{ik\vec{v}}{c} \right) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l j_l(kr) Y_{l,m}(\Omega_r) \phi_{l,m}, \quad (\text{A.21})$$

con

$$\phi_{\ell,m} = 4\pi k \int dt e^{i\omega t} h_{\ell}^{(+)}(kr_t) Y_{\ell,m}^*(\Omega_{r_t}). \quad (\text{A.22})$$

Mediante una transformada de Fourier del espacio de tiempo al espacio de frecuencias de la función de Green, se obtiene<sup>33,39,49</sup>

$$\int dt e^{i\omega t} \frac{e^{ik|\vec{r}-(b,0,vt)|}}{|\vec{r}-(b,0,vt)|} = \frac{2}{v} K_0 \left( \frac{\omega}{v\gamma} \sqrt{(x-b)^2 + y^2} \right) e^{i\omega z/v}, \quad (\text{A.23})$$

con  $v$  la rapidez del electrón y  $K_0$  la función Bessel modificada del segundo tipo de orden cero. Por lo tanto, a partir de las Ecs. (A.18), (A.21), (A.23), y de la propiedad de ortonormalidad de los armónicos esféricos<sup>55</sup>, se obtiene

$$\phi_{\ell,m} = \frac{2}{v} \frac{1}{j_{\ell}(kr)} \int Y_{\ell,m}^*(\Omega_r) K_0 \left( \frac{\omega}{v\gamma} \sqrt{(x-b)^2 + y^2} \right) e^{i\omega z/v} d\Omega_r, \quad (\text{A.24})$$

y realizando la integral de la Ec. (A.24):<sup>33</sup>

$$\phi_{\ell,m} = 4\pi k \frac{A_{\ell,m}^+}{\omega} K_m \left( \frac{\omega b}{v\gamma} \right), \quad (\text{A.25})$$

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

$$A_{\ell,m}^+ = \frac{1}{\beta^{\ell+1}} \sum_{j=m}^{\ell} \frac{(i)^{\ell-j} (2\ell+1)!! \alpha_{\ell,m}}{\gamma^j 2^j (\ell-j)! [(j-m)/2]! [(j+m)/2]!} I_{j,\ell-j}^{\ell,m}, \quad (\text{A.26})$$

con

$$\alpha_{\ell,m} = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}, \quad (\text{A.27})$$

y  $\beta = v/c$ . Los números  $I_{j,\ell-j}^{\ell,m}$  se calculan empleando la siguiente fórmula de recurrencia

$$(\ell-m) I_{i_1, i_2}^{\ell, m} = (2\ell-1) I_{i_1, i_2+1}^{\ell-1, m} - (\ell+m-1) I_{i_1, i_2}^{\ell-2, m}, \quad (\text{A.28})$$

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

$$I_{i_1, i_2}^{m, m} = \begin{cases} (-1)^m (2m-1)!! B\left(\frac{i_1+m+2}{2}, \frac{i_2+1}{2}\right) & i_2 \text{ par;} \\ 0 & i_2 \text{ impar;} \end{cases} \quad (\text{A.29})$$

con  $B$  la función beta. <sup>50</sup>

A partir de las expresiones (A.16), (A.17), y (A.25), se obtiene:

$$\psi_{\ell, m}^{\text{E, ext}} = \frac{-2\pi(i)^{\ell-1} k}{c\gamma} \frac{B_{\ell, m}}{\ell(\ell+1)} K_m\left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right), \quad (\text{A.30})$$

$$\psi_{\ell, m}^{\text{M, ext}} = \frac{-4\pi(i)^{1-\ell} k v}{c^2} \frac{m A_{\ell, m}^+}{\ell(\ell+1)} K_m\left(\frac{\omega b}{v\gamma}\right), \quad (\text{A.31})$$

con

$$B_{\ell, m} = A_{\ell, m+1}^+ \sqrt{(\ell+m+1)(\ell-m)} - A_{\ell, m-1}^+ \sqrt{(\ell-m+1)(\ell+m)}. \quad (\text{A.32})$$

Sustituyendo las Ecs. (A.30) y (A.31) en las expresiones

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

y

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

finalmente se obtiene:

$$\vec{E}^{\text{ext}} = \sum_{\ell, m} \mathcal{E}_{\ell, m}^{er} \hat{r} + \mathcal{E}_{\ell, m}^{e\theta} \hat{\theta} + \mathcal{E}_{\ell, m}^{e\phi} \hat{\phi}, \quad (\text{A.33})$$

$$\vec{H}^{\text{ext}} = \sum_{\ell, m} \mathcal{H}_{\ell, m}^{er} \hat{r} + \mathcal{H}_{\ell, m}^{e\theta} \hat{\theta} + \mathcal{H}_{\ell, m}^{e\phi} \hat{\phi}, \quad (\text{A.34})$$

en donde las componentes de los campos externos están mostradas en las Ecs. (2.37) a (2.42) del texto principal.

## Funciones auxiliares para el cálculo analítico de la integral de superficie cerrada

Como se discutió en la Sección 2.4, al momento de realizar la integral de superficie cerrada del tensor  $\overset{\leftrightarrow}{T}$  de forma analítica [ver Ecs. (2.69) a (2.71)], se definió un conjunto de funciones escalares que dependen únicamente de los números  $l, m, l', m'$  [ver Ecs. (2.73) a (2.91)]. En este Apéndice se muestran explícitamente dichas funciones, a las que llamaremos funciones auxiliares  $IN_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IM_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IU_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $\Delta_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IV_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IW_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IX_{l,l'}^{m,m'}$ ,  $IY_{l,l'}^{m,m'}$  y  $IZ_{l,l'}^{m,m'}$ .

Al realizar la integral de superficie del término  $\mathcal{E}_{lm}^{br} \mathcal{E}_{l'm'}^{ar*}$  de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{T}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.73)], aparece la siguiente integral

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \sin \theta \cos \phi d\Omega \\ &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \sqrt{1-x^2} dx \\ &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) IN_{l,l'}^{m,m'}, \end{aligned} \tag{B.1}$$

con

$$IN_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \sqrt{1-x^2} dx, \tag{B.2}$$

y  $\delta_{m,m'}$  la delta de Kronecker. En la integral a lo largo de  $\hat{y}$  [Ec. (2.74)], se tiene

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \sin \theta \sin \phi d\Omega \\ &= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) IN_{l,l'}^{m,m'}, \end{aligned} \tag{B.3}$$

y a lo largo de  $\hat{z}$  [Ec. (2.75)]

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \cos \theta d\Omega \\ &= 2\pi\delta_{m,m'} \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) x dx \\ &= 2\pi\delta_{m,m'} IM_{l,l'}^{m,m'}, \end{aligned} \tag{B.4}$$

con

$$IM_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) x dx. \quad (\text{B.5})$$

Integrando el término  $\mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{lm}^{ar*}$  de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{T}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.78)], aparece

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\cos \phi}{\sin \theta} d\Omega \\ &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \\ &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) IU_{l,l'}^{m,m'}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

con

$$IU_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}, \quad (\text{B.7})$$

y

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \phi d\Omega \\ &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx \\ &= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) IW_{l,l'}^{m,m'}, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

con

$$IW_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (\text{B.9})$$

Mientras que para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{T}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.79)], se tiene que

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\sin \phi}{\sin \theta} d\Omega \\ &= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \\ &= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) IU_{l,l'}^{m,m'}, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

y

$$\begin{aligned} & \oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \phi d\Omega \\ &= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx \\ &= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) IW_{l,l'}^{m,m'}. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Para el término  $\mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{lm}^{ar*}$  a lo largo de  $x$  [Ec. (2.81)], se obtiene

$$\oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \theta \cos \phi d\Omega$$

---


$$\begin{aligned}
&= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx \\
&= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) IV_{l,l'}^{m,m'},
\end{aligned} \tag{B.12}$$

con

$$IV_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx, \tag{B.13}$$

y

$$\begin{aligned}
&\oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{1}{\sin \theta} \cos \theta \cos \phi d\Omega \\
&= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx \\
&= \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) IW_{l,l'}^{m,m'}.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

En la integral a lo largo de  $y$  [Ec. (2.82)], aparece

$$\begin{aligned}
&\oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \theta \sin \phi d\Omega \\
&= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx \\
&= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) IV_{l,l'}^{m,m'},
\end{aligned} \tag{B.15}$$

y

$$\begin{aligned}
&\oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{1}{\sin \theta} \cos \theta \sin \phi d\Omega \\
&= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx \\
&= i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) IW_{l,l'}^{m,m'},
\end{aligned} \tag{B.16}$$

mientras que en la integral a lo largo de  $z$  [Ec. (2.83)], se obtiene

$$\begin{aligned}
&\oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \theta d\Omega \\
&= 2\pi\delta_{m,m'} \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) x dx \\
&= 2\pi\delta_{m,m'} IM_{l,l'}^{m,m'},
\end{aligned} \tag{B.17}$$

y

$$\begin{aligned}
&\oint e^{i(m-m')} P_l^m(\cos \theta) P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \frac{1}{\sin \theta} \sin \theta d\Omega \\
&= 2\pi\delta_{m,m'} \Delta_{l,l'},
\end{aligned} \tag{B.18}$$

---

con

$$\Delta_{l,l'} = \frac{2(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \delta_{l,l'}. \quad (\text{B.19})$$

En los términos  $\mathcal{E}_{lm}^{b\theta} \mathcal{E}_{lm}^{a\theta*}$  y  $\mathcal{E}_{lm}^{b\phi} \mathcal{E}_{lm}^{a\phi*}$  aparecen integrales similares que se pueden hacer de forma análoga. En ambos términos aparecen las mismas funciones auxiliares que se han definido. Adicionalmente, es necesario definir

$$IX_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x^2}{1-x^2} dx, \quad (\text{B.20})$$

$$IY_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x}{1-x^2} dx, \quad (\text{B.21})$$

y

$$IZ_{l,l'}^{m,m'} = \int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^{m'}(x) \frac{x^3}{1-x^2} dx, \quad (\text{B.22})$$

para la parte zenital, mientras que para la parte azimutal la integral resulta en una superposición de funciones delta de Kronecker del tipo  $\delta_{m,m'}$ .

Resulta interesante notar que las funciones auxiliares [Ecs. (B.2), (B.5), (B.7), (B.9), (B.13), (B.20), (B.21) y (B.22)] están dadas como integrales de funciones asociadas de Legendre, las cuales pueden ser resueltas de manera exacta haciendo uso de cuadraturas de Gauss-Legendre o Gauss-Chebyshev, dependiendo de cada caso.<sup>31</sup>

## Expresiones analíticas de la parte magnética de la contribución espectral al momento lineal transferido

En esta Apéndice, se muestran las expresiones que conforman la representación analítica de la parte magnética de la contribución espectral al momento lineal  $\vec{\mathcal{P}}^H$  [Ec. (2.16)].

El término  $\mathcal{H}_{lm}^{br} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*}$  del tensor  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^H$  [Ec. (2.67)] es

$$\mathcal{H}_{lm}^{br} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} = C_{lm}^b C_{lm}^{a*} l'(l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} e^{i(m-m')\phi} P_l^m P_{l'}^{m'}, \quad (\text{C.1})$$

en donde  $a$  y  $b$  indican la elección arbitraria de componentes del campo esparcido (denotado por  $s$ ) o del externo (denotado por  $e$ ),  $Z_l^s \rightarrow h_l^+(k_0 r)$  para el campo esparcido y  $Z_l^e \rightarrow j_l(k_0 r)$  para el campo externo.

Dependiendo de la componente a lo largo de  $\hat{n}$  del tensor que se desee escribir, para  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^H \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es necesario:

$$\oint \mathcal{H}_{lm}^{br} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \sin \theta \cos \phi d\Omega = C_{lm}^b C_{lm}^{a*} l'(l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} \times \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) N_{l,l'}^{m,m'}, \quad (\text{C.2})$$

para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba}^H \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)],

$$\oint \mathcal{H}_{lm}^{br} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \sin \theta \cos \phi d\Omega = C_{lm}^b C_{lm}^{a*} l'(l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} \times i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) N_{l,l'}^{m,m'}, \quad (\text{C.3})$$

y para  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ab}^H \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)],

$$\oint \mathcal{H}_{lm}^{br} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \cos \theta d\Omega = C_{lm}^b C_{lm}^{a*} l'(l+1)(l'+1) \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{(k_0 r)^2} \times 2\pi \delta_{m,m'} M_{l,l'}^{m,m'}. \quad (\text{C.4})$$

El término  $\mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] es

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} = & -iD_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} l'(l'+1) e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} \right. \\ & \left. - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} \right] + i e^{i(m-m')\phi} C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) m \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \frac{P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta}. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Al realizar las integrales de superficie de las ecs. (2.69) y (2.70), se tiene que su contribución a  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \cos \phi d\Omega = & \pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ -iD_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} l'(l'+1) \left[ (l+1) W_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ & \left. \left. - (l-m+1) U_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + i C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) m \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} U_{l,l'}^{m,m'} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

y para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \sin \phi d\Omega = & i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ -iD_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} l'(l'+1) \left[ (l+1) W_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ & \left. \left. - (l-m+1) U_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + i C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) m \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} U_{l,l'}^{m,m'} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

El término  $\mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] es

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} = & D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} m l'(l'+1) e^{i(m-m')\phi} \frac{P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} - C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) \\ & \times \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin \theta} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

La contribución de este término a la integral de superficie de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \cos \theta \cos \phi d\Omega = & -\pi(\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ -C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \left[ (l+1) V_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ & \left. \left. - (l-m+1) W_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} m l'(l'+1) W_{l,l'}^{m,m'} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{ar*} \cos \theta \sin \phi d\Omega = & -i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ -C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \left[ (l+1) V_{l,l'}^{m,m'} \right. \right. \\ & \left. \left. - (l-m+1) W_{l+1,l'}^{m,m'} \right] + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} m l'(l'+1) W_{l,l'}^{m,m'} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

y para  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)] es

$$\oint \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\theta*} \sin \theta d\Omega = -2\pi \delta_{m,m'} \left\{ -C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} l'(l'+1) \frac{f_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} \left[ (l+1) M_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) \Delta_{l+1,l'} \right] + D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} \frac{Z_l^b Z_{l'}^{a*}}{k_0 r} m l' (l'+1) \Delta_{l,l'} \right\}. \quad (\text{C.11})$$

El término  $\mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\theta*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.67)] es

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\theta*} &= D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' Z_l^b Z_{l'}^{a*} \frac{e^{i(m-m')\phi} P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} \\ &- D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'-m'+1) \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] \\ &- C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] \\ &+ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1)(l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} - (l+1)(l'-m'+1) \right. \\ &\times \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'+1)(l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} + (l-m+1)(l'-m'+1) \\ &\left. \times \frac{P_{l+1}^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right], \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

La contribución de la Ec. (C.12) a la integral de superficie de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\theta*} \sin \theta \cos \phi d\Omega &= \pi (\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' Z_l^b Z_{l'}^{a*} U_{l,l'}^{m,m'} \right. \\ &- D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l'+1) W_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1) U_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\ &- C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1) W_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) U_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\ &+ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1) V_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1) W_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\ &\left. - (l'+1)(l-m+1) W_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1) U_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\theta*} \sin \theta \sin \phi d\Omega &= i\pi (\delta_{m-1,m'} - \delta_{m+1,m'}) \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' Z_l^b Z_{l'}^{a*} U_{l,l'}^{m,m'} \right. \\ &- D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l'+1) W_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1) U_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\ &+ C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1) W_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1) U_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

$$\begin{aligned}
& + C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1)V_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1)W_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\
& \left. - (l+1)(l-m+1)W_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1)U_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\},
\end{aligned}$$

y para  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{T}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)] es

$$\begin{aligned}
\oint \mathcal{H}_{lm}^{b\theta} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\theta*} \cos \theta d\Omega &= 2\pi \delta_{m,m'} \left\{ D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m m' Z_l^b Z_{l'}^{a*} Y_{l,l'}^{m,m'} \right. \\
& - D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l'+1)X_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1)Y_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\
& - C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m' f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)X_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1)Y_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\
& + C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} f_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1)\mathcal{X}_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1)X_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\
& \left. - (l+1)(l-m+1)X_{l+1,l}^{m,m'} + (l-m+1)(l'-m'+1)Y_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\}.
\end{aligned} \tag{C.15}$$

Finalmente, el término  $\mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\phi*}$  de  $\overset{\leftrightarrow}{T}_{ab}$  [Ec. (2.67)] es

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\phi*} &= C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} \frac{e^{i(m-m')\phi} P_l^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} \\
& - C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m f_l^b Z_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l'-m'+1) \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] \\
& - D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right] \\
& + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} e^{i(m-m')\phi} \left[ (l+1)(l'+1) \frac{P_l^m P_{l'}^{m'} \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} - (l+1)(l'-m'+1) \right. \\
& \times \frac{P_l^m P_{l'+1}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} - (l+1)(l-m+1) \frac{P_{l+1}^m P_{l'}^{m'} \cos \theta}{\sin^2 \theta} + (l-m+1)(l'-m'+1) \\
& \left. \times \frac{P_{l+1}^m P_{l'+1}^{m'}}{\sin^2 \theta} \right].
\end{aligned} \tag{C.16}$$

La contribución de la Ec. (C.16) a la integral de superficie de  $\hat{x} \cdot \overset{\leftrightarrow}{T}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.69)] es

$$\begin{aligned}
\oint \mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\phi*} \sin \theta \cos \phi d\Omega &= \pi (\delta_{m+1,m'} + \delta_{m-1,m'}) \left\{ C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} U_{l,l'}^{m,m'} \right. \\
& - C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l'+1)W_{l,l'}^{m,m'} - (l'-m'+1)U_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\
& - D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l+1)W_{l,l'}^{m,m'} - (l-m+1)U_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\
& + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l+1)(l'+1)V_{l,l'}^{m,m'} - (l+1)(l'-m'+1)W_{l,l'+1}^{m,m'} \right.
\end{aligned} \tag{C.17}$$

$$- (l' + 1)(l - m + 1)W_{l+1,l}^{m,m'} + (l - m + 1)(l' - m' + 1)U_{l+1,l'+1}^{m,m'} \Big] \Big\},$$

para  $\hat{y} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.70)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\phi*} \sin \theta \sin \phi d\Omega = i\pi(\delta_{m-1,m'} - \delta_{m-1,m'}) \Big\{ & C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} U_{l,l'}^{m,m'} \\ & - C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l' + 1)W_{l,l'}^{m,m'} - (l' - m' + 1)U_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\ & - D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l + 1)W_{l,l'}^{m,m'} - (l - m + 1)U_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\ & + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l + 1)(l' + 1)V_{l,l'}^{m,m'} - (l + 1)(l' - m' + 1)W_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\ & \left. - (l' + 1)(l - m + 1)W_{l+1,l}^{m,m'} + (l - m + 1)(l' - m' + 1)U_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\}, \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

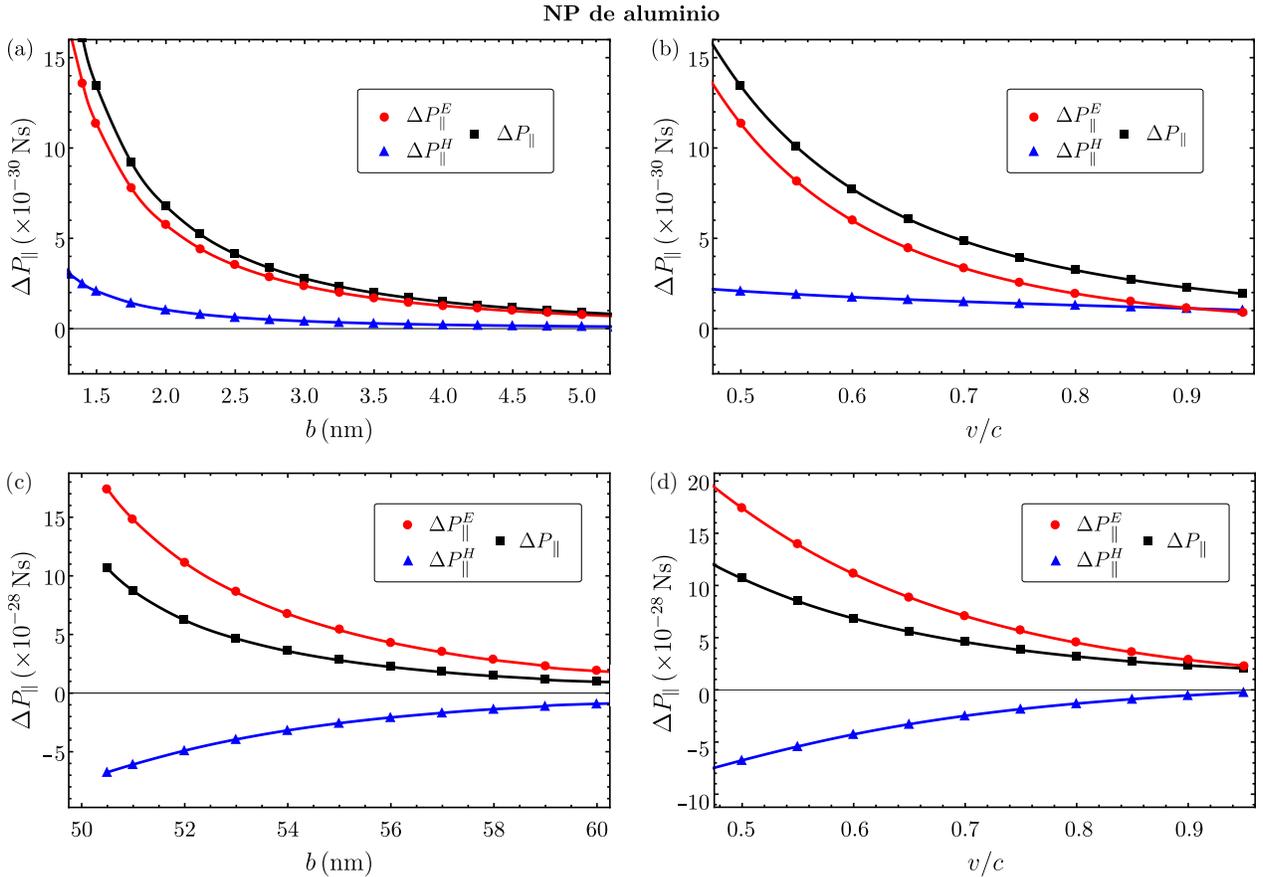
y para  $\hat{z} \cdot \overset{\leftrightarrow}{\mathcal{T}}_{ba} \cdot \hat{r}$  [Ec. (2.71)] es

$$\begin{aligned} \oint \mathcal{H}_{lm}^{b\phi} \mathcal{H}_{l'm'}^{a\phi*} \cos \theta d\Omega = 2\pi\delta_{m,m'} \Big\{ & C_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m m' f_l^b f_{l'}^{a*} Y_{l,l'}^{m,m'} \\ & - C_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} m f_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l' + 1)X_{l,l'}^{m,m'} - (l' - m' + 1)Y_{l,l'+1}^{m,m'} \right] \\ & - D_{lm}^b C_{l'm'}^{a*} m' Z_l^b f_{l'}^{a*} \left[ (l + 1)X_{l,l'}^{m,m'} - (l - m + 1)Y_{l+1,l'}^{m,m'} \right] \\ & + D_{lm}^b D_{l'm'}^{a*} Z_l^b Z_{l'}^{a*} \left[ (l + 1)(l' + 1)\mathcal{Z}_{l,l'}^{m,m'} - (l + 1)(l' - m' + 1)X_{l,l'+1}^{m,m'} \right. \\ & \left. - (l' + 1)(l - m + 1)X_{l+1,l}^{m,m'} + (l - m + 1)(l' - m' + 1)Y_{l+1,l'+1}^{m,m'} \right] \Big\}. \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

Con las expresiones mostradas en este Apéndice se tiene una representación analítica completa de la contribución espectral al momento lineal [Ec. (2.16)].

# Momento lineal longitudinal transferido a la nanopartícula

En este Apéndice se muestran los resultados para el momento lineal longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$ , transferido del electrón rápido a las NPs mostradas en las secciones 3.1, 3.2, 4.1, y 4.2, correspondientes a NPs causales hechas de aluminio, oro, plata, y bismuto, de 1 nm y 50 nm de radio.

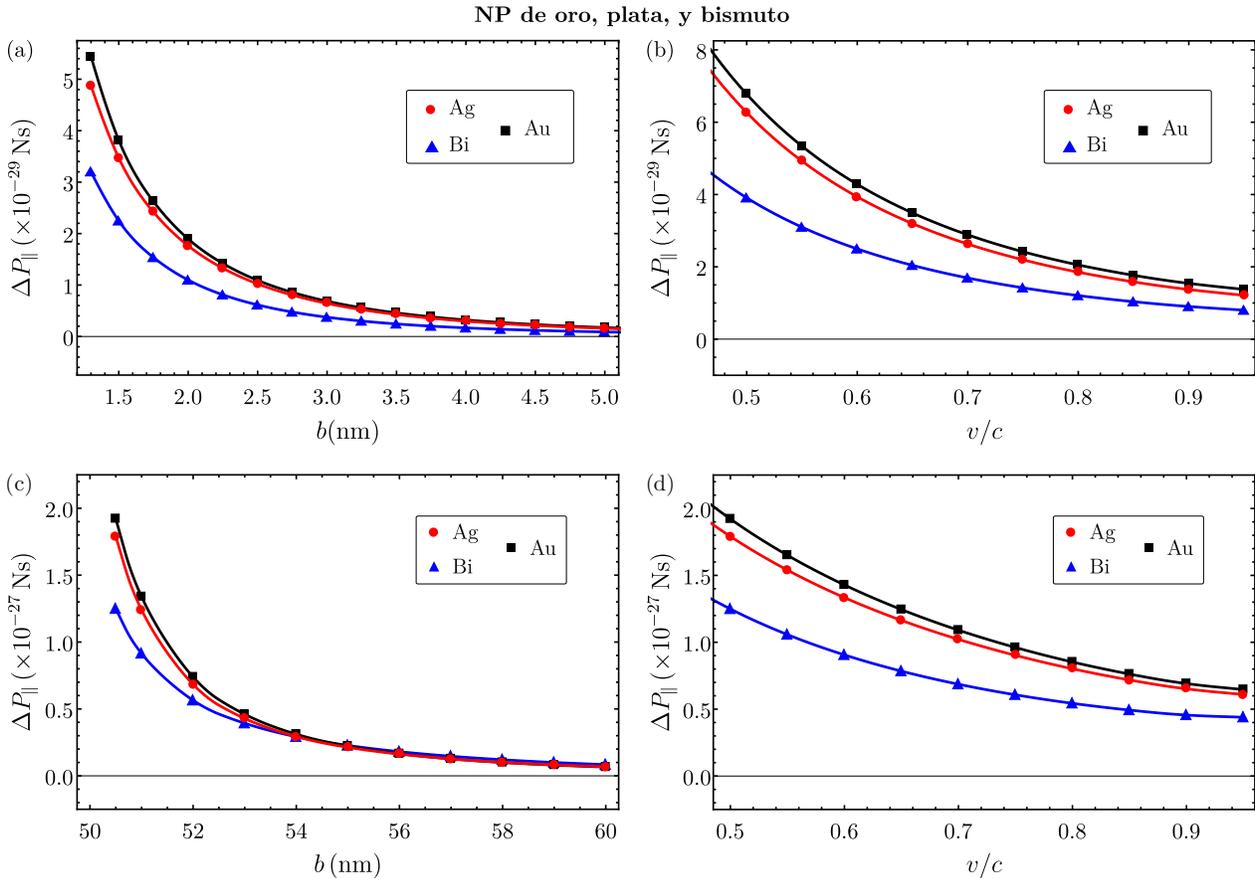


**Figura D.1:** Momento lineal longitudinal  $\Delta P_{\parallel}$  (rectángulos negros) transferido de un electrón rápido a una NP de aluminio, (a) en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$  y  $a = 1$  nm, (b) en función de  $v/c$  y considerando  $b = 1.5$  nm y  $a = 1$  nm, (c) en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$  y  $a = 50$  nm, y (d) en función de  $v/c$  y considerando  $b = 50.5$  nm y  $a = 50$  nm. Los círculos rojos representan la contribución eléctrica a  $\Delta P_{\parallel}$  y los triángulos azules la contribución magnética a  $\Delta P_{\parallel}$ . Las líneas roja, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

En las Figs. D.1(a) y D.1(b) se muestra el momento lineal longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$  (rectángulos negros),

transferido a una NP de aluminio (Drude) de 1 nm de radio, como aquella mostrada en la Sección 3.1. Se muestran las contribuciones de los campos eléctrico (círculos rojos) y magnético (triángulos azules) al momento lineal longitudinal. En la Fig. D.1(a) se muestra  $\Delta P_{\parallel}$  en función del parámetro de impacto y considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$ . En la Fig. D.1(b) se muestra  $\Delta P_{\parallel}$  en función de  $v/c$  y considerando  $b = 1.5$  nm.

En las Figs. D.1(c) y D.1(d) se muestra el momento lineal longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$  (rectángulos negros), transferido a una NP de aluminio (Drude) de 50 nm de radio, como aquella mostrada en la Sección 4.1. Se muestran las contribuciones de los campos eléctrico (círculos rojos) y magnético (triángulos azules) al momento lineal longitudinal. En la Fig. D.1(c), se muestra  $\Delta P_{\parallel}$  en función del parámetro de impacto y considerando un electrón rápido con  $v = 0.5c$ . En la Fig. D.1(d) se muestra  $\Delta P_{\parallel}$  en función de  $v/c$  y considerando  $b = 1.5$  nm. Se observa que las contribuciones eléctrica (círculos rojos) y magnética (triángulos azules) a  $\Delta P_{\parallel}$  tienen signos opuestos y magnitud similar, sin embargo la contribución eléctrica es mayor, por lo que  $\Delta P_{\parallel}$  es positivo, indicando que el electrón rápido *arrastra* a la NP, mientras pierde momento lineal (y energía) en su viaje. Al igual en el caso de NP pequeña, la magnitud de  $\Delta P_{\parallel}$  decrece cuando el parámetro de impacto  $b$  y la velocidad del electrón rápido  $v$  incrementan.



**Figura D.2:** Momento lineal longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$ , transferido de un electrón rápido a NPs de oro, plata, y bismuto, (a) en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$  y  $a = 1$  nm, (b) en función de  $v/c$  y considerando  $b = 1.5$  nm y  $a = 1$  nm, (c) en función de  $b$  y considerando  $v = 0.5c$  y  $a = 50$  nm, y (d) en función de  $v/c$  y considerando  $b = 50.5$  nm y  $a = 50$  nm.. Los círculos rojos consideran una NP hecha de plata, los rectángulos negros de oro, y los triángulos azules de bismuto. Las líneas rojas, negra, y azul, se muestran como guía a la vista.

---

En las Figs. D.2(a) y D.2(b), se muestra a  $\Delta P_{\parallel}$  transferido a una NP de  $a = 1$  nm de radio, hecha de oro (rectángulos negros), plata (círculos rojos), y bismuto (triángulos azules). La Fig. D.2(a) muestra  $\Delta P_{\parallel}$  en función de  $b$  y con  $v = 0.5c$ , y la Fig. D.2(b) muestra  $\Delta P_{\parallel}$  en función de  $v/c$  y con  $b = 1.5$  nm. Para estas NPs, se consideró su función dieléctrica a partir de las funciones analíticas causales reportadas por Werner et al.<sup>51</sup> Se observa que  $\Delta P_{\parallel}$  es positivo para las tres NPs, indicando que el electrón rápido *arrastra* a la NP, además, su magnitud decrece cuando el parámetro de impacto  $b$  y la velocidad del electrón rápido  $v$  incrementan. Para el caso de NPs grandes de 50 nm de radio hechas de oro, plata, y bismuto, mostrado en las Figs. D.2(c) y D.2(d), también se observa que  $\Delta P_{\parallel}$  es positivo para las tres NPs.

Se concluye que para NPs causales, el momento lineal longitudinal,  $\Delta P_{\parallel}$ , transferido del electrón rápido a la NP es siempre positivo, indicando que el electrón rápido *arrastra* a la NP, mientras pierde momento lineal (y energía) en su viaje. La magnitud de  $\Delta P_{\parallel}$  decrece cuando el parámetro de impacto  $b$  y la velocidad del electrón rápido  $v$  incrementan.

---

## Referencias

---

- [1] O. Custance, R. Perez y S. Morita, “Atomic force microscopy as a tool for atom manipulation,” *Nat. Nanotechnol.* **4**, 803 (2009). Citado en la pág. 5.
- [2] J. M. Romo-Herrera, R. A. Alvarez-Puebla y L. M. Liz-Marzán, “Controlled assembly of plasmonic colloidal nanoparticle clusters,” *Nanoscale* **3**, 1304 (2011). Citado en la pág. 5.
- [3] C. Bustamante, J. Macosko y G. Wuite, “Grabbing the cat by the tail: Manipulating molecules one by one,” *Nat. Rev. Mol. Cell. Biol.* **1**, 130 (2000). Citado en la pág. 5.
- [4] O. M. Maragò, P. H. Jones, P. G. Gucciardi, G. Volpe y A. C. Ferrari, “Optical trapping and manipulation of nanostructures,” *Nat. Nanotechnol.* **8**, 807 (2013). Citado en las págs. 5 y 12.
- [5] K. Dholakia y T. Čižmár, “Shaping the future of manipulation,” *Nat. Photonics* **5**, 335 (2011). Citado en las págs. 5 y 12.
- [6] A. Ashkin, “Acceleration and trapping of particles by radiation pressure,” *Phys. Rev. Lett.* **24**, 156 (1970). Citado en las págs. 5 y 12.
- [7] R. Ali, R. S. Dutra, F. A. Pinheiro, S. S. F. Rosa y P. A. M. Neto, “Theory of optical tweezing of dielectric microspheres in chiral host media and its applications,” *Sci. Rep.* **10**, 16481 (2020). Citado en las págs. 5 y 12.
- [8] M. Ploschner, T. Čižmár, M. Mazilu, A. Di Falco y K. Dholakia, “Bidirectional optical sorting of gold nanoparticles,” *Nano Lett.* **12**, 1923 (2012). Citado en las págs. 5 y 12.
- [9] P. E. Batson, “Motion of Gold Atoms on Carbon in the Aberration Corrected STEM,” *Microsc. Microanal.* **14**, 89 (2008). Citado en las págs. 5, 7, 57 y 61.
- [10] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpuru, “Plasmonic nanobilliards: Controlling nanoparticle movement using forces induced by swift electrons,” *Nano Lett.* **11**, 3388 (2011). Citado en las págs. 5, 11, 12, 13, 57 y 61.
- [11] Y. T. Chen, C. Y. Wang, Y. J. Hong, T. T. Kang, S. E. Lai, P. Chang y T. R. Yew, “Electron beam manipulation of gold nanoparticles external to the beam,” *RSC Adv.* **4**, 31652 (2014). Citado en las págs. 5, 13, 57 y 61.
- [12] Y. Liu y Y. Sun, “Electron beam induced evolution in Au, Ag, and interfaced heterogeneous Au/Ag nanoparticles,” *Nanoscale* **7**, 13687 (2015). Citado en las págs. 5, 13, 57 y 61.

- 
- [13] S. Gwo, H. Y. Chen, M. H. Lin, L. Sun y X. Li, “Nanomanipulation and controlled self-assembly of metal nanoparticles and nanocrystals for plasmonics,” *Chem. Soc. Rev.* **45**, 5672 (2016). Citado en las págs. 5, 13, 57 y 61.
- [14] H. Zheng, U. M. Mirsaidov, L. W. Wang y P. Matsudaira, “Electron Beam Manipulation of Nanoparticles,” *Nano. Lett.* **12**, 5644 (2012). Citado en las págs. 5, 13, 57 y 61.
- [15] V. P. Oleshko y J. M. Howe, “Are electron tweezers possible?,” *Ultramicroscopy* **111**, 1599 (2011). Citado en las págs. 5, 13, 57 y 61.
- [16] C. M Ticoş, D. Ticoş y J. D Williams, “Pushing microscopic matter in plasma with an electron beam,” *Plasma Phys. Control. Fusion* **62**, 025003 (2020). Citado en las págs. 5 y 13.
- [17] M. Haider, G. Braunshausen y E. Schwann. “Correction of the spherical aberration of a 200 kV TEM by means of a hexapole-corrector,” *Optik* **99**, 167 (1995). Citado en la pág. 5.
- [18] O. L. Krivanek, N. Dellby, A. J. Spence, R. A. Camps y L. M. Brown, “Aberration correction in the STEM,” *Inst. Phys. Conf. Ser.* **153**, 35 (1997). Citado en la pág. 5.
- [19] M. Haider, S. Uhlemann, E. Schwan, H. Rose, B. Kabius y K. Urban, “Electron microscopy image enhanced,” *Nature* **392**, 768 (1998). Citado en la pág. 5.
- [20] P. E. Batson, N. Dellby y O. L. Krivanek, “Sub-angstrom resolution using aberration corrected electron optics,” *Nature* **418**, 617 (2002). Citado en la pág. 5.
- [21] R. Erni, M. D. Rossell, C. Kisielowski y U. Dahmen, “Atomic-resolution imaging with a sub-50-pm electron probe,” *Phys. Rev. Lett.* **102**, 096101 (2009). Citado en la pág. 5.
- [22] O. L. Krivanek, T. C. Lovejoy, N. Dellby, T. Aoki, R. W. Carpenter, P. Rez, E. Soignard, J. Zhu, P. E. Batson, M. J. Lagos, R. F. Egerton y P. A. Crozier, “Vibrational spectroscopy in the electron microscope,” *Nature* **514**, 209 (2014). Citado en la pág. 5.
- [23] A. A. Govyadinov, A. Konečná, A. Chuvilin, S. Vélez, I. Dolado, A. Y. Nikitin, S. Lopatin, F. Casanova, L. E. Hueso, J. Aizpurua y R. Hillenbrand, “Probing low-energy hyperbolic polaritons in van der Waals crystals with an electron microscope,” *Nat. Commun.* **8**, 95 (2017). Citado en la pág. 5.
- [24] F. S. Hage, R. J. Nicholls, J. R. Yates, D. G. McCulloch, T. C. Lovejoy, N. Dellby, O. L. Krivanek, K. Refson y Q. M. Ramasse, “Nanoscale momentum-resolved vibrational spectroscopy,” *Sci. Adv.* **4**, 7495 (2018). Citado en la pág. 5.
- [25] F. J. García de Abajo, “Momentum transfer to small particles by passing electron beams,” *Phys. Rev. B* **70**, 115422 (2004). Citado en las págs. 5, 7, 10, 13, 18, 32, 45 y 49.
- [26] A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, P. E. Batson, P. M. Echenique, A. Rivacoba y J. Aizpurua, “Electromagnetic forces on plasmonic nanoparticles induced by fast electron beams,” *Phys. Rev. B* **82**, 235429 (2010). Citado en las págs. 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 18, 32, 35, 36, 37, 38, 47, 49, 50, 59 y 60.

- 
- [27] M. J. Lagos, A. Reyes-Coronado, A. Konečná, P. M. Echenique, J. Aizpurua y P. E. Batson, “Attosecond and femtosecond forces exerted on gold nanoparticles induced by swift electrons,” *Phys. Rev. B* **93**, 205440 (2016). Citado en las págs. 5, 14, 15, 32, 36, 45, 47 y 60.
- [28] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua, “Nanoparticle movement: Plasmonic forces and physical constraints,” *Ultramicroscopy* **123**, 50 (2012). Citado en las págs. 5, 12, 13, 15, 32, 36, 47, 50 y 60.
- [29] E. D. Palik, *Handbook of Optical Constants of Solids*, Academic Press, Estados Unidos (1995). Citado en las págs. 5, 11, 46, 47, 48, 56 y 60.
- [30] A. Reyes-Coronado, C. G. Ortíz-Solano, N. Zabala, A. Rivacoba y R. Esquivel-Sirvent, “Analysis of electromagnetic forces and causality in electron microscopy,” *Ultramicroscopy* **192**, 80 (2018). Citado en las págs. 5, 15, 38, 39, 44 y 46.
- [31] D. Kahaner, C. Moler y S. Nash, *Numerical Methods and Software*, Prentice-Hall, Estados Unidos (1989). Citado en las págs. 5, 15, 16, 32 y 69.
- [32] M. Quijada, R. Díez-Muiño, A. G. Borisov, J. A. Alonso y P. M. Echenique, “Lifetime of electronic excitations in metal nanoparticles,” *New J. Phys.* **12**, 053023 (2010). Citado en la pág. 5.
- [33] 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 (1999). Citado en las págs. 5, 7, 21, 22, 23, 24, 62, 63 y 64.
- [34] F. J. García de Abajo, “Optical excitations in electron microscopy,” *Rev. Mod. Phys.* **82**, 209 (2010). Citado en la pág. 5.
- [35] F. J. García de Abajo y V. Di Giulio, “Optical Excitations with Electron Beams: Challenges and Opportunities,” *ACS Photonics* **8**, 945 (2021). Citado en las págs. 5, 6 y 17.
- [36] A. Rivacoba y P. M. Echenique, “Deflection of STEM electrons by dielectric spheres,” *Ultramicroscopy* **26**, 389 (1988) Citado en la pág. 6.
- [37] A. Rivacoba y N. Zabala, “Relativistic force between fast electrons and planar targets,” *New J. Phys.* **16**, 073048 (2014). Citado en las págs. 6 y 7.
- [38] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin, *Solid state physics*, Harcourt, Inc., Estados Unidos (1976). Citado en la pág. 7.
- [39] C. Maciel Escudero, *Linear Momentum Transfer from Swift Electrons to Small Metallic Nanoparticles: Dipole Approximation*, tesis para obtener el grado de Maestría en Ciencias (Física), bajo la dirección del Dr. Alejandro Reyes Coronado (2017). Citado en las págs. 7, 20, 21 y 64.
- [40] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, Estados Unidos (2007). Citado en las págs. 7, 17, 18, 20, 21, 39 y 63.
- [41] C. F. Bohren y D. R. Huffman, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, John Wiley & Sons, Estados Unidos (2004). Citado en las págs. 8 y 24.
-

- 
- [42] A. Santos Gómez, *Estudio de la transferencia de momento a nanopartículas plasmónicas por electrones rápidos en función de su velocidad*, tesis para obtener el grado de Maestría en Ciencias (Física), bajo la dirección del Dr. Alejandro Reyes Coronado y la Dra. Ana Lilia González Ronquillo, (2014). Citado en las págs. [13](#), [15](#) y [36](#).
- [43] U. Kreibig y M. Vollmer, *Optical Properties of Metal Clusters*, J. P. Toennies, Springer, Estados Unidos (1995). Citado en la pág. [13](#).
- [44] J. Á. Castellanos-Reyes, J. Castrejón-Figueroa, C. Maciel-Escudero y A. Reyes-Coronado, “Electronic tweezers for magnesium oxide nanoparticles,” *Mater. Today-Proc* **13**, 341 (2019). Citado en las págs. [14](#) y [15](#).
- [45] A. Kronrod, *Nodes and weights of quadrature formulas. Sixteen-place tables*, Consultants Bureau, Estados Unidos (1965). Citado en las págs. [16](#) y [32](#).
- [46] H. Takahasi y M. Mori, “Double Exponential Formulas for Numerical Integration,” *RIMS Kyoto Univ.* 9, 721 (1974). Citado en la pág. [16](#).
- [47] M. Mori y M. Sugihara, “The double-exponential transformation in numerical analysis,” *J. Comput. Appl. Math.* **127**, 287 (2001). Citado en la pág. [16](#).
- [48] B. Karlsson, *Beyond the C++ Standard Library: An Introduction to Boost* Addison Wesley Professional, Estados Unidos (2005). Citado en la pág. [34](#).
- [49] C. Maciel-Escudero y A. Reyes-Coronado, “Electromagnetic fields produced by a swift electron: A source of white light,” *Wave Motion* **86**, 137 (2019). Citado en las págs. [20](#), [21](#) y [64](#).
- [50] M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc., Estados Unidos, novena edición (1972). Citado en las págs. [22](#), [23](#), [24](#), [64](#) y [65](#).
- [51] W. S. M. Werner, K. Glantschnig y C. Ambrosch-Draxl, “Optical Constants and Inelastic Electron-Scattering Data for 17 Elemental Metals,” *J. Phys. Chem. Ref. Data* **38**, 1013 (2009). Citado en las págs. [34](#), [41](#), [44](#), [46](#), [47](#), [48](#), [53](#), [55](#), [56](#), [60](#) y [77](#).
- [52] F. J. García de Abajo, “Multiple scattering of radiation in clusters of dielectrics,” *Phys. Rev. B* **60**, 6086 (1999). Citado en las págs. [23](#), [24](#), [62](#), [63](#) y [64](#).
- [53] F. E. Low, *Classical Field Theory: Electromagnetism and Gravitation*, John Wiley & Sons, Estados Unidos (1997). Citado en las págs. [23](#), [62](#) y [63](#).
- [54] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland, Estados Unidos (1966). Citado en las págs. [24](#) y [64](#).
- [55] G. Arfken, *Mathematical methods for physicists*, Academic Press, Inc., Estados Unidos, tercera edición (1985). Citado en la pág. [64](#).
- [56] J. Castrejón-Figueroa, J. Á. Castellanos-Reyes, C. Maciel-Escudero, A. Reyes-Coronado y R. G. Barrera, “Time-dependent forces between a swift electron and a small nanoparticle within the dipole approximation,” *Phys. Rev. B* **103**, 155413 (2021). Citado en las págs. [39](#), [40](#), [41](#), [44](#), [45](#) y [52](#).
-

- 
- [57] R.D. Ramsier y J.T. Yates, “Electron-stimulated desorption: Principles and applications,” *Surf. Sci. Rep.* **12**, 246 (1991). Citado en la pág. 57.
- [58] J. Cazaux, “Correlations between ionization radiation damage and charging effects in transmission electron microscopy,” *Ultramicroscopy* **60**, 411 (1995). Citado en las págs. 57 y 61.
- [59] P. J. Feibelman y M. L. Knotek, “Reinterpretation of electron-stimulated desorption data from chemisorption systems,” *Phys. Rev. B* **18**, 6531 (1978). Citado en la pág. 57.