



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

FACULTAD DE CIENCIAS

APROXIMACIÓN DIPOLAR EN LA FUERZA DE  
RETROCESO POR ESPARCIMIENTO DE LUZ DE UNA  
NANOPARTÍCULA QUE INTERACTÚA CON UN  
ELECTRÓN RÁPIDO

T E S I S

QUE PARA OBTENER POR EL GRADO DE:

**Físico**

PRESENTA:

**Eduardo Enrique Viveros Armas**

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Alejandro Reyes Coronado



Ciudad Universitaria, Ciudad de México, 2023



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

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

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

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

1. Datos del alumno

Viveros

Armas

Eduardo Enrique

55 1198 2616

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

417071895

2. Datos del secretario (tutor)

Dr.

Alejandro

Reyes

Coronado

3. Datos del presidente

Dr.

Wolf Luis

Mochán

Backal

4. Datos del vocal

Dr.

Julio Javier

Martinell

Benito

5. Datos del primer suplente

Dr.

Carlos

Ramírez

Ramos

6. Datos del segundo suplente

Dra.

Karen Patricia

Volke

Sepúlveda

7. Datos del trabajo escrito

Aproximación dipolar en la fuerza de retroceso por esparcimiento de luz de una nanopartícula que interactúa con un electrón rápido

Páginas: 66

2023

# Agradecimientos

---

Sé que las palabras se quedarán cortas para expresar lo mucho que me siento agradecido, en especial con mis padres, que son las personas que desde que comencé a involucrarme en el mundo de la ciencia, me apoyaron incondicionalmente a pesar de querer dedicarme a lo opuesto a sus gustos y preferencias profesionales. El sustento, humor y sinceridad de mi padre así como el afecto, confianza y fortaleza de mi madre son cualidades que agradezco durante mi crecimiento y en especial durante mi formación universitaria. Por otra parte, tengo tres hermanos mayores que me han apoyado con tanto desde niño hasta hoy en día: gracias a Rubén por ser el hermano mayor que estuvo cuando más lo necesité, gracias a Arturo por apoyarme en múltiples ocasiones en este arduo camino de ser adulto y gracias Marco por ser el hermano que es también mi mejor amigo. Muchas gracias por las tantas ocasiones que me albergó con amor y júbilo en su hogar, así como la ayuda en los momentos difíciles que pasé en mi vida universitaria. Agradezco con especial cariño a Eridany y a Mayel, que se integraron a mi familia pero que ahora son tan cercanas a mí como mis hermanos.

Además de mis padres, agradezco a mis tíos Aida y Raúl por el amor tan grande que me han brindado desde pequeño, así como sus mejores deseos desde que dejé mi ciudad natal. Así mismo agradezco a mis tíos Betty y Agustín, por ser ese apoyo familiar que necesité estando en una ciudad tan grande, recordándome que la familia está para apoyarse.

Agradezco a mi amigo y profesor de preparatoria, Emilio Castillo, quien me acercó por primera vez a la física, convirtiéndose en mi pasión por el apoyo que me brindó al tener las ganas de seguir aprendiendo desde temprana edad. Agradezco al Dr. Carlos Ramírez por brindarme la oportunidad de estar en más de uno de sus cursos. Sin duda, uno de los mejores profesores que tuve durante mi formación universitaria. Agradezco también al Dr. Leonardo Patiño por darme la oportunidad y confianza de trabajar con él y uno de mis mejores amigos en sus cursos de Mecánica Cuántica a los cuales les tengo particular cariño. Así también, agradezco al Dr. Mauricio García por ser el primero en darme la oportunidad de vivir la experiencia académica como su ayudante y por las múltiples asesorías que me dio a lo largo de la elaboración de esta tesis. Así mismo, agradezco al Dr. Rubén Barrera por la oportunidad de trabajar como ayudante de investigador, lo que me permitió entrar al tema que se convertiría en mi tesis. Finalmente, agradezco al Dr. Alejandro Reyes por aceptarme como su alumno desde tan temprana edad además de ser el gran mentor y apoyo durante los varios años que he trabajado bajo su tutela. Gracias por confirmarme que mi pasión era, es y será trabajar en electromagnetismo. Siempre me he caracterizado por tener muchos amigos y he tenido la fortuna de tener algunos como compañeros de cuarto. Desde un inicio de mi vida universitaria fui bien recibido por mis compañeros de preparatoria Aidán, Adán y Yamir, a quienes agradezco profundamente su calidez y por los grandes momentos que guardo con especial cariño. Así mismo, quiero agradecer a César, quien se convirtió con el tiempo en uno de mis mejores amigos y a quien siempre veré con gran alegría cada que visite México. Con especial cariño quiero agradecer a Rodolfo, uno de mis mejores amigos y con quien más tiempo he vivido, además de haber compartido experiencias en tantos años que sólo mis hermanos

---

biológicos podrían superar. Gracias por tanto apoyo en estos años. Un especial agradecimiento a su madre, la Sra. Angélica, por todo el cariño, atención y buenos deseos que me ha brindado desde que la conocí. Finalmente, agradezco a mi amiga Gabriela quien ha sido mi más reciente compañera de cuarto. Gracias por tanto apoyo y por las cenas en las que compartimos tantas pláticas divertidas y serias.

Por otra parte, a lo largo de mi carrera universitaria coincidí con gente que a la fecha me siento afortunado de llamar amigos y ahora, colegas. Gracias a Rafael, Andrea y Daniela por ser parte del *dream team* que nos llevó lejos tanto en las materias como en la amistad al día de hoy. Gracias a Grover, un amigo que sin duda aprecio mucho y que se atrevió a conocer un poco más de mi ciudad de origen. Con especial estima, agradezco a mi mejor amigo, Daniel. Estoy convencido que sin un amigo como él, la carrera no hubiera sido ni tan provechosa ni tan divertida. Gracias por ser mi gran dupla en tantas materias.

Igualmente, agradezco a quienes fueron mi compañía en los periodos vacacionales cuando regresaba a Xalapa, así como en la pandemia que vivimos hace un par de años. Gracias a Gonzalo, quien además de ser uno de mis mejores amigos para la fiesta, es una de las personas que más me ha alentado a ser multidisciplinario por su nata pasión por muchos temas. Gracias a Gabriel, por tantos años de amistad donde ha demostrado ser una de mis amistades más sinceras tanto en lo personal como en lo recreativo. Estoy seguro que tendremos muchas experiencias más en los tantos viajes que seguro compartiremos. Finalmente, agradezco al grupo de amigos y hermanos académicos que hice al realizar este trabajo: primeramente a Jesús y José, por ser los hermanos mayores que me inspiraron a entrar en el tema de interacción de un electrón rápido con nanopartículas. Gracias por las muchas consultas que me brindaron en su momento y que ayudaron a que pudiera sentirme atraído por este tema de investigación. A Jorge, un gran mediador y quien me recuerda que uno se puede divertir mucho con colegas. A Luis, por las discusiones del tema que compartimos así como la gran amistad, risas y vivencias que hemos compartido desde hace años y que al día de hoy, valoro con mucho cariño. A Daniel, con quien recientemente he sido co-ayudante pero desde tiempo atrás ha sido un gran amigo y “capitán”. A Isabel, desde los cursos de electro hasta compartir el cubículo trabajando en diferentes temas pero apoyándonos en la medida de lo posible y teniendo grandes pláticas que he disfrutado mucho. Un agradecimiento especial a Any, quien llegó al grupo como invitada pero que se ganó un lugar especial por la gran amiga que es. Por último, quiero agradecer a mi gran amigo, ahora colega y en ocasiones guía académico, Jonathan. Gracias por la orientación y apoyo en la realización de este trabajo. Por las opiniones, puntos de vista y recomendaciones que dieron lugar a una mejor calidad en mi trabajo y que refleja una significativa amistad para mí.

Investigación realizada gracias al apoyo recibido por parte del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM, proyecto IN107122. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida. De igual modo, agradezco el apoyo recibido por parte del CONAHCyT como ayudante de investigador emérito (EXP. AYTE. 17414) durante la elaboración del presente trabajo.

*Para el pequeño Emilio, de tu tío con todo el amor.*

*“Mirad, en la vida no hay soluciones, sino fuerzas en marcha.  
Es preciso crearlas, y las soluciones vienen”*

*Antoine de Saint-Exupery.*

# Resumen/Abstract

---

En este trabajo se presentan resultados del cálculo de la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula esférica de radio fijo, asociada al campo electromagnético que esparce al interactuar con un electrón que se mueve con velocidad relativista constante con un parámetro de impacto fijo (distancia mínima entre el centro de la nanopartícula y la trayectoria del electrón). El electrón considerado representa a los electrones típicamente empleados en la microscopía de transmisión y barrido electrónico, donde los electrones pueden alcanzar una rapidez de hasta 0.85 veces la rapidez de la luz ( $\sim 0.46$  MeV). Cálculos previos reportados muestran que el vector de Poynting para partículas pequeñas (de radio de 3 nanómetros) es tal que la fuerza de retroceso es nula. En este trabajo se calcula la fuerza de retroceso en función del tiempo para nanopartículas grandes (de hasta 10 nanómetros de radio) considerando la aproximación dipolar del campo electromagnético esparcido. El cálculo de la fuerza de retroceso se realizó para nanopartículas hechas de cada uno de los siguientes materiales: aluminio, oro, bismuto y carburo de silicio. Los resultados mostrados en el presente trabajo demuestran que la fuerza de retroceso es mayor para partículas grandes (10 nanómetros de radio) y en materiales conductores como el oro. La dirección de la fuerza depende tanto del parámetro de impacto como de la rapidez del electrón.

This work presents results of the calculation of the recoil force that a spherical nanoparticle with fixed radius experiments, related to the electromagnetic field that it scatters when it interacts with a relativistically traveling electron with constant velocity at a fixed impact parameter (minimum distance between the center of the nanoparticle and the electron's trajectory). The considered electron represents typical electrons used in transmission and scanning electron microscopy, where electrons can reach speeds of up to 0.85 times the speed of light ( $\sim 0.46$  MeV). Previous calculations have shown that for small particles (with radius of 3 nanometers), the Poynting vector is such that the recoil force is zero. In this work, the recoil force is calculated as a function of time for large nanoparticles (up to 10 nanometers in radius) considering the dipole approximation of the scattered electromagnetic field. The calculation of the recoil force was performed for nanoparticles made of each of the following materials: aluminum, gold, bismuth, and silicon carbide. The results presented in this work demonstrate that the recoil force is higher for large particles (radius of 10 nanometers) and in metallic materials such as gold. The direction of the force depends on both the impact parameter and the electron's velocity.

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Interacción de un electrón rápido con una nanopartícula</b>	<b>6</b>
1.1. Campo electromagnético externo . . . . .	7
1.2. Campo electromagnético esparcido: Solución de Mie extendida . . . . .	9
<b>2. Fuerza de retroceso en la aproximación dipolar</b>	<b>17</b>
2.1. Momento electromagnético: Vector de Poynting y tensor de esfuerzos de Maxwell . . .	17
2.2. Fuerza de retroceso en función del tiempo . . . . .	21
<b>3. Resultados para la fuerza de retroceso en la aproximación dipolar</b>	<b>25</b>
3.1. Campo electromagnético esparcido: Aproximación dipolar eléctrica y de partícula pequeña	25
3.2. Fuerza de retroceso . . . . .	29
3.2.1. Nanopartícula de aluminio . . . . .	30
3.2.2. Nanopartícula de oro . . . . .	34
3.2.3. Nanopartícula de bismuto . . . . .	37
3.2.4. Nanopartícula de carburo de silicio . . . . .	37
<b>4. Conclusiones y trabajo a futuro</b>	<b>40</b>
4.1. Conclusiones . . . . .	40
4.2. Trabajo a futuro . . . . .	41
<b>Apéndice A. Solución de Mie extendida: Cálculos suplementarios</b>	<b>42</b>
<b>Apéndice B. Simetrías del vector de Poynting externo y esparcido</b>	<b>50</b>
<b>Apéndice C. Transformada rápida de Fourier</b>	<b>55</b>
<b>Apéndice D. Funciones dieléctricas</b>	<b>61</b>

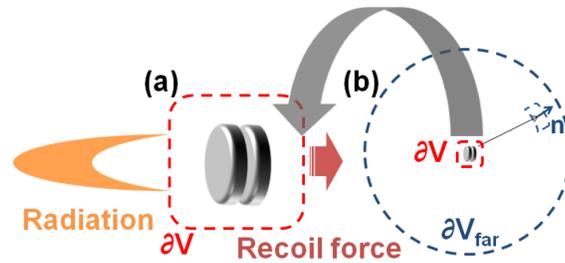


# Introducción

Una herramienta que ha resultado de gran utilidad para la investigación de estructuras electrónicas de la materia condensada a la nanoescala [1-8], es el microscopio de barrido de transmisión de electrones (STEM por sus siglas en inglés *Scanning Transmission Electron Microscope*), en el cual los electrones son acelerados alcanzando hasta una rapidez de 0.827 veces la rapidez de la luz [9, 10]. Como la corriente que produce el haz de electrones es del orden de pA, el sistema equivale a emitir un electrón que viaja a velocidad constante cada  $10^{-8}$  s que, comparado con el tiempo de vida típico de las excitaciones electrónicas en metales de  $10^{-15}$  s [11], permite modelar físicamente el sistema de los STEM como un solo electrón rápido (velocidades relativistas) que interactúa con la muestra como superficies o nanopartículas (NP) [12-15]. Para el caso de una NP, el sistema se puede modelar como una NP esférica de radio  $a$  que interactúa con un electrón que se mueve con rapidez constante relativa a la de la luz  $\beta$  en dirección  $z$ , a un parámetro de impacto  $b$  (distancia mínima entre el centro de la NP y la trayectoria del electrón).

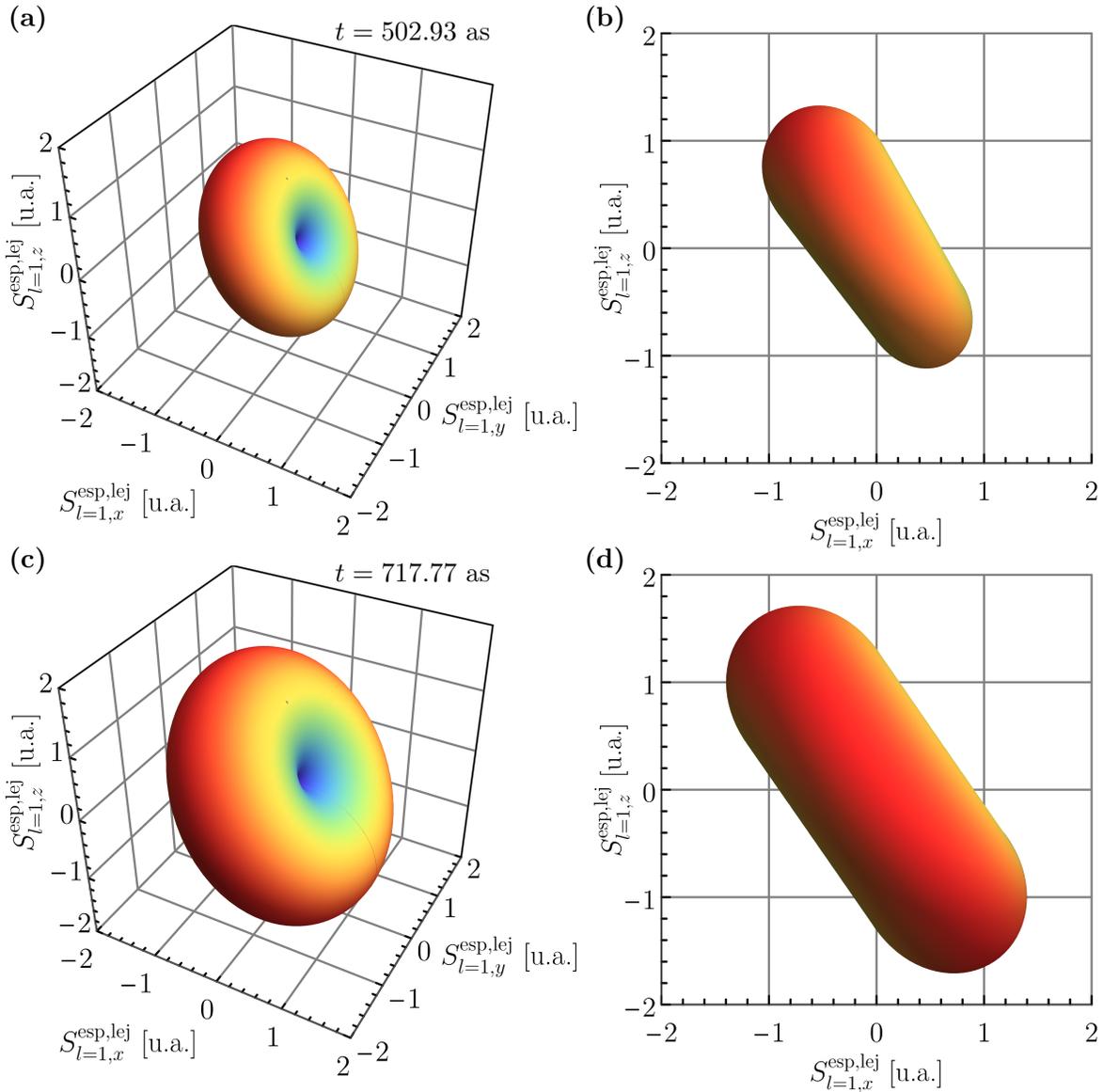
Un enfoque que se le ha dado en los últimos años a la investigación de la interacción de un electrón rápido con una NP es el cálculo de la transferencia de momento lineal y momento angular [16-22] variando el tamaño de la NP, el parámetro de impacto, la rapidez del electrón y el material del que está hecha la NP. En 2021 se estudió la fuerza en función del tiempo que ejerce un electrón sobre una NP esférica y la fuerza que ejerce la NP sobre el electrón, considerando una NP pequeña de radio  $a = 3$  nm [23]. En este estudio, se reportó que el vector de Poynting asociado al campo electromagnético (EM) esparcido por la NP presenta simetría esférica y por tanto no hay procesos de radiación que contribuyan a la fuerza que experimenta la NP bajo la aproximación de partícula pequeña.

Por otra parte, la fuerza de retroceso asociada al campo EM radiado ha sido estudiada en nanoantenas con patrones de radiación asimétricos modelándolas como generadores de fuerza de retroceso impulsados por luz esparcida [24]. En este estudio se reporta un resultado importante: la fuerza de retroceso se asocia directamente con la integral de superficie del tensor de esfuerzos de Maxwell que es proporcional al vector de Poynting dado por el campo EM en el campo lejano (ver Fig. 1), definiendo la fuerza de retroceso como la fuerza resultante asociada a la pérdida de momento por radiación EM de la nanoantena.



**Fig. 1:** Cálculo de la fuerza de retroceso de una nanoantena mediante (a) la integral del tensor de esfuerzos de Maxwell sobre la superficie  $\partial V$  y (b) sumando vectorialmente el vector de Poynting sobre la superficie  $\partial V_{\text{far}}$  en campo lejano. Imagen extraída y adaptada de Ref. [24].

En el caso del problema de interacción de un electrón rápido con una NP esférica, la Fig. 2 muestra el patrón de radiación asociado al vector de Poynting calculado con el campo EM lejano que esparsa una NP hecha de aluminio y de radio  $a = 10$  nm, tamaño en el que se espera se presente una fuerza de retroceso. En la Fig. 2(a) se muestra el patrón de radiación para  $t = 502.93$  as, donde se presenta una aparente simetría toroidal pero que desde una perspectiva frontal en la dirección  $\hat{e}_y$  [ver Fig. 2(b)] muestra un lóbulo predominante que se interpreta como el crecimiento de la magnitud del vector de Poynting en las direcciones  $-\hat{e}_x$  y  $\hat{e}_z$ . En contraste, para  $t = 717.77$  as, las Figs. 2(c-d) muestran que el patrón de radiación presenta una mayor simetría toroidal. Por tanto, resulta necesario calcular la integral de superficie del vector de Poynting para obtener la dirección de la fuerza de retroceso.



**Fig. 2:** Patrón de radiación dado por la magnitud del vector de Poynting asociado al campo EM esparsado lejano por una NP de aluminio de radio  $a = 10$  nm que interactúa con un electrón que se mueve con velocidad constante  $\mathbf{v} = 0.5c \hat{e}_z$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm, en los instantes (a)  $t = 502.93$  as y (c)  $t = 717.77$  as con perspectivas totalmente frontales en dirección  $\hat{e}_y$  (b) y (d), respectivamente. El cálculo del patrón de radiación se realizó sobre una superficie esférica de radio  $\varrho = 150$  nm, concéntrica a la NP.

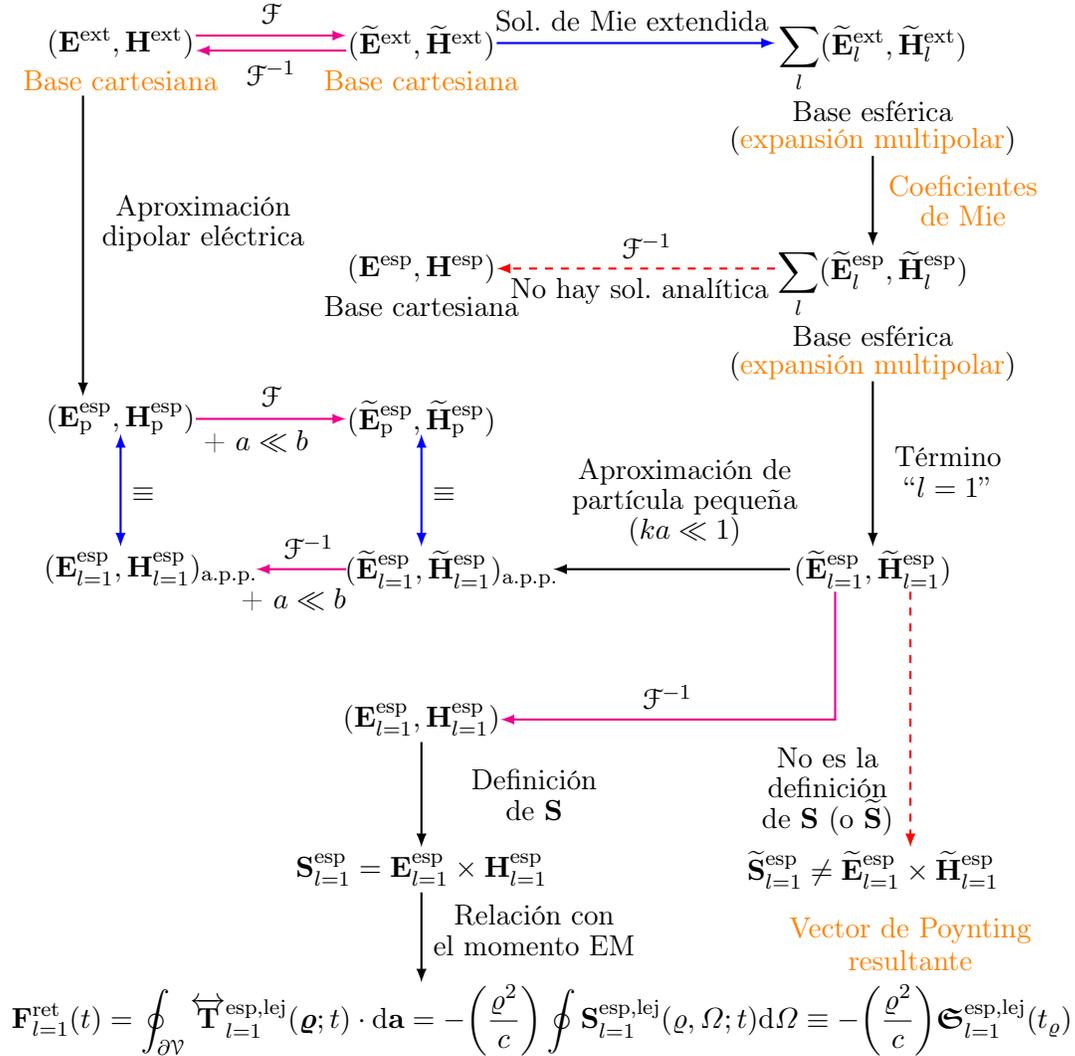
Los objetivos principales de este trabajo son calcular y comparar la fuerza de retroceso que experimenta una NP esférica variando su radio  $a$ , el parámetro de impacto  $b$ , la rapidez relativa del electrón  $\beta$  y el material del que está hecha la NP. Se realiza el cálculo de la fuerza de retroceso para una NP pequeña con el objetivo de corroborar que bajo la aproximación de partícula pequeña, la fuerza de retroceso que experimenta es nula, reproduciendo los resultados previamente reportados [23].

Para el cálculo de la fuerza de retroceso que experimenta una NP es necesario abordar dos temas principales. El primero es el cálculo del campo EM inducido en la NP debido al del electrón rápido (campo EM externo). En la Fig. 3 se muestra un mapa conceptual que ilustra cómo se han obtenido las expresiones de los campos EM externo e inducido anteriormente. Comenzando con el campo EM externo ( $\mathbf{E}^{\text{ext}}, \mathbf{H}^{\text{ext}}$ ) en función del tiempo, se calcula su transformada de Fourier temporal ( $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}, \tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}}$ ) que permite obtener su expansión multipolar  $\Sigma(\tilde{\mathbf{E}}_l^{\text{ext}}, \tilde{\mathbf{H}}_l^{\text{ext}})$  en términos de los armónicos esféricos vectoriales. A esta solución se le conoce como *solución de Mie extendida* [25, 26] por su inspiración en la solución de Mie, desarrollada por el físico alemán Gustav Mie, quien calculó el campo EM esparcido por una NP inducido por una onda EM monocromática [27, 28]. El campo EM inducido se relaciona con el campo EM externo por medio de los coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$ , análogos a los coeficientes de Mie  $a_l$  y  $b_l$ . Al calcular las expresiones del campo EM esparcido  $\Sigma(\tilde{\mathbf{E}}_l^{\text{esp}}, \tilde{\mathbf{H}}_l^{\text{esp}})$  por la NP es importante tener en cuenta el dominio en el que se trabaja. Naturalmente se buscan expresiones en función del tiempo para el campo EM esparcido ( $\mathbf{E}^{\text{esp}}, \mathbf{H}^{\text{esp}}$ ). Sin embargo, debido a la presencia de los coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$  no es posible obtener expresiones analíticas al calcular la transformada temporal de Fourier inversa. Una de las opciones para trabajar analíticamente con expresiones del campo EM esparcido en función del tiempo es la aproximación dipolar eléctrica ( $\mathbf{E}_p^{\text{esp}}, \mathbf{H}_p^{\text{esp}}$ ), modelándolo como el campo EM producido por un dipolo eléctrico puntal en el centro de la NP. Si se considera sólo el término  $l = 1$  de la expansión multipolar del campo EM esparcido ( $\tilde{\mathbf{E}}_{l=1}^{\text{esp}}, \tilde{\mathbf{H}}_{l=1}^{\text{esp}}$ ), junto con la aproximación de partícula pequeña ( $ka \ll 1$  nm, donde  $k$  es el número de onda) y un parámetro de impacto  $b \gg a$  para tener un campo EM de baja intensidad, entonces el dipolo eléctrico predomina sobre el magnético y coincide con la transformada de Fourier del campo EM en la aproximación dipolar eléctrica.

La transformada de Fourier inversa del término completo  $l = 1$  del campo EM esparcido no tiene solución analítica. Para su cálculo es necesario el segundo tema de interés: un método numérico que proporcione el comportamiento del campo EM en función del tiempo. El método empleado en este trabajo es la transformada discreta de Fourier bajo el algoritmo de la transformada rápida de Fourier para optimizar el tiempo de cómputo (ver apéndice C). Con el campo EM esparcido en función del tiempo ( $\mathbf{E}_{l=1}^{\text{esp}}, \mathbf{H}_{l=1}^{\text{esp}}$ ) es posible calcular el vector de Poynting  $\mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp}}$  asociado, pues su definición está dada en el dominio temporal. Finalmente, se calcula la fuerza de retroceso  $\mathbf{F}_{l=1}^{\text{ret}}$  que está dada en términos de la integral de superficie del vector de Poynting asociado al campo EM esparcido lejano  $\mathbf{S}_{l=1}^{\text{lej}}$  que, por su relevancia en este trabajo, se le denomina *vector de Poynting resultante*  $\mathcal{S}_{l=1}^{\text{lej}}$ .

El presente trabajo consta de cuatro capítulos y cuatro apéndices. En el capítulo 1 se desarrollan los cálculos principales de la solución de Mie extendida con un enfoque inspirado en el desarrollo planteado en la Ref. [28] para ondas EM monocromáticas. En este capítulo se muestran las expresiones para los campos EM externo en el dominio temporal y espectral, mientras que las expresiones del campo EM esparcido se presentan para la aproximación dipolar (término  $l = 1$  de la expansión multipolar) en el dominio espectral, y se introducen las expresiones para el dominio temporal en términos de las funciones espectrales auxiliares.

En el capítulo 2 se analizan las definiciones del vector de Poynting y el tensor de esfuerzos de Maxwell en el dominio temporal, así como la relación entre estas dos cantidades físicas en el campo lejano. En este capítulo se deduce la expresión de la fuerza de retroceso que experimenta una NP en términos del vector de Poynting resultante para el caso particular de la aproximación dipolar del campo EM esparcido por la NP.



**Fig. 3:** Mapa conceptual de las relaciones entre las expresiones del campo externo producido por el electrón, el campo esparcido por la nanopartícula y el vector de Poynting esparcido. Las flechas en azul indican relaciones de equivalencia entre expresiones, las magenta indican relaciones por medio de la transformada de Fourier (o su inversa) y las rojas punteadas indican relaciones con expresiones inexistentes o erróneas.

El capítulo 3 comienza con un análisis de la expresión analítica de la fuerza de retroceso a manera de predecir su comportamiento como el de una onda no dispersiva en el tiempo o pulso. Posteriormente, se muestra una comparación del cálculo de la transformada rápida de Fourier y las soluciones analíticas para la aproximación dipolar eléctrica del campo EM esparcido (dominio temporal) y la aproximación de partícula pequeña (dominio espectral), como prueba de la fiabilidad de los datos calculados por el método numérico empleado. Luego, se muestran los resultados para las componentes transversal y longitudinal de la fuerza de retroceso para NP hechas de cuatro materiales distintos: aluminio, oro, bismuto y carburo de silicio. Los resultados se muestran para tres parejas de radio y parámetro de impacto llamados *arreglos*  $\{a, b\}$ , con el objetivo de comparar los resultados según el tamaño de la NP y la distancia de su centro al punto más cercano a la trayectoria del electrón.

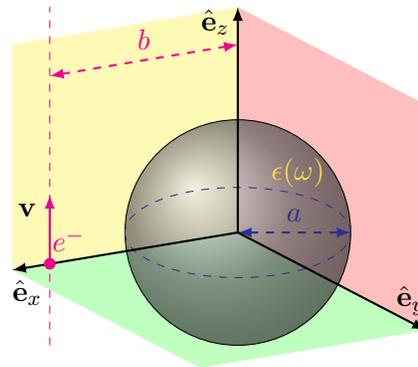
Finalmente, en el capítulo 4 se presentan las conclusiones del presente trabajo, destacando el hecho de que la fuerza de retroceso que experimenta una NP debido a la interacción con un electrón rápido se debe a la asimetría del patrón de radiación en el tiempo. Así mismo, se presentan ideas para un trabajo

a futuro en el tema del cálculo de la fuerza de retroceso así como en el uso de la metodología empleada en el presente trabajo para el cálculo de la transferencia de momento lineal y angular en la interacción de un electrón rápido con una NP esférica.

El apéndice **A** muestra los cálculos suplementarios de la solución de Mie. En el apéndice **B** se presenta el análisis de la simetría del vector de Poynting externo y esparcido. El apéndice **C** establece los aspectos generales de la transformada discreta de Fourier así como la característica principal de la transformada rápida de Fourier, y el apéndice **D** muestra los modelos y gráficas de las funciones dieléctricas empleadas para los cuatro materiales considerados en el cálculo de la fuerza de retroceso.

# Interacción de un electrón rápido con una nanopartícula

En la Fig. 1.1 se muestra el sistema a estudiar: una nanopartícula (NP) esférica, de radio  $a$ , centrada en el origen y caracterizada por una función dieléctrica  $\epsilon(\omega)$ , que interactúa con un electrón que viaja en línea recta a una velocidad  $\mathbf{v} = v\hat{\mathbf{e}}_z$ . La distancia más corta entre la trayectoria del electrón y el centro de la NP determina el parámetro de impacto  $b$ .



**Fig. 1.1:** Nanopartícula (esfera gris) de radio  $a$  caracterizada por la función dieléctrica  $\epsilon(\omega)$  inmersa en el vacío, que interactúa con un electrón (punto magenta) que viaja en dirección  $z$  cortando al eje  $x$  a una distancia  $b$  del origen. Se muestran los planos  $x = 0$ ,  $y = 0$  y  $z = 0$  en color rojo, amarillo y verde, respectivamente.

La interacción entre la NP y el electrón rápido ocurre debido a las cargas y corrientes inducidas en la NP por el campo electromagnético (EM) producido por el electrón. Para calcular el campo EM originado por las fuentes inducidas se emplea la *solución de Mie extendida* [25, 26].

## 1.1. Campo electromagnético externo

Para calcular el campo EM externo, producido por el electrón, es conveniente definir dos sistemas de referencia: el del electrón, denotado por  $M'$ , y el de la NP denotado por  $M$ . Siguiendo el principio de la relatividad especial, el campo EM externo se relaciona entre los sistemas de referencia  $M$  y  $M'$  mediante el tensor de Faraday  $F^{\mu\nu}$  dado por [29]

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

donde  $c$  es la rapidez de la luz,  $E_i$  y  $B_i$  ( $i = x, y, z$ ) son las componentes del campo eléctrico y magnético, respectivamente. La transformación de Lorentz [30]

$$\Lambda_{\mu'}^{\mu} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & \gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

corresponde al movimiento del sistema  $M'$  en la dirección  $z$  con rapidez constante  $v$  respecto al sistema  $M$  donde  $\beta = v/c$  es la rapidez relativa del electrón respecto a la de la luz y  $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$  es el factor de Lorentz [30]. Así, el campo EM observado desde el sistema de referencia  $M'$  se relaciona con el observado en  $M$  mediante [29]

$$F^{\mu\nu} = \Lambda_{\mu'}^{\mu} \Lambda_{\nu'}^{\nu} F^{\mu'\nu'}, \quad (1.3)$$

de modo que, sustituyendo las Ecs. (1.1) y (1.2) en la Ec. (1.3) se obtiene que, por componentes, el campo eléctrico externo observado desde  $M$  es

$$E_x = \gamma(E_{x'} + c\beta B_{y'}), \quad (1.4a)$$

$$E_y = \gamma(E_{y'} - c\beta B_{x'}), \quad (1.4b)$$

$$E_z = E_{z'}, \quad (1.4c)$$

mientras que el campo magnético es

$$B_x = \gamma(B_{x'} - \beta \frac{E_{y'}}{c}), \quad (1.4d)$$

$$B_y = \gamma(B_{y'} + \beta \frac{E_{x'}}{c}), \quad (1.4e)$$

$$B_z = B_{z'}. \quad (1.4f)$$

El campo EM externo observado desde  $M'$  es

$$\mathbf{E}'(\mathbf{r}'; t') = \left( \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{-e}{|\mathbf{r}'|^2} \hat{\mathbf{e}}_r = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{x'\hat{\mathbf{e}}_{x'} + y'\hat{\mathbf{e}}_{y'} + z'\hat{\mathbf{e}}_{z'}}{[(x')^2 + (y')^2 + (z')^2]^{3/2}}, \quad (1.5a)$$

$$\mathbf{B}'(\mathbf{r}'; t') = \mathbf{0}, \quad (1.5b)$$

donde se debe considerar que son expresiones en función de las coordenadas de  $M'$ , es decir,  $x^{\mu'} = (ct', x', y', z')$  que se relacionan con las coordenadas del sistema  $M$  mediante la matriz de transformación de Lorentz, Ec. (1.2), de modo que [30]

$$x' = x - b, \quad (1.6a)$$

$$y' = y, \quad (1.6b)$$

$$z' = \gamma(z - \beta ct), \quad (1.6c)$$

$$ct' = \gamma(ct - \beta z). \quad (1.6d)$$

Sustituyendo las Ecs. (1.5) y (1.6) en las Ecs. (1.4) y definiendo  $R = \sqrt{(x-b)^2 + y^2}$ , se obtiene que el campo EM externo en función de las coordenadas del sistema  $M$  es [31]

#### Campo EM externo en función del tiempo

$$\mathbf{E}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \gamma \left\{ \frac{(x-b)\hat{\mathbf{e}}_x + y\hat{\mathbf{e}}_y + (z-\beta ct)\hat{\mathbf{e}}_z}{[R^2 + \gamma^2(z-\beta ct)^2]^{3/2}} \right\}, \quad (1.7a)$$

$$\mathbf{H}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) = - \left( \frac{e}{4\pi} \right) \gamma\beta c \left\{ \frac{-y\hat{\mathbf{e}}_x + (x-b)\hat{\mathbf{e}}_y}{[R^2 + \gamma^2(z-\beta ct)^2]^{3/2}} \right\}. \quad (1.7b)$$

La metodología para calcular el campo esparcido por la NP consiste en realizar los cálculos el dominio espectral (en función de la frecuencia  $\omega$ ), siendo necesario calcular la transformada de Fourier del campo EM externo. La convención a usar es [28]

$$\tilde{f}(\omega) = \mathcal{F}_{t \rightarrow \omega}\{f(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(i\omega t) dt, \quad (1.8a)$$

$$f(t) = \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{f}(\omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.8b)$$

haciendo énfasis que en lo siguiente, las cantidades denotadas con una virgulilla en la parte superior corresponden a expresiones en función de la frecuencia  $\omega$ , que se relacionan con la expresión correspondiente en función del tiempo  $t$  por medio de una transformada de Fourier (o su inversa), tal como se indica en las Ecs. (1.8).

Al calcular las transformadas de Fourier mediante la Ec. (1.8a) de las componentes del campo EM externo, se obtienen integrales de la forma

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\omega t)}{[R^2 + \gamma^2(z-\beta ct)^2]^{3/2}} dt, \quad (1.9a)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{(z-\beta ct) \exp(i\omega t)}{[R^2 + \gamma^2(z-\beta ct)^2]^{3/2}} dt, \quad (1.9b)$$

donde las integrales de las Ecs. (1.9) se calculan mediante un cambio de variable [32], resultando

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-i\alpha\eta)}{(1+\eta^2)^{3/2}} d\eta = 2|\alpha|K_1(|\alpha|), \quad (1.10a)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta \exp(-i\alpha\eta)}{(1+\eta^2)^{3/2}} d\eta = -2i\alpha K_0(|\alpha|), \quad (1.10b)$$

donde  $K_\nu(\alpha)$  es la función de Bessel modificada del segundo tipo de orden  $\nu$ . Sustituyendo el resultado de las Ecs. (1.10) en las expresiones para el cálculo de las transformadas de Fourier de las Ecs. (1.7) se obtiene que el campo EM externo en el dominio espectral está dado por [25]

#### Campo EM externo en función de la frecuencia

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{2\omega}{\gamma\beta^2 c^2} \right) \exp\left(i\frac{\omega z}{\beta c}\right) \left\{ \left[ \frac{\text{sgn}(\omega)}{R} K_1\left(\frac{|\omega|R}{\beta\gamma c}\right) \right] [(x-b)\hat{\mathbf{e}}_x + y\hat{\mathbf{e}}_y] - \frac{i}{\gamma} K_0\left(\frac{|\omega|R}{\beta\gamma c}\right) \hat{\mathbf{e}}_z \right\}, \quad (1.11a)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = - \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{2|\omega|}{\gamma\beta c R} \right) \exp\left(i\frac{\omega z}{\beta c}\right) K_1\left(\frac{|\omega|R}{\beta\gamma c}\right) [-y\hat{\mathbf{e}}_x + (x-b)\hat{\mathbf{e}}_y]. \quad (1.11b)$$

## 1.2. Campo electromagnético esparcido: Solución de Mie extendida

La geometría esférica de la NP sugiere utilizar la expansión multipolar dada por la *solución de Mie* [28] en términos de la base esférica para calcular el campo esparcido. Partiendo de que  $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  y  $\tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}}$  cumplen con la ecuación de Helmholtz vectorial

$$\nabla^2 \tilde{\mathbf{F}} + k^2 \tilde{\mathbf{F}} = 0, \quad (1.12)$$

pueden ser escritos como una combinación lineal de los armónicos esféricos vectoriales  $\mathbf{N}_{l,m}^{(1)}$  y  $\mathbf{M}_{l,m}^{(1)}$  (ver apéndice A). Así, el campo EM externo se escribe como

Expansión multipolar del campo EM externo en función de la frecuencia

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ iV_{l,m}(\omega) \mathbf{N}_{l,m}^{(1)}(kr, \theta, \varphi) - W_{l,m}(\omega) \mathbf{M}_{l,m}^{(1)}(kr, \theta, \varphi) \right], \quad (1.13a)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \frac{k}{\omega \mu_0} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ iW_{l,m}(\omega) \mathbf{N}_{l,m}^{(1)}(kr, \theta, \varphi) + V_{l,m}(\omega) \mathbf{M}_{l,m}^{(1)}(kr, \theta, \varphi) \right], \quad (1.13b)$$

donde el campo H externo se calcula empleando la Ley de Faraday-Lenz:  $\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}} = i\omega \mu_0 \tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}}$ . Para calcular los coeficientes  $V_{l,m}$  y  $W_{l,m}$  que aparecen en las Ecs. (1.13) se utiliza el teorema de Helmholtz que permite expresar un campo en términos de dos proyecciones: longitudinal y transversal

$$\tilde{\mathbf{F}} = \nabla \tilde{\psi}_1 + \nabla \times \tilde{\mathbf{Q}}. \quad (1.14a)$$

A su vez, la componente transversal  $\nabla \times \tilde{\mathbf{Q}}$  se puede separar en dos componentes ortogonales [33]:

$$\tilde{\mathbf{F}} = \nabla \tilde{\psi}_1 + \hat{\mathbf{L}} \tilde{\psi}_2 + \hat{\mathbf{Y}} \tilde{\psi}_3, \quad (1.14b)$$

donde el gradiente  $\nabla$ , el operador de momento angular  $\hat{\mathbf{L}} = -i\mathbf{r} \times \nabla$  y el operador definido como  $\hat{\mathbf{Y}} = (ik)^{-1} \nabla \times \hat{\mathbf{L}}$  forman un conjunto ortogonal de operadores con  $\tilde{\psi}_1$ ,  $\tilde{\psi}_2$  y  $\tilde{\psi}_3$  las respectivas proyecciones de  $\tilde{\mathbf{F}}$ , es decir

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{L}} \tilde{\psi}_2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \nabla \tilde{\psi}_1 = 0, \quad (1.15a)$$

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{Y}} \tilde{\psi}_3 = \hat{\mathbf{Y}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \tilde{\psi}_2 = 0, \quad (1.15b)$$

$$\hat{\mathbf{Y}} \cdot \nabla \tilde{\psi}_1 = \nabla \cdot \hat{\mathbf{Y}} \tilde{\psi}_3 = 0. \quad (1.15c)$$

Para el caso particular del campo eléctrico externo  $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  dado por la Ec. (1.11a), la Ec. (1.14b) se reescribe como

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \nabla \tilde{\psi}^{\text{L,ext}}(\mathbf{r}; \omega) + \hat{\mathbf{L}} \tilde{\psi}^{\text{M,ext}}(\mathbf{r}; \omega) + \hat{\mathbf{Y}} \tilde{\psi}^{\text{E,ext}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (1.16)$$

donde los superíndices L, M y E corresponden a “longitudinal”, “magnético” y “eléctrico”, respectivamente. Considerando las Ecs. (1.15) y el hecho de que la función  $\tilde{\psi}^{\text{L,ext}}$  cumple con la ecuación de Helmholtz escalar (ver apéndice A), al calcular la divergencia del campo eléctrico externo  $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  dado por la Ec. (1.16) se obtiene

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \nabla^2 \tilde{\psi}^{\text{L,ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -k^2 \tilde{\psi}^{\text{L,ext}}(\mathbf{r}; \omega), \quad \text{entonces} \quad \tilde{\psi}^{\text{L,ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -\frac{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}}{k^2}. \quad (1.17)$$

Al considerar que el electrón se mueve en el vacío,  $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  no tiene componente longitudinal, por lo tanto en este caso  $\tilde{\psi}^{\text{L,ext}}$  es cero<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Matemáticamente, la proyección longitudinal  $\tilde{\psi}^{\text{L,ext}}$  es proporcional a la transformada de Fourier de la densidad de carga eléctrica, que estrictamente es la multiplicación de dos delta de Dirac y una función exponencial compleja, pero la justificación física permite eliminarla de manera directa.

De modo que el campo EM externo se reescribe de la siguiente manera

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \hat{\mathbf{L}}\tilde{\psi}^{\text{M,ext}}(\mathbf{r}; \omega) + \hat{\mathbf{Y}}\tilde{\psi}^{\text{E,ext}}(\mathbf{r}; \omega). \quad (1.18)$$

A su vez, las funciones  $\tilde{\psi}^{\text{E,ext}}$  y  $\tilde{\psi}^{\text{M,ext}}$  cumplen con la ecuación de Helmholtz escalar [28]

$$\nabla^2 \tilde{\psi}^{\{\text{E,M}\},\text{ext}} + k^2 \tilde{\psi}^{\{\text{E,M}\},\text{ext}} = 0, \quad (1.19)$$

por lo que es posible y conveniente escribir las soluciones  $\tilde{\psi}^{\text{M,ext}}$  y  $\tilde{\psi}^{\text{E,ext}}$  en términos de las funciones esféricas de Bessel  $j_l(kr)$  y los armónicos esféricos escalares  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  (ver apéndice A), como

$$\tilde{\psi}^{\text{M,ext}} = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (1.20a)$$

$$\tilde{\psi}^{\text{E,ext}} = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (1.20b)$$

Para calcular  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  y  $\hat{\mathbf{Y}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  es necesario considerar dos resultados: el primero es que el operador de momento angular tiene como funciones propias a los armónicos esféricos escalares, en donde la ecuación de valores propios está dada por [33]

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (1.21)$$

y el segundo, que el operador  $\hat{\mathbf{Y}}$  aplicado sobre sí mismo es  $\hat{\mathbf{Y}}^2 = -k^{-2} \nabla^2 \hat{L}^2$ , donde los operadores  $\nabla^2$  y  $\hat{L}^2$  conmutan entre sí [33]. Considerando a su vez las Ecs. (1.15), (1.16) y (1.20),  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  y  $\hat{\mathbf{Y}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  están dados por

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) &= \hat{L}^2 \tilde{\psi}^{\text{M,ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}} j_l(kr) \hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l l(l+1) \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (1.22a)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Y}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) &= \hat{\mathbf{Y}}^2 \tilde{\psi}^{\text{E,ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -k^{-2} \nabla^2 \hat{L}^2 \tilde{\psi}^{\text{E,ext}} = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}} j_l(kr) \hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l l(l+1) \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (1.22b)$$

Por otra parte, sustituyendo las Ecs. (1.20) en la Ec. (1.18), se obtiene

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}} f_{l,m} \hat{\mathbf{L}} [j_l(kr) P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)] \right. \\ &\quad \left. + \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}} f_{l,m} \hat{\mathbf{Y}} [j_l(kr) P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)] \right\} \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left\{ \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}} f_{l,m} i \mathbf{M}_{l,m}^{(1)}(kr, \theta, \varphi) + \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}} f_{l,m} \mathbf{N}_{l,m}^{(1)}(kr, \theta, \varphi) \right\}, \end{aligned} \quad (1.23)$$

donde  $f_{l,m}$  es la constante de normalización de los armónicos esféricos escalares (ver apéndice A). Comparando la expresión del campo eléctrico externo dado por la Ec. (1.13a) con la dada en la Ec. (1.23), se obtiene que los coeficientes  $V_{l,m}$  y  $W_{l,m}$  se relacionan con los coeficientes  $\tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}}$  y  $\tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}}$  como

$$V_{l,m} = -i f_{l,m} \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}}, \quad (1.24a)$$

$$W_{l,m} = -i f_{l,m} \tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}}. \quad (1.24b)$$

## 1.2 Campo electromagnético esparcido: Solución de Mie extendida

Para calcular los coeficientes  $\tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}}$  y  $\tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}}$  que aparecen en las Ecs. (1.20) se utiliza el resultado de otro procedimiento que aborda el mismo problema pero desde otro punto de partida. Es posible calcular tanto el campo EM externo en términos del potencial escalar  $\phi$  y el potencial vectorial  $\mathbf{A}$  dados por las ecuaciones de Maxwell (específicamente la ley de Gauss magnética y la ley de Faraday-Lenz) y a su vez, el potencial vectorial se puede expresar en términos del potencial escalar dada la naturaleza de la fuente externa de corriente (ver apéndice A). Calculando  $\hat{\mathbf{L}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  y  $\hat{\mathbf{Y}} \cdot \tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}$  por medio de la sustitución de la Ec. (A.40) en la Ec. (A.35a) y comparando con las Ecs. (1.22), se obtiene que [26]

$$\tilde{\psi}_{l,m}^{\text{M,ext}} = -i \frac{ek\beta}{c\epsilon_0} \frac{mA_{l,m}^{(+)}}{l(l+1)} K_m \left( \frac{|\omega|b}{\beta\gamma c} \right), \quad (1.25a)$$

$$\tilde{\psi}_{l,m}^{\text{E,ext}} = -i \frac{ek}{c\epsilon_0\gamma} \frac{B_{l,m}}{2l(l+1)} K_m \left( \frac{|\omega|b}{\beta\gamma c} \right), \quad (1.25b)$$

donde

$$B_{l,m} = A_{l,m+1}^{(+)} \sqrt{(l+m+1)(l-m)} - A_{l,m-1}^{(+)} \sqrt{(l-m+1)(l+m)}, \quad (1.26a)$$

$$A_{l,m}^{(+)} = \frac{f_{l,m}(2l+1)!!}{\beta^{l+1}} \sum_{j=m}^l \frac{i^{l-j}}{(l-j)! \left(\frac{j-m}{2}\right)! \left(\frac{j+m}{2}\right)! (2\gamma)^j} \mathcal{J}_{j,l-j}^{l,m}, \quad (1.26b)$$

y los números  $\mathcal{J}_{j,l-j}^{l,m}$  se calculan mediante la relación de recurrencia<sup>2</sup>

$$(l-m)\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{l,m} = (2l-1)\mathcal{J}_{i_1,i_2+1}^{l-1,m} - (l+m-1)\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{l-2,m}, \quad (1.26c)$$

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

$$\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{m,m} = \begin{cases} (-1)^m (2m-1)!! B\left(\frac{i_1+m+2}{2}, \frac{i_2+1}{2}\right), & \text{si } i_2 \text{ es par} \\ 0, & \text{si } i_2 \text{ es impar} \end{cases}, \quad (1.26d)$$

donde  $B(\mu, \nu)$  es la función beta. Finalmente, sustituyendo las Ecs. (1.25) en las Ecs. (1.24), se obtiene que los coeficientes que multiplican a los armónicos esféricos vectoriales en la expansión multipolar del campo EM externo son

Coeficientes  $V_{l,m}$  y  $W_{l,m}$  de la expansión multipolar del campo EM externo

$$V_{l,m}(\omega) = -\frac{ek}{\epsilon_0 c \gamma} \frac{f_{l,m} B_{l,m}}{2l(l+1)} K_m \left( \frac{|\omega|b}{\beta\gamma c} \right), \quad (1.27a)$$

$$W_{l,m}(\omega) = -e\mu_0 k \beta c \frac{m f_{l,m} A_{l,m}^{(+)}}{l(l+1)} K_m \left( \frac{|\omega|b}{\beta\gamma c} \right). \quad (1.27b)$$

Para calcular el campo esparcido, se plantean dos regiones divididas por la superficie de la partícula: en su interior se trata de un material sólido, homogéneo e isótropo del que está hecha la NP y en el exterior es vacío. Las condiciones de frontera que deben cumplir los campos eléctrico  $\tilde{\mathbf{E}}$  y  $\tilde{\mathbf{H}}$  son

$$(\tilde{\mathbf{E}}^{\text{int}} - \tilde{\mathbf{E}}^{\text{out}})|_{r=a} \times \hat{\mathbf{n}} = 0 \quad \text{y} \quad (\tilde{\mathbf{H}}^{\text{int}} - \tilde{\mathbf{H}}^{\text{out}})|_{r=a} \times \hat{\mathbf{n}} = 0, \quad (1.28)$$

donde los superíndices “int” y “out” refieren a los campos EM en las regiones interior y exterior (respecto a la superficie de la partícula), respectivamente. Las Ecs. (1.28) representan la continuidad de la componente paralela a la superficie esférica con vector normal  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_r$ . A su vez, el campo EM exterior ( $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{out}}, \tilde{\mathbf{H}}^{\text{out}}$ ) se compone de la superposición de dos campos EM: el campo EM externo ( $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}, \tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}}$ ) y el campo EM que esparce la NP ( $\tilde{\mathbf{E}}^{\text{esp}}, \tilde{\mathbf{H}}^{\text{esp}}$ ). Así

<sup>2</sup>Los números  $\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{l,m}$  son coeficientes que no dependen de los parámetros del problema ( $a$ ,  $b$  y  $\beta$ ), es decir, son números que una vez calculados, pueden ser almacenados en una base de datos y ser reutilizados para futuros cálculos.

$$(\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}} + \tilde{\mathbf{E}}^{\text{esp}} - \tilde{\mathbf{E}}^{\text{int}})|_{r=a} \times \hat{\mathbf{e}}_r = 0 \quad \text{y} \quad (\tilde{\mathbf{H}}^{\text{ext}} + \tilde{\mathbf{H}}^{\text{esp}} - \tilde{\mathbf{H}}^{\text{int}})|_{r=a} \times \hat{\mathbf{e}}_r = 0. \quad (1.29)$$

Al igual que el campo EM externo, los campos EM esparcido e interno también son solución a la ecuación de Helmholtz vectorial, entonces son combinaciones lineales de los armónicos esféricos vectoriales. Así, el campo dentro de la partícula es

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ i s_l^{\text{E}}(\omega) V_{l,m}(\omega) \mathbf{N}_{l,m}^{(1)}(k_{\text{int}} r, \theta, \varphi) - s_l^{\text{M}}(\omega) W_{l,m}(\omega) \mathbf{M}_{l,m}^{(1)}(k_{\text{int}} r, \theta, \varphi) \right], \quad (1.30a)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) = \frac{k_{\text{int}}}{\omega \mu_{\text{int}}} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ i s_l^{\text{M}}(\omega) W_{l,m}(\omega) \mathbf{N}_{l,m}^{(1)}(k_{\text{int}} r, \theta, \varphi) + s_l^{\text{E}}(\omega) V_{l,m}(\omega) \mathbf{M}_{l,m}^{(1)}(k_{\text{int}} r, \theta, \varphi) \right], \quad (1.30b)$$

donde, tal como en las Ecs. (1.13) del campo EM externo, el superíndice (1) en los armónicos esféricos vectoriales denota que se emplea  $j_l$  para la solución radial (dado que no diverge en el origen). Los coeficientes de proporcionalidad  $s_l^{\text{E}}$  y  $s_l^{\text{M}}$  sólo dependen de la frecuencia angular. Cabe mencionar que al tratarse del campo interno, los armónicos esféricos vectoriales están evaluados dentro de la partícula, por lo que en vez de tratarse de una dependencia de  $kr$  se trata de una dependencia de  $k_{\text{int}} r$ , donde  $k_{\text{int}} = Nk$  y  $N$  es el índice de refracción de la partícula. Para el campo esparcido se pueden emplear tanto  $j_l$  como  $y_l$  dado que representan soluciones físicamente aceptables (no divergen en la región del espacio en cuestión). Empleando las funciones esféricas de Hankel  $h_l^{(+)}$  y  $h_l^{(-)}$  [34] en su límite asintótico ( $l^2 \ll kr$ ) [28]:

$$h_l^{(+)}(kr) \approx (-i)^l \frac{\exp(ikr)}{kr}, \quad (1.31a)$$

$$h_l^{(-)}(kr) \approx -i^l \frac{\exp(-ikr)}{kr}, \quad (1.31b)$$

se obtiene que  $h_l^{(+)}$  corresponde a una onda esférica saliente y  $h_l^{(-)}$  a una onda entrante. Dado que el campo esparcido es una onda saliente de la partícula, se emplea  $h_l^{(+)}$  como solución a la parte radial. Entonces, el campo esparcido está dado por

Expansión multipolar del campo EM esparcido por la NP en función de la frecuencia

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ i t_l^{\text{E}}(\omega) V_{l,m}(\omega) \mathbf{N}_{l,m}^{(3)}(kr, \theta, \varphi) - t_l^{\text{M}}(\omega) W_{l,m}(\omega) \mathbf{M}_{l,m}^{(3)}(kr, \theta, \varphi) \right], \quad (1.32a)$$

$$\tilde{\mathbf{H}}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) = \frac{k}{\omega \mu_0} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[ i t_l^{\text{M}}(\omega) W_{l,m}(\omega) \mathbf{N}_{l,m}^{(3)}(kr, \theta, \varphi) + t_l^{\text{E}}(\omega) V_{l,m}(\omega) \mathbf{M}_{l,m}^{(3)}(kr, \theta, \varphi) \right], \quad (1.32b)$$

donde ahora el superíndice (3) en los armónicos esféricos vectoriales denota a  $h_l^{(+)}$  como solución a la parte radial y los coeficientes de proporcionalidad  $t_l^{\text{E}}$  y  $t_l^{\text{M}}$  sólo dependen de la frecuencia angular.

Desarrollando por componentes las Ecs. (1.29), se obtienen las siguientes cuatro ecuaciones:

$$\left( \tilde{E}_{\theta}^{\text{ext}} + \tilde{E}_{\theta}^{\text{esp}} - \tilde{E}_{\theta}^{\text{int}} \right) \Big|_{r=a} = 0, \quad (1.33a)$$

$$\left( \tilde{E}_{\varphi}^{\text{ext}} + \tilde{E}_{\varphi}^{\text{esp}} - \tilde{E}_{\varphi}^{\text{int}} \right) \Big|_{r=a} = 0, \quad (1.33b)$$

$$\left( \tilde{H}_{\theta}^{\text{ext}} + \tilde{H}_{\theta}^{\text{esp}} - \tilde{H}_{\theta}^{\text{int}} \right) \Big|_{r=a} = 0, \quad (1.33c)$$

$$\left( \tilde{H}_{\varphi}^{\text{ext}} + \tilde{H}_{\varphi}^{\text{esp}} - \tilde{H}_{\varphi}^{\text{int}} \right) \Big|_{r=a} = 0, \quad (1.33d)$$

donde los subíndices  $\theta$  y  $\varphi$  aluden a las componentes tangenciales, en coordenadas esféricas, sobre la superficie esférica de radio  $a$  con vector normal  $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{e}}_r$ . Sustituyendo los armónicos esféricos vectoriales, considerando

$r = a$ , en las expresiones de los campos EM externo, interno y esparcido, imponiendo las Ecs. (1.33) y las relaciones de ortogonalidad entre  $\pi_l^m$  y  $\tau_l^m$  dadas por las Ecs. (A.48), se obtiene un sistema de cuatro ecuaciones lineales<sup>3</sup> para los cuatro coeficientes  $t_l^E$ ,  $t_l^M$ ,  $s_l^E$  y  $s_l^M$  a calcular:

$$\psi_l(\mathbf{x}) + t_l^M \xi_l(\mathbf{x}) = s_l^M \psi_l(N\mathbf{x}), \quad (1.34a)$$

$$N\psi_l'(\mathbf{x}) + Nt_l^E \xi_l'(\mathbf{x}) = s_l^E \psi_l'(N\mathbf{x}), \quad (1.34b)$$

$$\mu_{\text{int}} \psi_l(\mathbf{x}) + \mu_{\text{int}} t_l^E \xi_l(\mathbf{x}) = \mu_0 N s_l^E \psi_l(N\mathbf{x}), \quad (1.34c)$$

$$\mu_{\text{int}} \psi_l'(\mathbf{x}) + \mu_{\text{int}} t_l^M \xi_l'(\mathbf{x}) = \mu_0 s_l^M \psi_l'(N\mathbf{x}), \quad (1.34d)$$

donde  $N$  es el índice de refracción relativo de la partícula respecto al de la matriz en la que está inmersa (al tratarse del vacío,  $N$  coincide con el índice de refracción del material del que está hecha la NP),  $\mathbf{x} = ka$  es el *parámetro de tamaño*<sup>4</sup> y, para ganar estabilidad en los cálculos numéricos, se reemplazan las funciones esféricas de Bessel y de Hankel por las funciones de Riccati-Bessel [28]:

$$\psi_l(\eta) = \eta j_l(\eta), \quad (1.35a)$$

$$\xi_l(\eta) = \eta h_l^{(+)}(\eta). \quad (1.35b)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones dado por las Ecs. (1.34), se obtienen las siguientes expresiones para los coeficientes

$$t_l^E = -\frac{\mu_{\text{int}} \psi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \mu_0 N \psi_l(N\mathbf{x}) \psi_l'(\mathbf{x})}{\mu_{\text{int}} \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \mu_0 N \psi_l(N\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}, \quad (1.36a)$$

$$t_l^M = -\frac{\mu_0 N \psi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \mu_{\text{int}} \psi_l(N\mathbf{x}) \psi_l'(\mathbf{x})}{\mu_0 N \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \mu_{\text{int}} \psi_l(N\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}, \quad (1.36b)$$

$$s_l^E = \frac{\mu_{\text{int}} N \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(\mathbf{x}) - \mu_{\text{int}} N \psi_l(\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}{\mu_{\text{int}} \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \mu_0 N \psi_l(N\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}, \quad (1.36c)$$

$$s_l^M = \frac{\mu_{\text{int}} N \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(\mathbf{x}) - \mu_{\text{int}} N \psi_l(\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}{\mu_0 N \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \mu_{\text{int}} \psi_l(N\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}. \quad (1.36d)$$

Se considera que la permeabilidad magnética de la partícula es igual a la del vacío (material no magnético), simplificando así los coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$ <sup>5</sup> que multiplican a los armónicos esféricos vectoriales en la expansión multipolar del campo EM esparcido como

Coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$  de la expansión multipolar del campo EM esparcido por la NP

$$t_l^E(\omega) = -\frac{\psi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - N \psi_l(N\mathbf{x}) \psi_l'(\mathbf{x})}{\xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - N \psi_l(N\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}, \quad (1.37a)$$

$$t_l^M(\omega) = -\frac{N \psi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \psi_l(N\mathbf{x}) \psi_l'(\mathbf{x})}{N \xi_l(\mathbf{x}) \psi_l'(N\mathbf{x}) - \psi_l(N\mathbf{x}) \xi_l'(\mathbf{x})}. \quad (1.37b)$$

Para calcular la fuerza EM asociada al campo EM inducido (esparcido e interno) en función del tiempo, se debe calcular la transformada de Fourier de las Ecs. (1.30) y (1.32), respectivamente. El problema radica en que no hay solución analítica para las integrales que resultan al realizar el cálculo. En el presente trabajo se considera la aproximación dipolar para abordar el problema, es decir, el término correspondiente a  $l = 1$  en la expansión multipolar del campo EM esparcido por la NP. Sustituyendo  $l = 1$  en la Ec. (1.32a), las componentes esféricas del campo eléctrico esparcido por la NP son

<sup>3</sup>El sistema de ecuaciones que se obtiene de sustituir en las Ecs. (1.33a) y (1.33b) es equivalente al que se obtiene sustituyendo en las Ecs. (1.33c) y (1.33d). No es necesario sustituir en las cuatro ecuaciones, es suficiente con un par.

<sup>4</sup>Para evitar confusiones, el parámetro de tamaño se define mediante el símbolo  $\mathbf{x}$  diferente a la variable espacial  $x$ .

<sup>5</sup>Los coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$  se relacionan con los coeficientes de Mie  $a_l$  y  $b_l$  por medio de una unidad imaginaria:  $t_l^E = ia_l$  y  $t_l^M = ib_l$ . La diferencia radica en la implementación de la función esférica de Hankel  $h_l^{(1)}$  en la solución de Mie y la función esférica de Hankel  $h_l^{(+)}$  en la solución de Mie extendida.

$$\tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{6k}{c\gamma\beta^2} t_1^{\text{E}} \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} \left[ \sin\theta \cos\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) + \frac{i}{\gamma} \cos\theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right], \quad (1.38a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) &= \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3k}{c\gamma\beta^2} \left\{ it_1^{\text{M}} \beta \cos\varphi h_1^{(+)}(kr) K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) + t_1^{\text{E}} \left[ \cos\theta \cos\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{i}{\gamma} \sin\theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right] \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.38b)$$

$$\tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3k}{c\gamma\beta^2} \sin\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \left\{ t_1^{\text{E}} \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] + it_1^{\text{M}} \beta \cos\theta h_1^{(+)}(kr) \right\}, \quad (1.38c)$$

mientras que, sustituyendo  $l = 1$  en la Ec. (1.32b), las componentes esféricas del campo H esparcido por la NP son

$$\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{6k}{\gamma\beta} t_1^{\text{M}} K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} \sin\theta \sin\varphi, \quad (1.39a)$$

$$\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{3k}{\gamma\beta^2} K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \sin\varphi \left\{ it_1^{\text{E}} h_1^{(+)}(kr) + \beta t_1^{\text{M}} \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \cos\theta \right\}, \quad (1.39b)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega) &= \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{3k}{\gamma\beta^2} \left\{ t_1^{\text{E}} h_1^{(+)}(kr) \left[ iK_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \cos\theta \cos\varphi + \frac{1}{\gamma} K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \sin\theta \right] \right. \\ &\quad \left. + \beta t_1^{\text{M}} K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \cos\varphi \right\}. \end{aligned} \quad (1.39c)$$

Realizando las transformadas de Fourier inversas temporales de las componentes del campo eléctrico y del campo H mostradas en las Ecs. (1.38) y (1.39), respectivamente, se obtienen las componentes del campo eléctrico en función del tiempo

Componentes esféricas del término dipolar del campo eléctrico esparcido por la NP

$$E_{l=1,r}^{\text{esp}}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{6}{c\gamma\beta^2 r} \right) \left[ \sin\theta \cos\varphi \Omega_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) + \frac{\cos\theta}{\gamma} \Omega_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t) \right], \quad (1.40a)$$

$$\begin{aligned} E_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(\mathbf{r}, t) &= \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{3}{c\gamma\beta^2} \right) \left\{ \frac{\beta}{c} \cos\varphi \Omega_{1,1}^{\text{M},(2)}(r, t) + \cos\theta \cos\varphi \left[ \frac{2}{r} \Omega_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \Omega_{2,1}^{\text{E},(2)}(r, t) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sin\theta}{\gamma} \left[ \frac{2}{r} \Omega_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \Omega_{2,0}^{\text{E},(2)}(r, t) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.40b)$$

$$E_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(\mathbf{r}, t) = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{3}{c\gamma\beta^2} \right) \sin\varphi \left[ \frac{2}{r} \Omega_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \Omega_{2,1}^{\text{E},(2)}(r, t) + \frac{\beta}{c} \cos\theta \Omega_{1,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right], \quad (1.40c)$$

y las componentes del campo H en función del tiempo

Componentes esféricas del término dipolar del campo H esparcido por la NP

$$H_{l=1,r}^{\text{esp}}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{6}{\gamma\beta^2 r} \right) \beta \sin\theta \sin\varphi \Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t), \quad (1.41a)$$

$$H_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{3}{\gamma\beta^2} \right) \sin\varphi \left\{ \frac{1}{c} \Omega_{1,1}^{\text{E},(2)}(r, t) + \beta \cos\theta \left[ \frac{2}{r} \Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \Omega_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right] \right\}, \quad (1.41b)$$

$$\begin{aligned} H_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(\mathbf{r}, t) &= \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{3}{\gamma\beta^2} \right) \left\{ \frac{1}{c} \cos\theta \cos\varphi \Omega_{1,1}^{\text{E},(2)}(r, t) + \frac{\sin\theta}{\gamma} \Omega_{1,0}^{\text{E},(2)}(r, t) \right. \\ &\quad \left. + \beta \cos\varphi \left[ \frac{2}{r} \Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \Omega_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (1.41c)$$

Las Ecs. (1.40) y (1.41) son expresiones semianalíticas, dado que se definen las funciones espectrales auxiliares  $\Omega_{n_1, n_2}^{\{E, M\}, (j)}$ ( $r; t$ ) como

$$\Omega_{1,1}^{E,(1)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t_1^E(\omega) h_1^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42a)$$

$$\Omega_{1,0}^{E,(1)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i t_1^E(\omega) h_1^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_0\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42b)$$

$$\Omega_{2,1}^{E,(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega t_1^E(\omega) h_2^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42c)$$

$$\Omega_{2,0}^{E,(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i \omega t_1^E(\omega) h_2^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_0\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42d)$$

$$\Omega_{1,1}^{E,(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i \omega t_1^E(\omega) h_1^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42e)$$

$$\Omega_{1,0}^{E,(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega t_1^E(\omega) h_1^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_0\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42f)$$

$$\Omega_{1,1}^{M,(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i \omega t_1^M(\omega) h_1^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42g)$$

$$\Omega_{1,1}^{M,(1)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t_1^M(\omega) h_1^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42h)$$

$$\Omega_{2,1}^{M,(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega t_1^M(\omega) h_2^{(+)}\left(\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{c\gamma\beta}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.42i)$$

que son integrales a resolver numéricamente, donde los superíndices E y M refieren a utilizar el coeficiente  $t_1^E$  o  $t_1^M$ , respectivamente, y  $j = 2$  corresponde a multiplicar por un factor  $\omega$  ( $j_1 = 1$  no lo considera). Por otra parte, sustituyendo  $l = 1$  en la Ec. (1.30a), las componentes esféricas del campo eléctrico interno de la NP son

$$\tilde{E}_{l=1,r}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) = \left(\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{6Nk}{c\gamma\beta^2} s_1^E \frac{j_1(Nkr)}{Nkr} \left[ \sin\theta \cos\varphi K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) + \frac{i}{\gamma} \cos\theta K_0\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \right], \quad (1.43a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) &= \left(\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{3Nk}{c\gamma\beta^2} \left\{ i s_1^M \beta \cos\varphi j_1(kr) K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) + s_1^E \left[ \cos\theta \cos\varphi K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{i}{\gamma} \sin\theta K_0\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \right] \left[ 2\frac{j_1(Nkr)}{Nkr} - j_2(Nkr) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.43b)$$

$$\tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) = -\left(\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{3Nk}{c\gamma\beta^2} \sin\varphi K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \left\{ s_1^E \left[ 2\frac{j_1(Nkr)}{Nkr} - j_2(Nkr) \right] + i s_1^M \beta \cos\theta j_1(Nkr) \right\}, \quad (1.43c)$$

y sustituyendo  $l = 1$  en la Ec. (1.30b), las componentes del campo H interno de la NP son

$$\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) = \left(\frac{e}{4\pi}\right) \frac{6Nk}{\gamma\beta} s_1^M K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \frac{j_1(Nkr)}{Nkr} \sin\theta \sin\varphi, \quad (1.44a)$$

$$\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) = \left(\frac{e}{4\pi}\right) \frac{3Nk}{\gamma\beta^2} K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \sin\varphi \left\{ i s_1^E j_1(Nkr) + \beta s_1^M \left[ 2\frac{j_1(Nkr)}{Nkr} - j_2(Nkr) \right] \cos\theta \right\}, \quad (1.44b)$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{int}}(\mathbf{r}; \omega) &= \left(\frac{e}{4\pi}\right) \frac{3Nk}{\gamma\beta^2} \left\{ s_1^E j_1(Nkr) \left[ i K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \cos\theta \cos\varphi + \frac{1}{\gamma} K_0\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \sin\theta \right] \right. \\ &\quad \left. + \beta s_1^M K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \left[ 2\frac{j_1(Nkr)}{Nkr} - j_2(Nkr) \right] \cos\varphi \right\}. \end{aligned} \quad (1.44c)$$

Calculando la transformada temporal inversa de Fourier de las componentes del campo eléctrico y del campo H mostradas en las Ecs. (1.43) y (1.44), respectivamente, se obtienen las componentes del campo eléctrico en función del tiempo

## Componentes esféricas del término dipolar del campo eléctrico interno de la NP

$$E_{l=1,r}^{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{6}{c\gamma\beta^2 r} \right) \left[ \sin\theta \cos\varphi \mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) + \frac{\cos\theta}{\gamma} \mathcal{U}_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t) \right], \quad (1.45a)$$

$$E_{l=1,\theta}^{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{3}{c\gamma\beta^2} \right) \left\{ \frac{\beta}{c} \cos\varphi \mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(2)}(r, t) + \cos\theta \cos\varphi \left[ \frac{2}{r} \mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \mathcal{U}_{2,1}^{\text{E},(2)}(r, t) \right] \right. \\ \left. - \frac{\sin\theta}{\gamma} \left[ \frac{2}{r} \mathcal{U}_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \mathcal{U}_{2,0}^{\text{E},(2)}(r, t) \right] \right\}, \quad (1.45b)$$

$$E_{l=1,\varphi}^{\text{int}}(\mathbf{r}; t) = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{3}{c\gamma\beta^2} \right) \sin\varphi \left[ \frac{2}{r} \mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \mathcal{U}_{2,1}^{\text{E},(2)}(r, t) + \frac{\beta}{c} \cos\theta \mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right], \quad (1.45c)$$

y las componentes del campo H en función del tiempo

## Componentes esféricas del término dipolar del campo H interno de la NP

$$H_{l=1,r}^{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{6}{\gamma\beta^2 r} \right) \beta \sin\theta \sin\varphi \mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t), \quad (1.46a)$$

$$H_{l=1,\theta}^{\text{int}}(\mathbf{r}; t) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{3}{\gamma\beta^2} \right) \sin\varphi \left\{ \frac{1}{c} \mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(2)}(r, t) + \beta \cos\theta \left[ \frac{2}{r} \mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \mathcal{U}_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right] \right\}, \quad (1.46b)$$

$$H_{l=1,\varphi}^{\text{int}}(\mathbf{r}; t) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \left( \frac{3}{\gamma\beta^2} \right) \left\{ \frac{1}{c} \cos\theta \cos\varphi \mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(2)}(r, t) + \frac{\sin\theta}{c\gamma} \mathcal{U}_{1,0}^{\text{E},(2)}(r, t) \right. \\ \left. + \beta \cos\varphi \left[ \frac{2}{r} \mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) - \frac{1}{c} \mathcal{U}_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right] \right\}. \quad (1.46c)$$

Al igual que el término dipolar del campo EM esparcido, las Ecs. (1.40) y (1.41) son expresiones semianálíticas, dado que se definen las funciones espectrales auxiliares  $\mathcal{U}_{n_1, n_2}^{\{\text{E}, \text{M}\}, (j)}(r; t)$  como

$$\mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(1)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} s_1^{\text{E}}(\omega) j_1 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_1 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47a)$$

$$\mathcal{U}_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i s_1^{\text{E}}(\omega) j_1 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_0 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47b)$$

$$\mathcal{U}_{2,1}^{\text{E},(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega N(\omega) s_1^{\text{E}}(\omega) j_2 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_1 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47c)$$

$$\mathcal{U}_{2,0}^{\text{E},(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i\omega N(\omega) s_1^{\text{E}}(\omega) j_2 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_0 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47d)$$

$$\mathcal{U}_{1,1}^{\text{E},(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i\omega N(\omega) s_1^{\text{E}}(\omega) j_1 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_1 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47e)$$

$$\mathcal{U}_{1,0}^{\text{E},(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega N(\omega) s_1^{\text{E}}(\omega) j_1 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_0 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47f)$$

$$\mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} i\omega N(\omega) s_1^{\text{M}}(\omega) j_1 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_1 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47g)$$

$$\mathcal{U}_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} s_1^{\text{M}}(\omega) j_1 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_1 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47h)$$

$$\mathcal{U}_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega N(\omega) s_1^{\text{M}}(\omega) j_2 \left[ N(\omega) \frac{\omega}{c} r \right] K_1 \left( \frac{\omega b}{c\gamma\beta} \right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (1.47i)$$

que son integrales a resolver numéricamente, donde los superíndices E y M refieren a utilizar el coeficiente  $s_1^{\text{E}}$  o  $s_1^{\text{M}}$ , respectivamente, y  $j = 2$  corresponde a multiplicar por un factor  $\omega N(\omega)$  ( $j_1 = 1$  no lo considera).

# Fuerza de retroceso en la aproximación dipolar

## 2.1. Momento electromagnético: Vector de Poynting y tensor de esfuerzos de Maxwell

Dado un campo electromagnético (EM), el *vector de Poynting*<sup>1</sup> asociado está definido como el producto cruz entre el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y el campo  $\mathbf{H}$  [29]

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}. \quad (2.1a)$$

En el problema de interacción de un electrón rápido con una nanopartícula (NP) esférica existen tres campos EM presentes: el externo (producido por el electrón), el esparcido por la NP y el inducido al interior de la NP, llamado campo EM interno. El campo EM externo tiene solución exacta tanto en el dominio temporal como en el espectral, mientras que los campos EM esparcido e interno sólo tiene solución exacta en el espacio de frecuencias (ver capítulo 1). El campo EM esparcido sí cuenta con expresiones analíticas en el dominio temporal pero consideran a la fuente como un dipolo puntual (eléctrico y magnético). [35].

Al contar con expresiones para los campos EM tanto en función del tiempo como en función de la frecuencia angular, es relevante mencionar que la Ec. (2.1a) está definida en el dominio temporal. Es decir, cuando tanto el campo eléctrico como el campo  $\mathbf{H}$  dependen del tiempo [29]:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r}; t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}; t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}; t), \quad (2.1b)$$

de modo que las componentes del vector de Poynting en términos de las componentes del campo EM en el dominio temporal están dadas por

$$S_i(\mathbf{r}; t) = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} E_j(\mathbf{r}; t) H_k(\mathbf{r}; t). \quad (2.2)$$

donde  $\epsilon_{ijk}$  es el símbolo de Levi-Civita [36], de modo que los subíndices  $i, j, k$  representan las coordenadas  $x, y, z$ .

---

<sup>1</sup>Formalmente debería llamarse *pseudocampo de Poynting*, pues se obtiene de calcular el producto cruz de dos campos vectoriales, resultando un campo vectorial que asigna un vector a cada punto del espaciotiempo.

Las componentes del campo EM en el dominio temporal se relacionan con sus expresiones en el dominio espectral mediante la transformada de Fourier

$$E_j(\mathbf{r}; t) = \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{E}(\mathbf{r}; \omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}_j(\mathbf{r}; \omega) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (2.3a)$$

$$H_j(\mathbf{r}; t) = \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{H}(\mathbf{r}; \omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{H}_j(\mathbf{r}; \omega) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (2.3b)$$

de manera que, sustituyendo las Ecs. (2.3) en la Ec. (2.2) y por medio del teorema de convolución [36], las componentes del vector de Poynting son

$$S_i(\mathbf{r}; t) = \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{E}_j(\mathbf{r}; \omega)\} \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{H}_k(\mathbf{r}; \omega)\} - \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{E}_k(\mathbf{r}; \omega)\} \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{H}_j(\mathbf{r}; \omega)\} \quad (2.4a)$$

$$\begin{aligned} &= \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{E}_j * \tilde{H}_k)(\mathbf{r}; \omega)\} - \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{E}_k * \tilde{H}_j)(\mathbf{r}; \omega)\} \\ &\neq \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{E}_j \tilde{H}_k)(\mathbf{r}; \omega)\} - \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{E}_k \tilde{H}_j)(\mathbf{r}; \omega)\} \\ &= \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{E}_j(\mathbf{r}; \omega) \tilde{H}_k(\mathbf{r}; \omega) - \tilde{E}_k(\mathbf{r}; \omega) \tilde{H}_j(\mathbf{r}; \omega)\} \\ &= \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{\mathbf{E}} \times \tilde{\mathbf{H}})_i(\mathbf{r}; \omega)\}, \end{aligned} \quad (2.4b)$$

donde las Ecs. (2.4a) enfatizan que del cálculo que se realiza en el dominio espectral resulta una convolución de las componentes del campo eléctrico y del campo H, lo cual se contrasta con las Ecs. (2.4b) que resultan de realizar el producto cruz entre el campo eléctrico y el campo H en el dominio espectral, lo cual no corresponde con la transformada de Fourier del vector de Poynting definido en la Ec. (2.1b), es decir

$$\tilde{\mathbf{S}}(\mathbf{r}; \omega) \neq \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega). \quad (2.5)$$

Por otra parte, el *tensor de esfuerzos de Maxwell*<sup>2</sup> se define en términos del campo EM asociado como [30]

$$\overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) = \epsilon_0 \left[ \mathbf{E}(\mathbf{r}; t) \otimes \mathbf{E}(\mathbf{r}; t) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} |\mathbf{E}(\mathbf{r}; t)|^2 \right] + \mu_0 \left[ \mathbf{H}(\mathbf{r}; t) \otimes \mathbf{H}(\mathbf{r}; t) - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{I}} |\mathbf{H}(\mathbf{r}; t)|^2 \right], \quad (2.6)$$

donde  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica del vacío,  $\otimes$  indican el producto tensorial entre dos vectores tridimensionales y  $\overleftrightarrow{\mathbf{I}}$  es la matriz identidad de  $3 \times 3$ . Al igual que el vector de Poynting, el tensor de esfuerzos de Maxwell está definido en el dominio temporal. Para calcular el tensor de esfuerzos de Maxwell en términos de un campo EM dado en el dominio espectral, se debe considerar que las componentes de la matriz de  $3 \times 3$  que lo conforman son de la forma

$$T_{ij}(\mathbf{r}; t) = \epsilon_0 \left[ E_i(\mathbf{r}; t) E_j(\mathbf{r}; t) - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathbf{E}(\mathbf{r}; t)|^2 \right] + \mu_0 \left[ H_i(\mathbf{r}; t) H_j(\mathbf{r}; t) - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathbf{H}(\mathbf{r}; t)|^2 \right], \quad (2.7)$$

donde  $i, j \in \{x, y, z\}$ . Sustituyendo las Ecs. (2.3) en la Ec. (2.7) y utilizando del teorema de la convolución [36], las componentes del tensor de esfuerzos de Maxwell en términos de las componentes del campo EM dadas en el dominio espectral son

$$\begin{aligned} T_{ij}(\mathbf{r}; t) &= \epsilon_0 \left[ \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{E}_i(\mathbf{r}; \omega)\} \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{E}_j(\mathbf{r}; \omega)\} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega)\}|^2 \right] \\ &\quad + \mu_0 \left[ \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{H}_i(\mathbf{r}; \omega)\} \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{H}_j(\mathbf{r}; \omega)\} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega)\}|^2 \right] \\ &= \epsilon_0 \left[ \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{E}_i * \tilde{E}_j)(\mathbf{r}; \omega)\} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega)\}|^2 \right] \\ &\quad + \mu_0 \left[ \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{(\tilde{H}_i * \tilde{H}_j)(\mathbf{r}; \omega)\} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega)\}|^2 \right] \end{aligned} \quad (2.8a)$$

<sup>2</sup>Formalmente debería llamarse *pseudocampo tensorial de esfuerzos de Maxwell*, pues resulta de calcular el producto exterior de dos campos vectoriales, asignando un tensor de rango 2 a cada punto del espaciotiempo.

donde las Ecs. (2.8a) corresponden a una convolución entre componentes del campo eléctrico (o  $\mathbf{H}$ ) en suma con la norma al cuadrado de la transformada de Fourier inversa temporal del campo eléctrico (o  $\mathbf{H}$ ).

El cálculo del tensor de esfuerzos de Maxwell en términos de las componentes del campo EM en el dominio espectral podría causar confusión al remplazar, de manera ingenua, las convoluciones indicadas en las Ecs. (2.8a) por productos entre componentes del campo EM. Por ello, es importante resaltar que el tensor de esfuerzos de Maxwell no se calcula al realizar la transformada de Fourier inversa temporal del producto exterior del campo eléctrico (o  $\mathbf{H}$ ) consigo mismo sumado a la transformada de Fourier inversa de la norma al cuadrado, es decir

$$\begin{aligned}
 T_{ij}(\mathbf{r}; t) &\neq \epsilon_0 \left[ \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1} \{ (\tilde{E}_i \tilde{E}_j)(\mathbf{r}; \omega) \} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1} \{ |\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \} \right] \\
 &\quad + \mu_0 \left[ \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1} \{ (\tilde{H}_i \tilde{H}_j)(\mathbf{r}; \omega) \} - \frac{1}{2} \delta_{ij} \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1} \{ |\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \} \right] \\
 &= \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1} \left\{ \epsilon_0 \left[ \tilde{E}_i(\mathbf{r}; \omega) \tilde{E}_j(\mathbf{r}; \omega) - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \right] + \mu_0 \left[ \tilde{H}_i(\mathbf{r}; \omega) \tilde{H}_j(\mathbf{r}; \omega) - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \right] \right\} \quad (2.8b) \\
 &= \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1} \left\{ \epsilon_0 \left[ (\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) \otimes \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega))_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \right] \right. \\
 &\quad \left. + \mu_0 \left[ (\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega) \otimes \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega))_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

mostrando así que el tensor de esfuerzos de Maxwell en el dominio espectral no resulta de realizar un cálculo análogo al de la Ec. (2.6) remplazando la dependencia temporal por la espectral:

$$\overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; \omega) \neq \epsilon_0 \left[ (\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) \otimes \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega))_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \right] + \mu_0 \left[ (\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega) \otimes \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega))_{ij} - \frac{1}{2} \delta_{ij} |\tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega)|^2 \right]. \quad (2.9)$$

Por medio de los teoremas de conservación de energía EM y de momento EM [30], el vector de Poynting y el tensor de esfuerzos de Maxwell adquieren interpretación física.  $\mathbf{S}$  representa un flujo de energía y es proporcional a una densidad de momento, respectivamente en cada teorema, mientras que  $\overleftrightarrow{\mathbf{T}}$  es una fuerza por unidad de área actuando sobre una superficie en el teorema de conservación de momento EM. La fuerza  $\mathbf{F}$  del teorema de conservación de momento EM está dada como

$$\mathbf{F}(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{p}_{\text{mec}}(t) = -\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{c^2} \mathbf{S}(\mathbf{r}; t) dV + \oint_{\partial \mathcal{V}} \overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) \cdot d\mathbf{a}, \quad (2.10)$$

donde  $\mathbf{p}_{\text{mec}}$  es el momento mecánico,  $c$  la rapidez de la luz,  $\mathbf{S}$  el vector de Poynting dado por la Ec. (2.1b) y  $\overleftrightarrow{\mathbf{T}}$  el tensor de esfuerzos de Maxwell dado por la Ec. (2.6). Definiendo la *densidad de momento electromagnético* como [30]

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}; t) = \frac{\mathbf{S}(\mathbf{r}; t)}{c^2} = \frac{1}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}; t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}; t), \quad (2.11)$$

el primer término del lado derecho de la Ec. (2.10) corresponde a la variación temporal del momento EM  $\mathbf{p}_{\text{em}}$  total almacenado en los campos EM presentes en el volumen  $\mathcal{V}$ , es decir

$$\mathbf{p}_{\text{em}} = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{g}(\mathbf{r}; t) dV. \quad (2.12)$$

El segundo término del lado derecho de la Ec. (2.10) representa el momento total (electromagnético y mecánico) por unidad de tiempo que atraviesa la superficie  $\partial \mathcal{V}$ , frontera que encierra el volumen  $\mathcal{V}$ .

El término referente al tensor de esfuerzos de Maxwell en el teorema de conservación del momento EM dado por la Ec. (2.10), se puede simplificar en el caso particular donde el campo eléctrico y el campo  $\mathbf{H}$  son ortogonales entre sí [24]. En este caso, se reescribe el campo EM en términos de las normas del campo eléctrico y del campo  $\mathbf{H}$ , así como de los vectores unitarios que indican sus respectivas direcciones:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}; t) = |\mathbf{E}(\mathbf{r}; t)| \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; t), \quad (2.13a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}; t) = |\mathbf{H}(\mathbf{r}; t)| \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; t), \quad (2.13b)$$

de tal modo que el vector unitario  $\hat{\mathbf{e}}_S$ , que indica la dirección del vector de Poynting calculado mediante las Ecs. (2.1b) y (2.13), junto con  $\hat{\mathbf{e}}_E$  y  $\hat{\mathbf{e}}_H$ , formen una base completa ortonormal del espacio:

$$\hat{\mathbf{e}}_E \perp \hat{\mathbf{e}}_H \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = |\mathbf{E}||\mathbf{H}|(\hat{\mathbf{e}}_E \times \hat{\mathbf{e}}_H) \equiv |\mathbf{S}|\hat{\mathbf{e}}_S, \quad (2.14)$$

donde se omite la dependencia  $(\mathbf{r}; t)$  en los campos EM, tanto en las normas como en los vectores unitarios, siendo  $|\mathbf{S}| = |\mathbf{E}||\mathbf{H}|$  la norma del vector de Poynting. Reescribiendo el tensor de esfuerzos en términos de la nueva base  $\{\hat{\mathbf{e}}_E, \hat{\mathbf{e}}_H, \hat{\mathbf{e}}_S\}$ , se tiene que

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{\mathbf{T}} &= \epsilon_0 \left( \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{T}} |\mathbf{E}|^2 \right) + \mu_0 \left( \mathbf{H} \otimes \mathbf{H} - \frac{1}{2} \overleftrightarrow{\mathbf{T}} |\mathbf{H}|^2 \right) \\ &= \epsilon_0 \begin{pmatrix} \frac{|\mathbf{E}|^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{|\mathbf{E}|^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{|\mathbf{E}|^2}{2} \end{pmatrix} + \mu_0 \begin{pmatrix} -\frac{|\mathbf{H}|^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|\mathbf{H}|^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{|\mathbf{H}|^2}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2}{2} - \frac{\mu_0 |\mathbf{H}|^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2}{2} + \frac{\mu_0 |\mathbf{H}|^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2}{2} - \frac{\mu_0 |\mathbf{H}|^2}{2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde

$$\hat{\mathbf{e}}_E \otimes \hat{\mathbf{e}}_E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{e}}_H \otimes \hat{\mathbf{e}}_H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{e}}_S \otimes \hat{\mathbf{e}}_S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Considerando que a grandes distancias un frente de onda es localmente plano, los campos EM resultan ortogonales entre sí, lo que da lugar al cociente entre las normas del campo eléctrico y el campo H conocido como impedancia del vacío  $Z_0$  [29]. Esta relación entre las normas de los campos se puede reescribir como la equivalencia entre las densidades energéticas asociadas al campo eléctrico y al campo H:

$$\frac{|\mathbf{E}|}{|\mathbf{H}|} = Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \quad \Rightarrow \quad \frac{\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2}{2} = \frac{\mu_0 |\mathbf{H}|^2}{2}. \quad (2.17)$$

Sustituyendo la igualdad del lado izquierdo de la Ec. (2.17) en la Ec. (2.14), el vector de Poynting está dado en términos de la norma del campo eléctrico por

$$\mathbf{S} = \epsilon_0 c |\mathbf{E}|^2 \hat{\mathbf{e}}_S = \mu_0 c |\mathbf{H}|^2 \hat{\mathbf{e}}_S. \quad (2.18)$$

Considerando la igualdad del lado derecho de la Ec. (2.17), el tensor de esfuerzos de Maxwell dado por la Ec. (2.15) se simplifica como

$$\overleftrightarrow{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2 \end{pmatrix} = -\epsilon_0 |\mathbf{E}|^2 \hat{\mathbf{e}}_S \otimes \hat{\mathbf{e}}_S. \quad (2.19)$$

Combinando la Ec. (2.18) y la Ec. (2.19), se concluye que el tensor de esfuerzos de Maxwell es proporcional al vector de Poynting. La equivalencia entre  $\overleftrightarrow{\mathbf{T}}$  y  $\mathbf{S}$  se da al proyectar el tensor de esfuerzos sobre la dirección opuesta del vector de Poynting (considerando un factor  $1/c$ ). Así

Simplificación del tensor de esfuerzos de Maxwell en términos del vector de Poynting

$$\overleftrightarrow{\mathbf{T}}(\mathbf{r}; t) = -\frac{|\mathbf{S}(\mathbf{r}; t)|}{c} \hat{\mathbf{e}}_S(\mathbf{r}; t) \otimes \hat{\mathbf{e}}_S(\mathbf{r}; t) = -\frac{1}{c} \mathbf{S}(\mathbf{r}; t) \otimes \hat{\mathbf{e}}_S, \quad \text{si } \hat{\mathbf{e}}_E \perp \hat{\mathbf{e}}_H. \quad (2.20)$$

## 2.2. Fuerza de retroceso en función del tiempo

En el problema de interacción entre un electrón rápido y una NP esférica, la fuerza total que experimenta la NP debida al campo EM que se le induce (interno y esparcido) se calcula sustituyendo las transformadas de Fourier inversas temporales de las expresiones de  $(\mathbf{E}^{\text{esp}}; \mathbf{H}^{\text{esp}})$  mostradas en las Ecs. (1.30) y (1.32). Una primera aproximación al comportamiento de la fuerza generada por el campo EM inducido es la aproximación dipolar<sup>3</sup>, donde el campo EM esparcido está dado por las Ecs. (1.40) y (1.41), y el campo EM interno por las Ecs. (1.45) y (1.46). Considerando una superficie esférica de radio  $\varrho > a$  concéntrica a la NP, la fuerza asociada en la aproximación dipolar es

$$\mathbf{F}_{l=1}(t) = -\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{c^2} \mathbf{S}_{l=1}^{\text{ind}}(\varrho, \Omega; t) dV + \oint_{\partial\mathcal{V}} \overleftarrow{\mathbf{T}}_{l=1}^{\text{esp}}(\varrho, \Omega; t) \cdot d\mathbf{a} \quad (2.21a)$$

$$= -\frac{d}{dt} \int_0^\varrho \int \frac{1}{c^2} \mathbf{S}_{l=1}^{\text{ind}}(r, \Omega; t) r^2 d\Omega dr + \oint \overleftarrow{\mathbf{T}}_{l=1}^{\text{esp}}(\varrho, \Omega; t) \cdot \hat{\mathbf{e}}_r \varrho^2 d\Omega \quad (2.21b)$$

$$= -\frac{d}{dt} \left[ \int_0^a \left( \frac{r^2}{c^2} \right) \int \mathbf{S}_{l=1}^{\text{int}}(r, \Omega; t) d\Omega dr + \int_a^\varrho \left( \frac{r^2}{c^2} \right) \int \mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp}}(r, \Omega; t) d\Omega dr \right] \quad (2.21c)$$

$$+ \varrho^2 \oint \overleftarrow{\mathbf{T}}_{l=1}^{\text{esp}}(\varrho, \Omega; t) \cdot \hat{\mathbf{e}}_r d\Omega,$$

donde  $d\Omega$  representa el diferencial de ángulo sólido  $\Omega \in [0, 4\pi]$ . Como el término  $l = 1$  de la expansión multipolar del campo EM esparcido en la aproximación de campo lejano ( $\varrho \gg a$ ) cumple con la ortogonalidad entre el campo eléctrico y el campo H, se puede simplificar el tercer término de la Ec. (2.21c) en términos del vector de Poynting asociado mediante la Ec. (2.20). Considerando el límite asintótico [28] dado por la Ec. (1.31a) para las funciones esféricas de Hankel presentes en las Ecs. (1.38) y (1.39), se obtienen las expresiones radiales

$$h_1^{(+)}(kr) \sim \frac{(-i)^1 \exp(kr)}{ikr} = -i \frac{\exp(ikr)}{kr}, \quad (2.22a)$$

$$h_2^{(+)}(kr) \sim \frac{(-i)^2 \exp(kr)}{ikr} = -\frac{\exp(ikr)}{kr}. \quad (2.22b)$$

Sustituyendo las Ecs. (2.22) en las Ecs. (1.38) y eliminando los términos que decaen más rápido que  $1/r$ , por definición de campo lejano, se tiene que las expresiones para el campo eléctrico lejano son

$$\tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega) = 0, \quad (2.23a)$$

$$\tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3k}{c\gamma\beta^2} \frac{\exp(ikr)}{kr} \left\{ t_1^{\text{M}} \beta \cos \varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) + t_1^{\text{E}} \left[ \cos \theta \cos \varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) - \frac{i}{\gamma} \sin \theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right] \right\}, \quad (2.23b)$$

$$\tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega) = -\left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3k}{c\gamma\beta^2} \sin \varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \frac{\exp(ikr)}{kr} (t_1^{\text{E}} + t_1^{\text{M}} \beta \cos \theta), \quad (2.23c)$$

mientras que, sustituyendo las Ecs. (2.22) en la Ec. (1.39) y eliminando los términos que decaen más rápido que  $1/r$ , por definición de campo lejano, las expresiones para el campo H lejano son

$$\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega) = 0, \quad (2.24a)$$

$$\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega) = -\epsilon_0 c \tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (2.24b)$$

$$\tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega) = \epsilon_0 c \tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; \omega). \quad (2.24c)$$

<sup>3</sup> *Aproximación dipolar* se refiere a considerar el término completo  $l = 1$  en la expansión multipolar del campo EM inducido en la NP, y *aproximación dipolar eléctrica* alude a modelar a la NP como un dipolo eléctrico puntual.

Calculando la transformada de Fourier inversa temporal de las Ecs. (2.23) y (2.24) y sustituyendo los resultados en la Ec. (2.1b), la expresión del vector de Poynting asociado al campo EM lejano es

$$\mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t) = \mathbf{E}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t) \times \mathbf{H}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t) = \epsilon_0 c |\mathbf{E}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t)|^2 \hat{\mathbf{e}}_r, \quad (2.25)$$

de manera que la dirección  $\hat{\mathbf{e}}_r$  de  $\mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}$  indica que es normal en todo punto sobre cualquier superficie esférica concéntrica a la NP, en particular a la superficie esférica de radio  $\varrho$  de integración. Así, el tensor de esfuerzos de Maxwell asociado al término dipolar del campo EM esparcido se puede escribir en términos del vector de Poynting asociado al campo EM lejano como

$$\overleftrightarrow{\mathbf{T}}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t) = -\frac{1}{c} \mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t) \otimes \hat{\mathbf{e}}_r \quad \text{o bien} \quad \overleftrightarrow{\mathbf{T}}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t) \cdot \hat{\mathbf{e}}_r = -\frac{1}{c} \mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\mathbf{r}; t). \quad (2.26)$$

Considerando una esfera de radio  $\varrho \gg a$ , es posible sustituir la simplificación de la Ec. (2.20) en la Ec. (2.21), obteniendo

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{l=1}(t) = & -\frac{d}{dt} \left[ \int_0^a \left( \frac{r^2}{c^2} \right) \oint \mathbf{S}_{l=1}^{\text{int}}(r, \Omega; t) d\Omega dr + \int_a^\varrho \left( \frac{r^2}{c^2} \right) \oint \mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp}}(r, \Omega; t) d\Omega dr \right] \\ & - \varrho^2 \oint \frac{1}{c} \mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\varrho \gg a; \Omega; t) d\Omega. \end{aligned} \quad (2.27)$$

De este modo, en la aproximación dipolar, la fuerza asociada al campo EM esparcido está dada en términos del vector de Poynting. Más aún, en la Ec. (2.27) está presente en los tres términos la integral de ángulo sólido del vector de Poynting (lejano, esparcido e interno), representando una cantidad relevante que proporciona información directa de la fuerza a calcular. El *vector de Poynting resultante* en la superficie esférica de radio  $\varrho$  se define como

Vector de Poynting resultante en la superficie esférica de radio  $\varrho$

$$\mathfrak{S}(\varrho; t) \equiv \oint \mathbf{S}(\varrho, \Omega; t) d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \mathbf{S}(\varrho, \theta, \varphi; t) \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (2.28)$$

Reescribiendo la fuerza dada por la Ec. (2.27) en términos de cada  $\mathfrak{S}$  correspondiente, se sigue que

$$\mathbf{F}_{l=1}(t) = -\frac{d}{dt} \left[ \int_0^a \left( \frac{r}{c} \right)^2 \mathfrak{S}_{l=1}^{\text{int}}(r; t) dr + \int_a^\varrho \left( \frac{r}{c} \right)^2 \mathfrak{S}_{l=1}^{\text{esp}}(r; t) dr \right] - \left( \frac{\varrho^2}{c} \right) \mathfrak{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(\varrho; t), \quad (2.29)$$

de manera que la fuerza debida al campo EM inducido en la NP se compone de tres términos: las variaciones en el tiempo de las contribuciones del vector de Poynting resultante al interior de la NP, primer término de la Ec. (2.29), las variaciones en el tiempo de las contribuciones del vector de Poynting resultante al exterior de la NP (hasta la superficie de radio  $\varrho$ ), segundo término de la Ec. (2.29), y el vector de Poynting resultante sobre la superficie de integración, tercer término de la Ec. (2.29).

Calculando las integrales de ángulo sólido del vector de Poynting asociado al campo EM esparcido, Ecs. (1.40) y (1.41), se obtienen las componentes del vector de Poynting resultante en términos de las funciones espectrales auxiliares  $\Omega_{l_1, m_1}^{\{\text{E}, \text{M}\}, (j)}(r; t)$ , Ecs. (1.42), como

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{l=1, x}^{\text{esp}}(r, t) \equiv & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi S_{l=1, x}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; t) \sin \theta d\theta d\varphi = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{3}{c\gamma^3\beta^3 r^2} \right) \left\{ -12\Omega_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t)\Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) \right. \\ & + 4\left(\frac{r}{c}\right) \left[ \Omega_{2,0}^{\text{E},(2)}(r, t)\Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r, t) + \Omega_{1,0}^{\text{E},(1)}(r, t)\Omega_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right] \\ & \left. + \left(\frac{r}{c}\right)^2 \left[ \Omega_{1,0}^{\text{E},(2)}(r, t)\Omega_{1,1}^{\text{M},(2)}(r, t) - \Omega_{2,0}^{\text{E},(2)}(r, t)\Omega_{2,1}^{\text{M},(2)}(r, t) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.30a)$$

$$\mathfrak{S}_{l=1, y}^{\text{esp}}(r, t) \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^\pi S_{l=1, y}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; t) \sin \theta d\theta d\varphi = 0, \quad (2.30b)$$

## 2.2 Fuerza de retroceso en función del tiempo

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}_{l=1,z}^{\text{esp}}(r,t) \equiv & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi S_{l=1,z}^{\text{esp}}(r,\theta,\varphi;t) \sin\theta d\theta d\varphi = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \left(\frac{3}{c\gamma^2\beta^3 r^2}\right) \left\{ +12\Omega_{1,1}^{\text{E},(1)}(r,t)\Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r,t) \right. \\ & -4\left(\frac{r}{c}\right) \left[ \Omega_{2,1}^{\text{E},(2)}(r,t)\Omega_{1,1}^{\text{M},(1)}(r,t) + \Omega_{1,1}^{\text{E},(1)}(r,t)\Omega_{2,1}^{\text{M},(2)}(r,t) \right] \\ & \left. + \left(\frac{r}{c}\right)^2 \left[ \Omega_{1,1}^{\text{E},(2)}(r,t)\Omega_{1,1}^{\text{M},(2)}(r,t) + \Omega_{2,1}^{\text{E},(2)}(r,t)\Omega_{2,1}^{\text{M},(2)}(r,t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.30c)$$

De las Ecs. (2.30) se observan dos resultados importantes: el primero es la eliminación de la componente  $y$  del vector de Poynting resultante, lo cual es de esperar al analizar la simetría de las expresiones del vector de Poynting respecto al plano  $y = 0$  que corta a la NP transversalmente y contiene la trayectoria del electrón (ver apéndice B); el segundo resultado importante es la simetría entre las componentes no nulas del vector de Poynting resultante (tanto interno como esparcido), presentando sólo un cambio de signo en tres términos, que se marcan en color verde, así como el remplazo del orden  $m_1 = 0$  en las funciones espectrales auxiliares presentes en la componente  $x$ , por  $m_1 = 1$  en las presentes para la componente  $z$ .

Si los campos EM de la Ec. (2.11) decaen como  $1/r$  y se considera un volumen esférico de integración  $\mathcal{V}$  en la Ec. (2.12), entonces el vector de Poynting decae como  $1/r^2$ , y por tanto  $\mathbf{p}_{\text{em}} \neq \mathbf{0}$  en el límite  $r \rightarrow \infty$ . A la región del espacio donde los campos EM decaen espacialmente como  $1/r$  se le conoce como *zona de radiación* [29], definiendo así el *momento EM radiado*  $\mathbf{p}_{\text{em}}^{\text{rad}}$  como el momento dado por la Ec. (2.12) en la zona de radiación. Considerando la interacción de un electrón rápido con una NP esférica, si se calcula el momento EM radiado asociado al campo EM esparcido y resulta que  $\mathbf{p}_{\text{em}}^{\text{rad}} \neq \mathbf{0}$ , entonces se tendría que el campo inducido por la NP pierde momento que atraviesa la superficie  $\partial\mathcal{V}$ . Por conservación de momento, la NP reacciona a este proceso de manera mecánica con un momento  $\mathbf{p}_{\text{mec}} = -\mathbf{p}_{\text{em}}^{\text{rad}}$ , experimentando una fuerza llamada *fuerza de retroceso* [24]:

$$\mathbf{F}^{\text{ret}}(t) = \oint_{\partial\mathcal{V}} \overleftrightarrow{\mathbf{T}}^{\text{lej}}(\mathbf{r};t) \cdot d\mathbf{a} = -\left(\frac{q^2}{c}\right) \mathfrak{S}^{\text{lej}}(t_\varrho), \quad (2.31)$$

donde  $\overleftrightarrow{\mathbf{T}}^{\text{lej}}(\mathbf{r};t)$  es tensor de esfuerzos de Maxwell calculado con las expresiones del campo EM lejano asociado y  $\mathfrak{S}^{\text{lej}}(t_\varrho)$  es el vector de Poynting resultante asociado al campo EM lejano evaluado en el tiempo de retardo  $t_\varrho = t - \varrho/c$ . Al realizar la aproximación de campo lejano al campo EM esparcido, los nueve tipos de funciones espectrales auxiliares presentes en las Ecs. (2.30) se simplifican a sólo tres:

$$\Omega_1^{\text{M}}(r,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t_1^{\text{M}}(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (2.32a)$$

$$\Omega_1^{\text{E}}(r,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t_1^{\text{E}}(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (2.32b)$$

$$\Omega_0^{\text{E}}(r,t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} it_1^{\text{E}}(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{c}r\right) K_0\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (2.32c)$$

obteniendo que la fuerza de retroceso que experimenta la NP debida al campo EM que esparce es

Fuerza de retroceso en la aproximación dipolar

$$\mathbf{F}_{l=1}^{\text{ret}}(t) = -\left(\frac{q^2}{c}\right) \mathfrak{S}_{l=1}^{\text{esp,lej}}(t_\varrho) = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \left(\frac{6}{c^2\gamma^2\beta^3}\right) \Omega_1^{\text{M}}(\varrho,t) \left[ \frac{1}{\gamma} \Omega_0^{\text{E}}(\varrho,t) \hat{\mathbf{e}}_x - \Omega_1^{\text{E}}(\varrho,t) \hat{\mathbf{e}}_z \right], \quad (2.33)$$

donde  $e$  es la carga del electrón,  $\epsilon_0$  la permitividad del vacío,  $c$  la rapidez de la luz,  $\gamma$  el factor de Lorentz y  $\beta$  la rapidez relativa del electrón respecto a la de la luz. Explícitamente, las componentes de la fuerza de retroceso longitudinal y transversal, referentes a la dirección del movimiento del electrón, están dadas como

$$F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}(t) = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \left(\frac{6}{c^2\gamma^3\beta^3}\right) \Omega_1^{\text{M}}(\varrho,t) \Omega_0^{\text{E}}(\varrho,t), \quad (2.34)$$

$$F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}}(t) = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \left(\frac{6}{c^2\gamma^2\beta^3}\right) \Omega_1^{\text{M}}(\varrho,t) \Omega_1^{\text{E}}(\varrho,t). \quad (2.35)$$

De la definición de las funciones espectrales auxiliares simplificadas, Ecs. (2.32), presentes en la Ec. (2.33), se observa que la fuerza de retroceso se debe a la interacción entre el dipolo eléctrico y el dipolo magnético. De modo que si se ignora la presencia de alguno de los dos, es decir,  $t_1^E = 0$  o  $t_1^M = 0$ , la fuerza de retroceso que experimenta la NP es cero. Tal es el caso de la aproximación de partícula pequeña, donde  $t_1^E \sim x^3$  y  $t_1^M \sim 0$ , resultando la función  $\Omega_1^M \sim 0$ , lo que implica que la fuerza de retroceso es cero, reproduciendo el resultado obtenido previamente en la referencia [23].

# Resultados para la fuerza de retroceso en la aproximación dipolar

---

Para calcular la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula (NP) al interactuar con un electrón rápido debida al campo electromagnético (EM) que esparce la NP, se requiere que las expresiones del campo eléctrico  $\mathbf{E}^{\text{esp}}$  y del campo  $\mathbf{H}^{\text{esp}}$  sean funciones del tiempo, por definición del vector de Poynting [29], Ecs. (2.1). Las expresiones analíticas correspondientes a la contribución dipolar del campo EM esparcido, Ecs. (1.38) y (1.39), están dadas en función de la frecuencia angular, por lo que es necesario realizar una transformada de Fourier inversa (IFT por sus siglas en inglés *Inverse Fourier Transform*). Al calcular la IFT del campo EM esparcido se obtienen integrales que no tienen solución analítica pero que se pueden calcular numéricamente por medio de la transformada discreta de Fourier (DFT por sus siglas en inglés *Discrete Fourier Transform*), haciendo uso del algoritmo llamado *transformada rápida de Fourier* o FFT por sus siglas en inglés *Fast Fourier Transform* (ver apéndice C). Para verificar la fiabilidad de los datos que se obtienen del cálculo de la transformada discreta de Fourier inversa (IDFT por sus siglas en inglés *Inverse Discrete Fourier Transform*) del campo EM esparcido en la aproximación dipolar, se hacen dos comparaciones: los datos obtenidos del cálculo de la DFT del campo EM esparcido en la aproximación de partícula pequeña con la solución analítica en el dominio espectral, y los datos obtenidos del cálculo de la IDFT del campo EM esparcido en la aproximación dipolar eléctrica con la solución analítica en el dominio temporal.

## 3.1. Campo electromagnético esparcido: Aproximación dipolar eléctrica y de partícula pequeña

Una aproximación de interés en el cálculo del campo EM esparcido en el dominio espectral es considerar una *partícula pequeña* ( $x = ka \ll 1$ ), donde  $x$  es el parámetro de tamaño que se define en términos del número de onda  $k$  y el radio de la NP  $a$ . En este caso, la principal contribución al campo EM esparcido está dada por el término dipolar correspondiente al término dado por  $l = 1$  de la expansión multipolar, Ecs. (1.32). Realizando una expansión en serie de Taylor para los coeficientes  $t_1^E$  y  $t_1^M$  dados por las Ecs. (1.37) [28], se obtiene

$$t_1^E = \frac{2x^3}{3} \left( \frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) + \frac{2x^5}{5} \frac{(N^2 - 1)(N^2 - 2)}{(N^2 + 2)^2} + O(x^6), \quad (3.1a)$$

$$t_1^M = \frac{x^5}{45} (N^2 - 1) + O(x^7), \quad (3.1b)$$

donde  $N$  es el índice de refracción relativo de la partícula respecto al de la matriz en la que está inmersa (al tratarse del vacío,  $N$  coincide con el índice de refracción del material del que está hecha la NP). Considerando hasta el orden cúbico en el parámetro de tamaño en las Ecs. (3.1) y sustituyendo las aproximaciones obtenidas para  $t_1^E$  y  $t_1^M$  en las Ecs. (1.38), las componentes esféricas del campo eléctrico esparcido se aproximan como

$$\tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{4kx^3}{c\gamma\beta^2} \left( \frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} \left[ \sin\theta \cos\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) + \frac{i}{\gamma} \cos\theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right], \quad (3.2a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; \omega) &= \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{2kx^3}{c\gamma\beta^2} \left( \frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \left[ \cos\theta \cos\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{\gamma} \sin\theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.2b)$$

$$\tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; \omega) = - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{2kx^3}{c\gamma\beta^2} \left( \frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \sin\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right), \quad (3.2c)$$

mientras que las componentes esféricas del campo H esparcido dadas por las Ecs. (1.39) se aproximan a

$$\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; \omega) = 0, \quad (3.2d)$$

$$\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{2kx^3}{\gamma\beta^2} \left( \frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) i h_1^{(+)}(kr) \sin\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right), \quad (3.2e)$$

$$\tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{2kx^3}{\gamma\beta^2} \left( \frac{N^2 - 1}{N^2 + 2} \right) h_1^{(+)}(kr) \left[ i \cos\theta \cos\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) + \frac{1}{\gamma} \sin\theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right]. \quad (3.2f)$$

Por otra parte, se conocen expresiones del campo EM en el dominio temporal para la *aproximación dipolar eléctrica*, en la que se considera el campo EM que se induce en la NP (debido al campo EM externo producido por el electrón) como el que produce un dipolo eléctrico puntual en el origen. Las expresiones de los campos EM inducidos en base esférica están dados por [35]:

$$\mathbf{E}_p^{\text{esp}}(\mathbf{r}; t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^3} \left\{ [3\hat{\mathbf{e}}_r \hat{\mathbf{e}}_r - \overleftrightarrow{\mathbf{I}}] \left[ \mathbf{p}(t_r) + \frac{r}{c} \dot{\mathbf{p}}(t_r) \right] + \left( \frac{r}{c} \right)^2 [\ddot{\mathbf{p}}(t_r) \times \hat{\mathbf{e}}_r] \times \hat{\mathbf{e}}_r \right\}, \quad (3.3a)$$

$$\mathbf{H}_p^{\text{esp}}(\mathbf{r}; t) = - \frac{1}{4\pi r^2} \hat{\mathbf{r}} \times \left[ \dot{\mathbf{p}}(t_r) + \frac{r}{c} \ddot{\mathbf{p}}(t_r) \right], \quad (3.3b)$$

donde  $t_r = t - r/c$  es el tiempo retardado. Para calcular el momento dipolar eléctrico  $\mathbf{p}(t)$ , la primera derivada temporal  $\dot{\mathbf{p}}(t)$  y la segunda derivada temporal  $\ddot{\mathbf{p}}(t)$ , que aparecen en las Ecs. (3.3), se parte de la relación [23]

$$\mathbf{p}(t) = \epsilon_0 \int_0^\infty \alpha_s(\tau) \mathbf{E}_0^{\text{ext}}(t - \tau) d\tau, \quad (3.4)$$

donde  $\mathbf{E}_0^{\text{ext}}(\tau)$  es el campo eléctrico externo que se evalúa en el origen y  $\alpha(\tau)$  es la transformada de Fourier inversa de la polarizabilidad eléctrica  $\tilde{\alpha}(\omega)$ . Considerando el modelo de Drude para la función dieléctrica de la NP (ver apéndice D), la polarizabilidad está dada por [23]

$$\alpha_s(\tau) = 4\pi a^3 \Theta(\tau) \frac{\omega_s^2}{\Omega_s} \exp\left(-\frac{\tau\Gamma}{2}\right) \sin(\Omega_s \tau), \quad (3.5)$$

donde  $\omega_s = \omega_p/\sqrt{3}$  corresponde a la frecuencia del modo de resonancia del plasmón de superficie de superficie de la esfera en términos de la frecuencia de plasma  $\omega_p$ .  $\Omega_s = \omega_s \sqrt{1 - (\Gamma/2\omega_s)^2}$  con  $\Gamma$  el parámetro de amortiguamiento

[37]. Como  $\mathbf{E}_0^{\text{ext}}(t)$  es el campo EM externo, campo EM producido por un electrón que se mueve con rapidez  $\beta c$  y se evalúa en el centro de la NP, se sustituye  $\mathbf{r}_0 = (0, 0, 0)$  en la Ec. (1.7a) resultando

$$\mathbf{E}_0^{\text{ext}}(t) = \mathbf{E}^{\text{ext}}(\mathbf{r}_0, t) = \frac{e\gamma}{4\pi\epsilon_0} \frac{b\hat{\mathbf{e}}_x + \beta ct\hat{\mathbf{e}}_z}{[b^2 + (\gamma\beta ct)^2]^{3/2}}. \quad (3.6)$$

Sustituyendo las Ecs. (3.5) y (3.6) en la Ec. (3.4), se obtiene una integral que se puede calcular numéricamente, donde resulta conveniente definir la función

$$\text{esc}(\xi, t) = \frac{\exp\left(-\frac{b\Gamma}{2c}\xi\right) \sin\left(\Omega_s \frac{b}{c}\xi\right)}{\left[1 + \gamma^2\beta^2\left(\frac{ct}{b} - \xi\right)^2\right]^{3/2}}. \quad (3.7)$$

Realizando el cambio de variable  $\xi = (c/b)\tau$  en la Ec. (3.7) y definiendo  $p_0 = ea(a/b)^2$ , las componentes del momento dipolar dado por la Ec. (3.4) en términos de la función  $\text{esc}(\xi, t)$  están dadas por

$$p_x(t) = p_0 \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega_s}\right) \frac{b}{c} \gamma \int_0^\infty \text{esc}(\xi, t) d\xi, \quad (3.8a)$$

$$p_z(t) = p_0 \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega_s}\right) \frac{b}{c} \gamma \beta \int_0^\infty \left(\frac{c}{b}t - \xi\right) \text{esc}(\xi, t) d\xi. \quad (3.8b)$$

Por último, para el cálculo del campo EM esparcido por la NP bajo la aproximación dipolar eléctrica dado por las Ecs. (3.3) se requieren las primeras dos derivadas temporales del momento dipolar eléctrico. Derivando las Ecs. (3.8) en términos de la función  $\text{esc}(\xi, t)$ , se obtienen

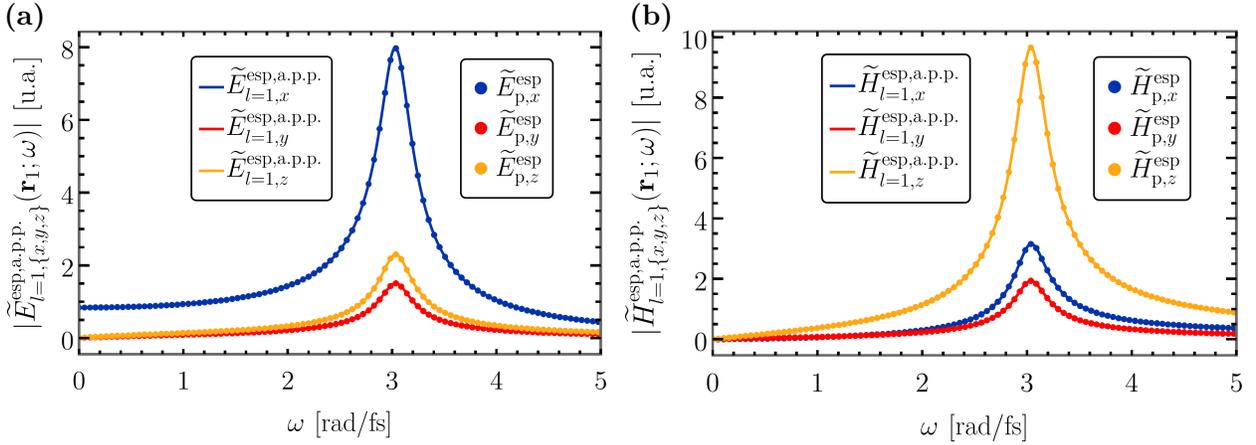
$$\dot{p}_x(t) = -3p_0 \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega_s}\right) \gamma^3 \beta^2 \int_0^\infty \frac{\left(\frac{c}{b}t - \xi\right) \text{esc}(\xi, t)}{1 + \gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)^2} d\xi, \quad (3.9)$$

$$\dot{p}_z(t) = p_0 \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega_s}\right) \gamma \beta \int_0^\infty \left[ \frac{1 - 2\gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)}{1 + \gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)^2} \right] \text{esc}(\xi, t) d\xi, \quad (3.10)$$

$$\ddot{p}_x(t) = -3p_0 \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega_s}\right) \frac{c}{b} \gamma^3 \beta^2 \int_0^\infty \left\{ \frac{1 - 4\gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)^2}{\left[1 + \gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)^2\right]^2} \right\} \text{esc}(\xi, t) d\xi, \quad (3.11)$$

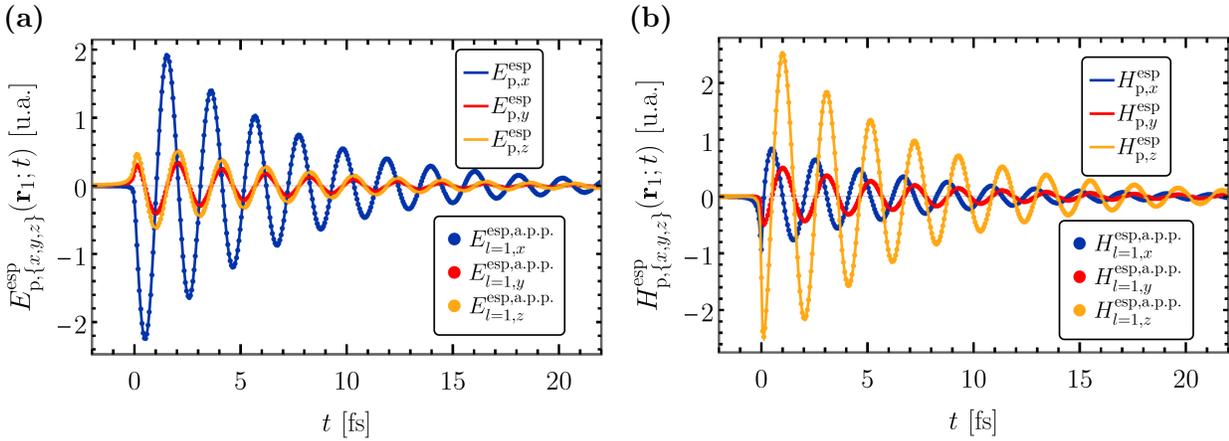
$$\ddot{p}_z(t) = -3p_0 \left(\frac{\omega_s^2}{\Omega_s}\right) \frac{c}{b} \gamma^3 \beta^3 \int_0^\infty \left(\frac{c}{b}t - \xi\right) \left\{ \frac{3 - 2\gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)^2}{\left[1 + \gamma^2\beta^2\left(\frac{c}{b}t - \xi\right)^2\right]^2} \right\} \text{esc}(\xi, t) d\xi. \quad (3.12)$$

La Fig. 3.1 muestra la comparación de los datos que se obtienen al calcular la DFT de las componentes cartesianas del campo EM esparcido por una NP esférica mediante las Ecs. (3.3), que representan la aproximación dipolar eléctrica, con las expresiones analíticas del campo EM esparcido en la aproximación de partícula pequeña, Ecs. (3.2). En ambos casos se considera que la NP está hecha de aluminio imitado por el modelo de Drude con parámetros  $\hbar\omega_p = 13.144$  eV y  $\hbar\Gamma = 0.197$  eV [37, 38]. El buen acuerdo que se obtiene entre los datos obtenidos por medio de la DFT del campo EM esparcido en la aproximación de dipolar eléctrica y su expresión analítica, permite ganar confianza en el algoritmo FFT.



**Fig. 3.1:** Comparación del módulo de las componentes cartesianas del (a) campo eléctrico y (b) campo H esparcidos por una NP hecha de aluminio [37, 38], de radio  $a = 1$  nm, al interactuar con un electrón con velocidad  $\beta = 0.5c$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm, en el dominio espectral. Las curvas continuas corresponden a las soluciones analíticas dadas por la aproximación de partícula pequeña mientras que los puntos son datos que se obtienen por medio del cálculo de la DFT de la aproximación dipolar eléctrica. Ambos campos se evalúan en el punto  $\mathbf{r}_1 = (0, -5, 1)$  nm, elegido arbitrariamente. Para el cálculo numérico se considera como límite superior del intervalo de integración en el tiempo  $t_N = 60$  fs, dividiéndolo homogéneamente en  $N = 2^{12}$  datos.

En la Fig. 3.2 se muestra la comparación de los datos que se obtienen al calcular la IDFT de las componentes cartesianas del campo EM esparcido por una NP en la aproximación de partícula pequeña, Ecs. (3.2), con las expresiones analíticas del campo EM esparcido en la aproximación dipolar eléctrica, Ecs. (3.3). Al igual que en el caso anterior, se considera que la NP está hecha de aluminio caracterizando la función dieléctrica con el modelo de Drude [37, 38].



**Fig. 3.2:** Comparación de las componentes cartesianas del (a) campo eléctrico y (b) campo H esparcidos por una NP hecha de aluminio [37, 38], de radio  $a = 1$  nm, al interactuar con un electrón con velocidad  $\beta = 0.5c$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm, en el dominio temporal. Las curvas continuas corresponden a las soluciones analíticas dadas por la aproximación dipolar eléctrica mientras que los puntos son datos que se obtienen por medio del cálculo de la IDFT de la aproximación de partícula pequeña. Ambos campos se evalúan en el punto  $\mathbf{r}_1 = (0, -5, 1)$  nm, elegido arbitrariamente. Para el cálculo numérico se utilizó como límite superior del intervalo de integración en el tiempo  $t_N = 30$  fs, dividiéndolo homogéneamente en  $N = 2^{12}$  datos.

En ambas figuras, Figs. 3.1 y 3.2, se observa que los datos numéricos obtenidos mediante el método de la transformada discreta de Fourier reproducen satisfactoriamente las soluciones analíticas correspondientes en el dominio opuesto. Aunque el acuerdo no es perfecto, existiendo diferencias entre el valor calculado analíticamente y por medio de la transformada discreta de Fourier, las diferencias se encuentran en la cuarta cifra decimal (ver apéndice C). Por tanto, se concluye que es posible utilizar el algoritmo FFT para calcular la IDFT de los campos EM esparcidos por la NP, que se obtienen en el dominio espectral, sin necesidad de realizar aproximaciones adicionales.

### 3.2. Fuerza de retroceso

A partir de las Ecs. (1.40) y (1.41), que describen el término dipolar del campo EM esparcido por la NP en el dominio temporal, se puede calcular el vector de Poynting resultante utilizando la Ec. (2.28), lo que permite obtener una expresión analítica para la fuerza de retroceso experimentada por la NP, la cual se puede expresar en términos de tres transformadas de Fourier inversas, de acuerdo a la Ec. (2.33):

$$\mathbf{F}_{i=1}^{\text{ret}}(t) = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{6}{c^2\gamma^2\beta^3} \right) \Omega_1^{\text{M}}(\varrho, t) \left[ \frac{1}{\gamma} \Omega_0^{\text{E}}(\varrho, t) \hat{\mathbf{e}}_x - \Omega_1^{\text{E}}(\varrho, t) \hat{\mathbf{e}}_z \right],$$

donde las funciones espectrales auxiliares simplificadas  $\Omega_{\{0,1\}}^{\{\text{E},\text{M}\}}(r, t)$  están dadas por las Ecs. (2.32):

$$\begin{aligned} \Omega_1^{\text{M}}(r, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t_1^{\text{M}}(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \\ \Omega_1^{\text{E}}(r, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t_1^{\text{E}}(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{c}r\right) K_1\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \exp(-i\omega t) d\omega, \\ \Omega_0^{\text{E}}(r, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} it_1^{\text{E}}(\omega) \exp\left(i\frac{\omega}{c}r\right) K_0\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right) \exp(-i\omega t) d\omega. \end{aligned}$$

Observando que las Ecs. (2.32) son de la forma [36]

$$f(t - t_0) = \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{f(\omega) \exp(i\omega t_0)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) \exp[-i\omega(t - t_0)] d\omega, \quad (3.13)$$

donde, en el caso de las funciones espectrales auxiliares simplificadas,

$$\tilde{f}(\omega) = t_1^{\{\text{E},\text{M}\}}(\omega) K_{\{0,1\}}\left(\frac{\omega b}{\beta\gamma c}\right), \quad (3.14a)$$

$$t_0 = \frac{r}{c}, \quad (3.14b)$$

se obtienen dos resultados: las funciones espectrales auxiliares simplificadas corresponden a la transformada de Fourier inversa del producto dado por la Ec. (3.14a) y a su vez están trasladadas un factor  $r/c$ , es decir

$$\Omega_{\{0,1\}}^{\{\text{E},\text{M}\}}(r, t) = \Omega_{\{0,1\}}^{\{\text{E},\text{M}\}}\left(t - \frac{r}{c}\right). \quad (3.15)$$

Así, las funciones espectrales auxiliares simplificadas representan ondas viajeras no dispersivas. Esto implica que, a medida que la onda se desplaza en la dirección en la que la variable  $r$  aumenta, la distribución de amplitud y la fase de la función de onda asociada no cambian. Dado que la suma y el producto de dos funciones de onda no dispersivas es una función de onda no dispersiva [30], se puede concluir que la fuerza de retroceso dada por la Ec. (2.33) es una onda no dispersiva que viaja en la dirección  $\hat{\mathbf{e}}_r$  con rapidez  $c$ . En consecuencia, la interpretación física de las funciones exponenciales  $\exp(i\omega\varrho/c)$  implícitas en la Ec. (2.33) corresponde a tomar en cuenta el tiempo  $\varrho/c$  que tarda en llegar la información de la fuerza de retroceso como paquete de onda o pulso [30] a la superficie esférica de integración de radio  $\varrho$  que se considera al calcular del vector de Poynting resultante mediante la Ec. (2.28).

Para analizar el comportamiento de la fuerza de retroceso, es relevante considerar el caso límite que se ha reportado previamente [23], en el que se encontró que, al considerar una partícula pequeña, la distribución del vector de Poynting asociado al campo EM esparcido presenta una simetría esférica. Al calcular la integral de superficie del vector de Poynting asociado al campo EM esparcido en la aproximación de partícula pequeña sobre cualquier superficie concéntrica a la NP, la fuerza de retroceso es nula. Esto sugiere que si el tamaño de la NP es comparable con la longitud de onda, el vector de Poynting pierde la simetría esférica, lo que resulta en la manifestación de una fuerza de retroceso. Por tanto, es de particular interés examinar el comportamiento de la fuerza de retroceso que experimenta una NP pequeña cuando su radio es del mismo orden de magnitud

que el parámetro de impacto ( $b \sim a \sim 1$  nm), donde se espera que la fuerza de retroceso sea igual a cero. En contraste, cuando  $b \sim a \gg 1$  nm se espera que la fuerza de retroceso sea distinta de cero debido al tamaño de la NP. Finalmente, cuando  $b \gg a \gg 1$  nm, se espera que el comportamiento de la fuerza de retroceso sea similar al que se obtiene en el primer caso, dado que la partícula resulta muy pequeña por la comparación de su radio con el parámetro de impacto.

Para analizar los tres casos de interés, los valores particulares que se emplean en el presente trabajo son: (i)  $a = 1$  nm y  $b = 3$  nm, (ii)  $a = 10$  nm y  $b = 12$  nm y finalmente (iii)  $a = 10$  nm y  $b = 30$  nm. En lo siguiente se denotará a la configuración obtenida por el par de parámetros  $a$  y  $b$  como *arreglo*  $\{a, b\}$ .

Con el objetivo de estudiar la fuerza de retroceso en distintos materiales, se muestran los resultados del cálculo correspondiente para cada arreglo  $\{a, b\}$ , considerando NP hechas de cuatro materiales distintos. Las funciones dieléctricas respectivas a cada material se modelan mediante ajustes numéricos que se basan en datos experimentales previamente reportados. Como ejemplo de materiales con respuesta metálica se consideran aluminio, oro y bismuto, mientras que el carburo de silicio se emplea como ejemplo de un material dieléctrico (las funciones dieléctricas se encuentran en el apéndice D).

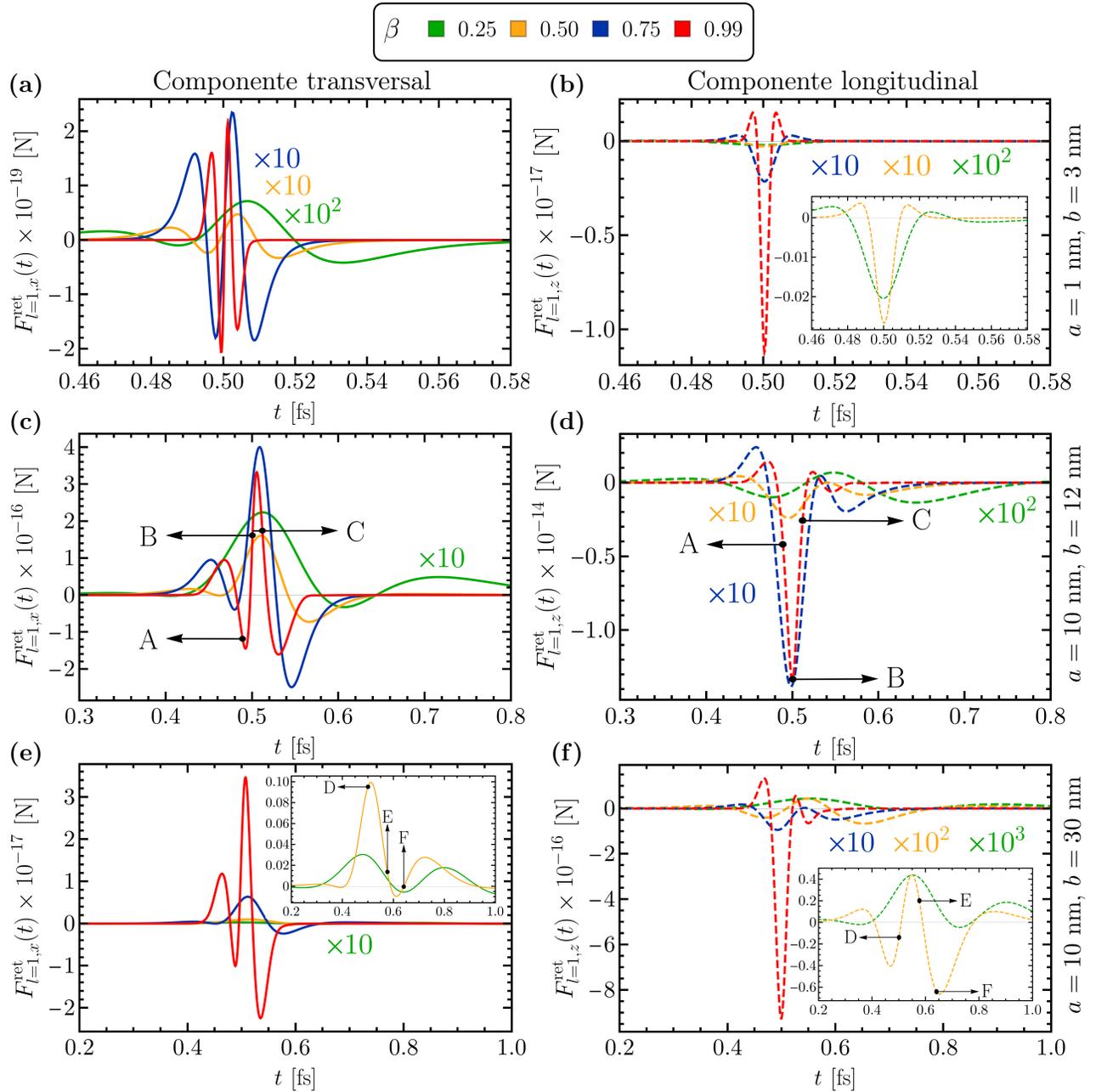
### 3.2.1. Nanopartícula de aluminio

En la Fig. 3.3 se presenta el comportamiento de las componentes transversal (curvas continuas) y longitudinal (curvas punteadas) de la fuerza de retroceso en función del tiempo que experimenta una NP de aluminio modelando su función dieléctrica con el modelo de Drude [37, 38] ( $\hbar\omega_p = 13.144$  eV,  $\hbar\Gamma = 0.197$  eV) para tres arreglos  $\{a, b\}$  y cuatro valores de la velocidad relativa  $\beta$  del electrón. En general, se aprecia que todas las curvas representan pulsos que tienden a centrarse en  $t = \rho/c$  conforme  $\beta \rightarrow 1$ , en donde se ha elegido el valor  $\rho = 150$  nm para la esfera de integración del vector de Poynting. La componente transversal de la fuerza de retroceso presenta valores tanto positivos como negativos de magnitud similar, lo que físicamente se interpreta como una fuerza oscilante en la dirección  $\hat{e}_x$ , siendo en igual medida atractiva para algunos tiempos (referente al punto donde la trayectoria del electrón interseca al eje  $x$ ) como repulsiva para otros tiempos. Por el contrario, aunque la componente longitudinal de la fuerza de retroceso adquiere valores positivos, su amplitud es principalmente negativa. Físicamente representa una fuerza oscilante en la dirección  $\hat{e}_z$ , paralela a la trayectoria del electrón, pero predominantemente en dirección opuesta a la que se mueve la carga.

Una primera impresión que podría causar la Fig. 3.3 debido a los órdenes de magnitud de las componentes de la fuerza de retroceso es que la magnitud de la componente longitudinal es siempre mayor que la magnitud de la componente transversal, pero esto no siempre es así. Por tanto, es importante analizar cada arreglo e identificar para qué valores de  $\beta$  la componente transversal es mayor que la longitudinal.

Para el arreglo  $\{1, 3\}$ , la Fig. 3.3(a) muestra que la amplitud de componente transversal de la fuerza de retroceso crece de manera significativa, aumentando progresivamente el orden de magnitud, cuando la rapidez relativa  $\beta$  crece, siendo el máximo orden de magnitud de  $10^{-19}$  N cuando  $\beta = 0.99$ . La Fig. 3.3(b) muestra que la amplitud de la componente longitudinal de la fuerza de retroceso tiene un comportamiento similar al de la componente transversal a medida que  $\beta \rightarrow 1$ . Sin embargo, el orden de magnitud máximo que adquiere la componente longitudinal de la fuerza de retroceso es  $10^{-17}$  N cuando  $\beta = 0.99$ . En general, se observa que la componente longitudinal de la fuerza de retroceso es al menos un orden de magnitud mayor que la componente transversal para los cuatro valores de  $\beta$  mostrados. Sólo cuando  $\beta = 0.25$ , la amplitud de la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor que la amplitud la componente longitudinal en el intervalo (0.52, 0.56) fs.

Para el arreglo  $\{10, 12\}$ , se observa en la Fig. 3.3(c) que la componente transversal de la fuerza de retroceso presenta el mismo orden de magnitud,  $10^{-16}$  N para valores de  $\beta$  entre 0.5 y 0.99, siendo la amplitud máxima cuando  $\beta = 0.75$ . Por otra parte, la Fig. 3.3(d) muestra que la amplitud de la componente longitudinal de la fuerza de retroceso aumenta el orden de magnitud de manera progresiva cuando  $\beta \rightarrow 1$ , siendo la amplitud máxima cuando  $\beta = 0.99$  con orden de magnitud  $10^{-14}$  N. A diferencia el arreglo  $\{1, 3\}$ , en el arreglo  $\{10, 12\}$  la amplitud de la componente longitudinal de la fuerza de retroceso es al menos un orden de magnitud mayor que la componente transversal para los valores  $\beta = 0.75$  y  $\beta = 0.99$ . Cuando  $\beta = 0.25$  y  $\beta = 0.50$  ambas componentes tienen el mismo orden de magnitud y en particular, la amplitud de la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor que la amplitud de componente longitudinal para los intervalos de tiempo (0.46, 0.56) fs y (0.51, 0.57) fs, respectivamente.



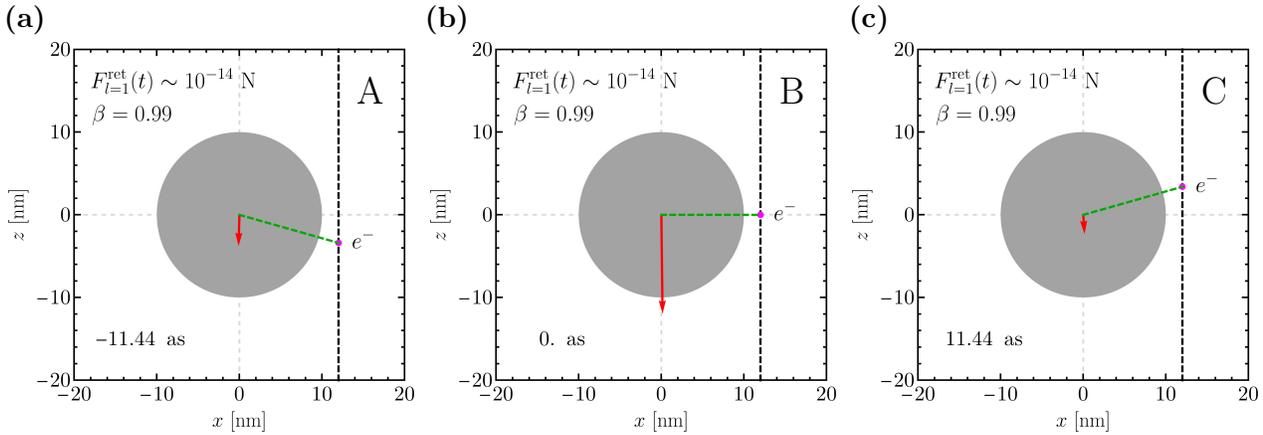
**Fig. 3.3:** Componentes (a), (c), (e) transversal (curvas continuas) y (b), (d), (f) longitudinal (curvas punteadas) de la fuerza de retroceso en función del tiempo que experimenta una nanopartícula de aluminio modelando su función dieléctrica con el modelo de Drude [37, 38] con radio  $a$  y parámetro de impacto  $b$ : (a), (b)  $a = 1$  nm y  $b = 3$  nm, (c), (d)  $a = 10$  nm y  $b = 12$  nm, (e), (f)  $a = 10$  nm y  $b = 30$  nm, respectivamente, para valores de la rapidez relativa del electrón  $\beta = 0.25$  (verde),  $\beta = 0.50$  (amarillo),  $\beta = 0.75$  (azul) y  $\beta = 0.99$  (rojo). Para el cálculo se consideró una superficie de integración esférica de radio  $\varrho = 150$  nm.

Para el arreglo  $\{10, 30\}$ , en la Fig. 3.3(e) se muestra un comportamiento similar al mostrado para el arreglo  $\{1, 3\}$ , aumentando progresivamente el orden de magnitud de la componente transversal cuando  $\beta \rightarrow 1$ , siendo el orden de magnitud máximo  $10^{-17}$  cuando  $\beta = 0.99$ . La Fig. 3.3(f) muestra que la amplitud de la componente longitudinal de la fuerza de retroceso decrece significativamente si  $\beta \rightarrow 0$ , resultando el máximo orden de magnitud  $10^{-16}$  N cuando  $\beta = 0.99$ . En el arreglo  $\{10, 30\}$ , la componente longitudinal de la fuerza de retroceso

sólo es un orden de magnitud mayor que la componente transversal cuando  $\beta = 0.99$ . Para  $\beta \leq 0.75$  ambas componentes tienen los mismos órdenes de magnitud, respectivamente. En particular, para los valores de  $\beta = 0.50$  y  $\beta = 0.75$  la amplitud de la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor que la de la componente longitudinal durante los intervalos de tiempo (0.46, 0.56) fs y (0.51, 0.56) fs, respectivamente. En el caso de  $\beta = 0.25$ , la amplitud de la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor que la de la componente longitudinal para dos intervalos: (0.30, 0.49) fs y (0.69, 0.85) fs.

Del análisis de las gráficas presentadas en la Fig. 3.3 se desprenden dos casos generales: (i) cuando la componente longitudinal de la fuerza de retroceso es mayor que la componente transversal para todo tiempo  $t$ , superando incluso su amplitud en uno o dos órdenes de magnitud, o bien (ii) cuando la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor pero del mismo orden de magnitud que la componente longitudinal y sólo para un intervalo tiempo (dos en el caso del arreglo {10, 30} cuando  $\beta = 0.25$ ). Se puede visualizar la interpretación física de los casos que se mencionan, combinando las componentes transversal y longitudinal de un arreglo para una  $\beta$  dada, obteniendo una representación cuadro a cuadro en el tiempo del vector que indica la dirección y magnitud de la fuerza de retroceso.

Para mostrar el comportamiento temporal de la fuerza de retroceso en el caso  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} > F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$ , en la Fig. 3.4 se presentan tres instantes indicados en las Figs. 3.3(c-d) con las etiquetas A, B y C, correspondientes al arreglo {10, 12} cuando  $\beta = 0.99$ . Es importante tener en cuenta que la representación cuadro a cuadro generada de la combinación de las gráficas 3.3(c-d) depende del radio  $\varrho$  en el sentido de considerar que la información del campo lejano, y por ende la del vector de Poynting asociado, tarda  $\varrho/c$  en llegar a la superficie esférica de integración. Por ello, los pulsos que se presentan en las Figs. 3.3(c-d) se atrasan  $-\varrho/c$  en el tiempo para presentar el vector asociado a la fuerza de retroceso en los instantes que se muestran en la Fig. 3.4 a la par del movimiento del electrón. Por ejemplo, el instante A indicado en las Figs. 3.3(c-d) corresponde al tiempo  $t = 488.90$  as, de manera que al considerar un radio de integración  $\varrho = 150$  nm, el instante recorrido es  $t_\varrho = t - \varrho/c = 11.44$  as tal como se indica en la Fig. 3.4(a).

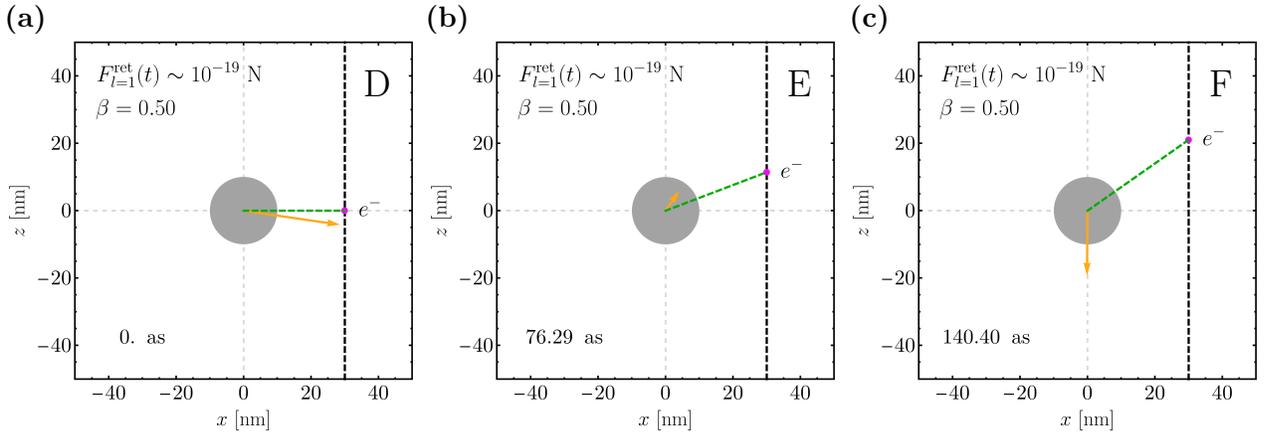


**Fig. 3.4:** Representación de la fuerza de retroceso (flecha roja) en el tiempo (recorrida  $-\varrho/c$ , normalizada y reescalada con el parámetro de impacto) que experimenta una NP de aluminio de radio  $a = 10$  nm (círculo gris) mientras un electrón viaja con velocidad  $\mathbf{v} = 0.99c \hat{\mathbf{e}}_z$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm para los instantes A, B y C, que se muestran en la Fig. 3.3(c-d): (a)  $t = -11.44$  as, (b)  $t = 0$  as y (c)  $t = 11.44$  as, respectivamente.

Los instantes que se muestran en la Fig. 3.4 permiten ilustrar que la componente longitudinal de la fuerza de retroceso que experimenta la NP hecha de aluminio en el arreglo {10, 12}, durante  $\sim 22.88$  as, es significativamente mayor, aproximadamente 100 veces, que la componente transversal. Más aún, la dirección predominante  $-\hat{\mathbf{e}}_z$  de la fuerza de retroceso indica que el vector de Poynting resultante tiene dirección  $\hat{\mathbf{e}}_z$ , de manera que la NP radía en la misma dirección. La Fig. 3.4 ejemplifica el comportamiento común de la fuerza de retroceso que sucede en mitad de los casos que se ilustran en la Fig. 3.3: para el arreglo {1, 3} cuando  $\beta \in \{0.50, 0.75, 0.99\}$ , para el arreglo {10, 12} cuando  $\beta \in \{0.75, 0.99\}$  y para el arreglo {10, 30} cuando  $\beta = 0.99$ . En tales casos, el comportamiento de la fuerza de retroceso que experimenta la NP de aluminio es prácticamente longitudinal y en dirección  $-\hat{\mathbf{e}}_z$  debido a la diferencia de un orden de magnitud (o dos) entre la componente longitudinal de la

### 3.2 Fuerza de retroceso

fuerza de retroceso y la componente transversal. La duración de fuerza de retroceso que experimenta la NP en el caso que  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} > F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$  varía entre 200 as y 15 as, que corresponden a los casos límite: el pulso más largo en el arreglo  $\{10, 12\}$  cuando  $\beta = 0.75$  y al pulso más corto en el arreglo  $\{1, 3\}$  cuando  $\beta = 0.99$ , respectivamente. La Fig. 3.5 ilustra tres instantes indicados en las Figs. 3.3(e-f) con las etiquetas D, E y F, dentro de un rango de 140.40 as representativos de los  $\sim 700$  as que dura la fuerza de retroceso que experimenta la NP de aluminio en el arreglo  $\{10, 30\}$  cuando  $\beta = 0.50$ . Al igual que en la Fig. 3.4, la representación vectorial de la fuerza de retroceso mostrada en la Fig. 3.5 considera un corrimiento  $-\varrho/c$  en su dependencia temporal para ilustrarla a la par del movimiento del electrón. Se observa en la Fig. 3.5(a) el instante  $t = 0$  cuando la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor que la componente longitudinal, siendo de naturaleza atractiva. La Fig. 3.5(b) muestra un instante  $t = 76.29$  as cuando las componentes de la fuerza de retroceso son similares en amplitud. Finalmente, la Fig. 3.5(c) muestra un instante  $t = 140.40$  as donde la fuerza de retroceso es predominantemente longitudinal. Estos resultados muestran que no hay una dirección preferente del vector de Poynting resultante, radiando unos instantes en dirección  $\hat{e}_x$  y en otros en dirección  $\hat{e}_z$ . En el caso específico del arreglo  $\{10, 30\}$ , se puede concluir que el carácter atractivo de la componente transversal de la fuerza de retroceso es el predominante, así como la componente longitudinal tiende a la dirección opuesta del movimiento del electrón.



**Fig. 3.5:** Representación de la fuerza de retroceso (flecha amarilla) en el tiempo (recorrida  $-\varrho/c$ , normalizada y reescalada con el parámetro de impacto) que experimenta una NP de aluminio de radio  $a = 10$  nm (círculo gris) mientras un electrón viaja con velocidad  $\mathbf{v} = 0.50c\hat{e}_z$  y parámetro de impacto  $b = 30$  nm para los instantes E, D y F, que se muestran en la Fig. 3.3(c-d): (a)  $t = 0$  as, (b)  $t = 76.29$  as y (c)  $t = 140.40$  as, respectivamente.

La Fig. 3.5 ejemplifica el caso cuando  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} \lesssim F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$  sólo para un intervalo de tiempo, presente en la mitad de las situaciones mostradas en la Fig. 3.3: para el arreglo  $\{1, 3\}$  cuando  $\beta = 0.25$ , para el arreglo  $\{10, 12\}$  cuando  $\beta \in \{0.25, 0.50\}$  y para el arreglo  $\{10, 30\}$  cuando  $\beta \in \{0.25, 0.50, 0.75\}$ . En tales casos, la fuerza de retroceso que experimenta la NP tiene una dirección tanto longitudinal como transversal, es decir, la NP puede ser atraída y repelida por el electrón (referente al punto donde la trayectoria del electrón interseca al eje  $x$ ) en la misma magnitud que experimenta una fuerza de retroceso paralela al movimiento del electrón.

Al comparar los órdenes de magnitud de la fuerza de retroceso entre los arreglos estudiados, se observan tres resultados de interés. (i) Para el arreglo  $\{1, 3\}$  las componentes de la fuerza de retroceso transversal y longitudinal tienen órdenes de magnitud máximos de  $10^{-18}$  N y  $10^{-17}$  N, respectivamente, mientras que para el arreglo  $\{10, 12\}$  las componentes de la fuerza de retroceso transversal y longitudinal tienen como órdenes de magnitud máximos  $10^{-16}$  N y  $10^{-14}$  N, respectivamente. Se observa que las componentes transversal y longitudinal de fuerza de retroceso disminuyen en dos y tres órdenes de magnitud, respectivamente, al considerar una NP de radio  $a = 1$  nm en lugar de una NP de radio  $a = 10$  nm, manteniendo la relación entre el parámetro de impacto y el radio de la NP de  $b - a = 2$  nm. De lo anterior se puede concluir que la fuerza de retroceso es prácticamente nula al considerar una partícula pequeña en comparación con la calculada en una NP de tamaño significativo  $a \gg 1$  nm, a pesar de que el parámetro de impacto sea del mismo orden de magnitud que el radio de la NP. (ii) Las componentes de la fuerza de retroceso en el arreglo  $\{10, 30\}$  presentan órdenes de magnitud máximos de  $10^{-17}$  N y  $10^{-16}$  N, respectivamente. De modo que, guardando la proporción 1 : 3 entre el radio de la NP y el parámetro

de impacto como en el arreglo  $\{1, 3\}$ , para el arreglo  $\{10, 30\}$  la fuerza de retroceso decrece en uno y dos órdenes de magnitud, respectivamente, al aumentar el parámetro de impacto de  $b = 12$  nm a  $b = 30$  nm, sugiriendo que si bien la NP tiene un tamaño significativo, el hecho de que el parámetro de impacto sea mucho mayor que el radio de la NP implica que la fuerza de retroceso disminuya, como si se considerara una NP pequeña. (iii) Finalmente, la fuerza de retroceso calculada para los tres arreglos presentan un comportamiento en común. La componente transversal es mayor pero del mismo orden que la componente longitudinal principalmente cuando el electrón viaja con rapidez relativa  $\beta \lesssim 0.5$  y es a su vez cuando la fuerza de retroceso alcanza órdenes de magnitud mínimos:  $10^{-21}$  N para el arreglo  $\{1, 3\}$ ,  $10^{-17}$  N para el arreglo  $\{10, 12\}$  y  $10^{-20}$  N para el arreglo  $\{10, 30\}$ .

### 3.2.2. Nanopartícula de oro

Para el caso de una NP de oro, las componentes transversales y longitudinales de la fuerza de retroceso para los arreglos  $\{1, 3\}$ ,  $\{10, 12\}$  y  $\{10, 30\}$  se muestran en la Fig. 3.6, donde se ha usado una función dieléctrica experimental, ajustando los datos con un modelo de Drude más ocho lorentzianas [39]. Al igual que para el caso de la NP de aluminio, las curvas representan la fuerza de retroceso como pulsos que tienden a centrarse en  $t = \varrho/c$  a medida que  $\beta \rightarrow 1$ . Para los tres arreglos, como en el aluminio, las curvas representan físicamente una fuerza de retroceso donde la componente en dirección  $\hat{\mathbf{e}}_x$  varía en el tiempo entre un carácter atractivo (referente al punto de la trayectoria del electrón que interseca al eje  $x$ ) y un carácter repulsivo, mientras que la componente paralela a la trayectoria del electrón tiene predominantemente la dirección  $-\hat{\mathbf{e}}_z$ , es decir, la dirección tiende a ser opuesta a la del movimiento del electrón.

Para el arreglo  $\{1, 3\}$ , la Fig. 3.6(a) muestra que la componente transversal de la fuerza de retroceso aumenta su orden de magnitud progresivamente cuando  $\beta \rightarrow 1$ . El orden de magnitud máximo para la componente transversal es  $10^{-17}$  N cuando  $\beta = 0.99$ . En la Fig. 3.6(b) se observa que la componente longitudinal de la fuerza de retroceso tiene el mismo comportamiento que la componente transversal pero con un orden de magnitud máximo  $10^{-16}$  N cuando  $\beta = 0.99$ . A diferencia del caso de la NP de aluminio, en el arreglo  $\{1, 3\}$ , la componente longitudinal de fuerza de retroceso que experimenta la NP de oro es un orden de magnitud mayor que la componente transversal para todo instante  $t$  sólo en dos casos, cuando  $\beta \in \{0.75, 0.99\}$ . Cuando  $\beta = 0.25$  y  $\beta = 0.50$ , ambas componentes tienen el mismo orden de magnitud y en particular, la amplitud de la componente transversal de la fuerza de retroceso es mayor que la de la componente longitudinal para los intervalos de tiempo (0.49, 0.51) fs y (0.50, 0.51) fs, respectivamente.

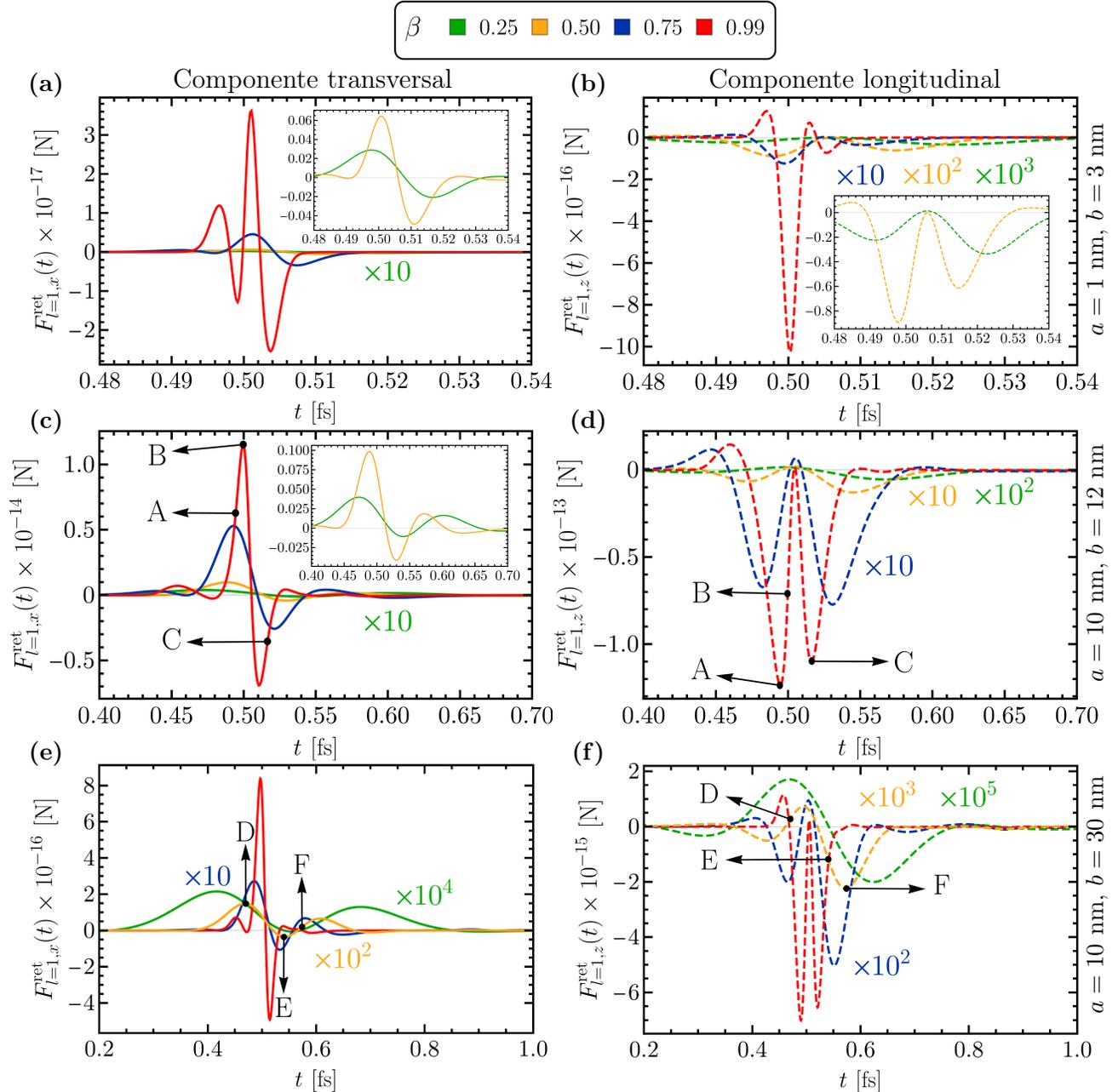
Para el arreglo  $\{10, 12\}$ , la Fig. 3.6(c) muestra que la componente transversal de la fuerza de retroceso tiene el mismo orden de magnitud  $10^{-14}$  N para  $\beta = 0.75$  y  $\beta = 0.99$ , el cual decrece cuando  $\beta \rightarrow 0$ . En comparación, en la Fig. 3.6(d) se observa que la componente longitudinal de la fuerza de retroceso tiene los mismos órdenes de magnitud que la componente transversal cuando  $\beta \in \{0.25, 0.50, 0.75\}$ , mientras que para  $\beta = 0.99$  el orden de magnitud aumenta hasta  $10^{-13}$  N. Los intervalos de tiempo para los cuales la amplitud de la componente transversal es mayor que la de la longitudinal son (0.42, 0.52) fs, (0.47, 0.51) fs y (0.49, 0.51) fs para  $\beta = 0.25$ ,  $\beta = 0.50$  y  $\beta = 0.75$ , respectivamente. Sólo cuando  $\beta = 0.99$ , la amplitud de la componente longitudinal es mayor que la amplitud de la componente transversal para todo instante  $t$ .

El caso del arreglo  $\{10, 30\}$ , mostrado en las Fig. 3.6(e-f), es similar al del arreglo  $\{10, 12\}$ . Para  $\beta \in \{0.25, 0.50, 0.75\}$  el orden de magnitud de la componente transversal de la fuerza de retroceso coincide con el de la componente longitudinal, siendo mayor la amplitud de la componente transversal para los intervalos (0.25, 0.46)  $\cup$  (0.68, 0.86) fs, (0.41, 0.50) fs y (0.47, 0.51) fs, respectivamente. Para  $\beta = 0.99$ , la amplitud de la componente longitudinal es mayor que la amplitud de la componente transversal para todo tiempo  $t$ , siendo los órdenes de magnitud máximos  $10^{-16}$  N para la componente transversal y  $10^{-15}$  N para la componente longitudinal.

Comparando las magnitudes de las componentes de la fuerza de retroceso calculadas para los tres arreglos entre sí, se observan resultados similares al del caso de una NP de aluminio. En el arreglo  $\{1, 3\}$ , las componentes transversal y longitudinal de la fuerza de retroceso [Fig. 3.6(a-b)] presentan órdenes de magnitud máximos de  $10^{-17}$  N y  $10^{-16}$  N, respectivamente, mientras que en el arreglo  $\{10, 12\}$  los órdenes de magnitud máximos para las componentes transversal y longitudinal [Fig. 3.6(c-d)] son  $10^{-14}$  N y  $10^{-13}$  N, respectivamente. Ambas componentes de la fuerza de retroceso difieren en tres órdenes magnitud entre ambos arreglos, de manera que la fuerza de retroceso es prácticamente nula en el arreglo  $\{1, 3\}$ , tal como en el caso de la aproximación de

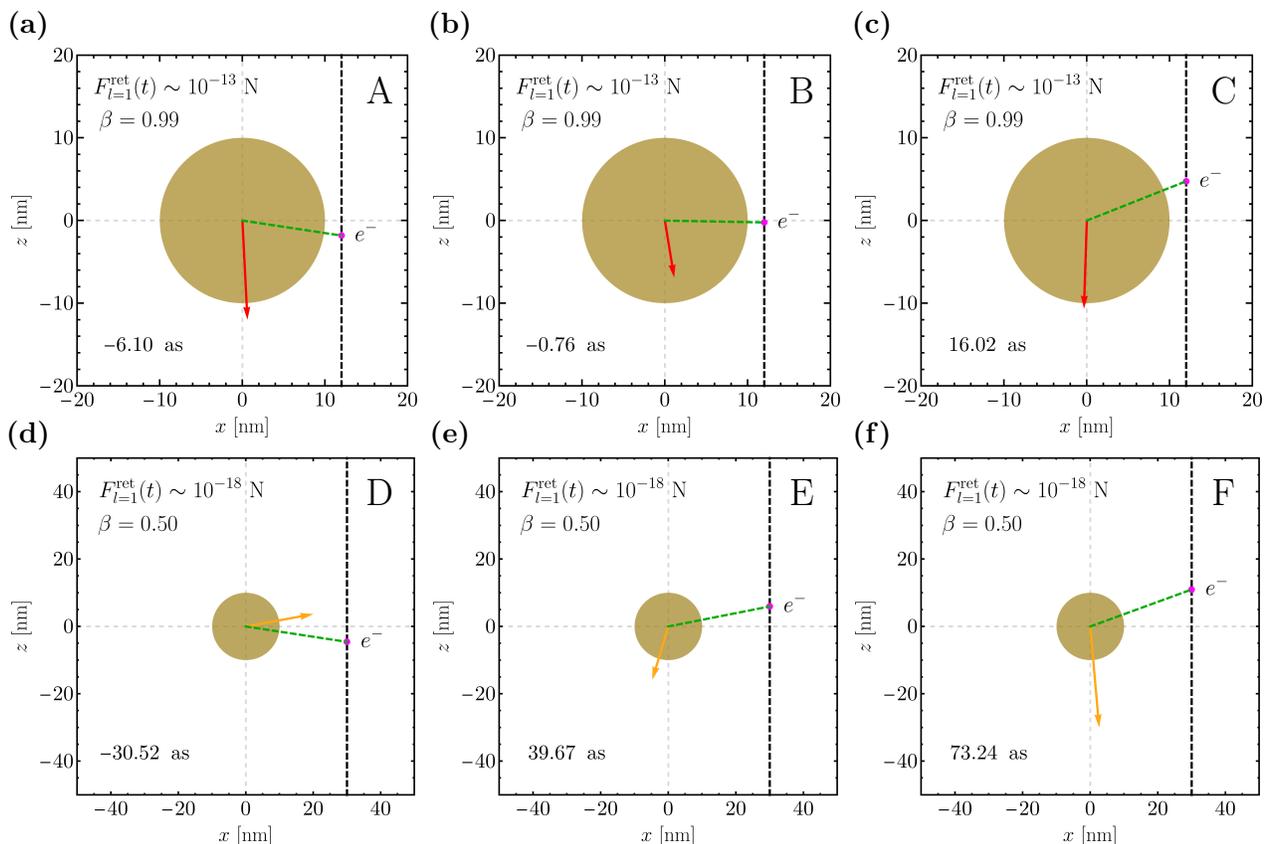
### 3.2 Fuerza de retroceso

partícula pequeña. En el arreglo  $\{10, 30\}$ , las componentes transversal y longitudinal de la fuerza de retroceso [Fig. 3.6(e-f)] tienen órdenes máximos de magnitud  $10^{-16}$  N y  $10^{-15}$  N, respectivamente, lo que en comparación con las componentes de la fuerza de retroceso calculadas para el arreglo  $\{10, 12\}$  difieren dos órdenes de magnitud para ambas componentes, sugiriendo así que la fuerza de retroceso cuando  $b \gg a$  considera a la partícula pequeña por la comparación entre el parámetro de impacto y el radio de la NP.



**Fig. 3.6:** Componentes (a), (c), (e) transversal (curvas continuas) y (b), (d), (f) longitudinal (curvas punteadas) de la fuerza de retroceso en función del tiempo que experimenta una nanopartícula de oro modelando su función dieléctrica con el modelo de Drude-Lorentz [39] con radio  $a$  y parámetro de impacto  $b$ : (a), (b)  $a = 1$  nm y  $b = 3$  nm, (c), (d)  $a = 10$  nm y  $b = 12$  nm, (e), (f)  $a = 10$  nm y  $b = 30$  nm, respectivamente, para valores de la rapidez relativa del electrón  $\beta = 0.25$  (verde),  $\beta = 0.50$  (amarillo),  $\beta = 0.75$  (azul) y  $\beta = 0.99$  (rojo). Para el cálculo se considera una superficie de integración esférica de radio  $\rho = 150$  nm.

Para comparar los resultados obtenidos para el oro con los obtenidos para una NP de aluminio, en la Fig. 3.7 se presentan los instantes indicados en las Figs. 3.6(c-f) de la fuerza de retroceso que experimenta una NP de oro en los arreglos {10, 12} y {10, 30} cuando  $\beta = 0.99$  y  $\beta = 0.50$ , respectivamente. Las Figs. 3.7(a-c) ejemplifican el caso cuando la fuerza de retroceso es predominantemente longitudinal. A diferencia de la NP de aluminio donde se presentaba en la mitad de los casos, para la NP de oro este caso se presenta principalmente cuando  $\beta \simeq 0.99$ . Las Figs. 3.7(d-f) representan el caso cuando ambas componentes de la fuerza de retroceso, transversal y longitudinal, tienen el mismo orden de magnitud. En general, la fuerza de retroceso que experimenta una NP de oro no tiene una dirección preferente a menos de que la rapidez relativa del electrón se aproxime al límite relativista ( $0.75 \leq \beta \rightarrow 1$ ).



**Fig. 3.7:** Representación de la fuerza de retroceso (flechas roja y amarilla) en el tiempo (recorrida  $-\varrho/c$ , normalizada y reescalada con el parámetro de impacto) que experimenta una NP de oro de radio  $a = 10$  nm (círculo dorado) mientras un electrón viaja con velocidad y parámetro de impacto (a-c)  $\mathbf{v} = 0.99c \hat{\mathbf{e}}_z$  y  $b = 12$  nm, (d-f)  $\mathbf{v} = 0.50c \hat{\mathbf{e}}_z$  y  $b = 30$  nm, respectivamente. Los instantes A, B y C que se muestran en la Fig. 3.6(c-d) son los tiempos (a)  $t = -0.61$  as, (b)  $t = -0.0763$  as y (c)  $t = 1.6$  as, respectivamente. Los instantes D, E y F que se muestran en la Fig. 3.6(e-f) corresponden a los tiempos (d)  $t = -3.05$  as, (e)  $t = 3.97$  as y (f)  $t = 7.32$  as, respectivamente

En general, la fuerza de retroceso que experimenta una NP de oro se caracteriza por presentar componentes con un orden de magnitud mayor en comparación con los obtenidos para una NP de aluminio. Por otra parte, en las Figs. 3.3(d,f) se muestra que para  $a = 10$  nm ( $a \gg 1$  nm), la componente longitudinal de la fuerza de retroceso en el caso de una NP de aluminio sólo tiene un mínimo apreciable, mientras que en las Figs. 3.6(d,f) se observa que la componente longitudinal en el caso de una NP de oro presenta dos mínimos relevantes y comparables entre sí. Físicamente se interpreta como una fuerza en la dirección  $-\hat{\mathbf{e}}_z$  con amplitud significativa y semejante, en dos instantes diferentes.

### 3.2.3. Nanopartícula de bismuto

A diferencia del aluminio y el oro, el bismuto puede ser considerado un semimetal [40], compartiendo propiedades tanto con metales como con dieléctricos, o bien presentando cantidades características con valores intermedios entre los dados para estas dos clasificaciones (por ejemplo, conductividad térmica y conductividad eléctrica). En la Fig. 3.8 se presenta el comportamiento de las componentes transversal y longitudinal de la fuerza de retroceso en función del tiempo que experimenta una NP de bismuto para los arreglos  $\{1, 3\}$ ,  $\{10, 12\}$  y  $\{10, 30\}$ , para cuatro valores diferentes de la rapidez relativa del electrón  $\beta$  y considerando datos experimentales de la función dieléctrica, ajustada con el modelo de Brendel-Bormann [39, 41].

Una de las características de la fuerza de retroceso calculada para una NP de bismuto es que la componente transversal de la fuerza de retroceso [Figs. 3.8(a,c,e)] tiene el mismo orden de magnitud que la componente longitudinal [Figs. 3.8(b,d,f)] en los tres arreglos cuando  $\beta \in \{0.25, 0.50, 0.75\}$ , y sólo es predominante la componente longitudinal en todo tiempo  $t$  cuando  $\beta = 0.99$ .

Otra de las características principales de la fuerza de retroceso en una NP de bismuto se presenta en las Figs. 3.8(c-f), donde al considerar el radio  $a = 10$  nm ( $a \gg 1$  nm), las componentes de la fuerza de retroceso presentan un carácter oscilatorio con máximos y mínimos en varios instantes, lo que físicamente se interpreta como una fuerza de retroceso con componentes que oscilan a medida que el tiempo avanza pero con una mayor duración en comparación con la que experimenta una NP de aluminio o una NP de oro.

Las amplitudes de las componentes de la fuerza de retroceso aumentan al considerar una NP de bismuto (Fig. 3.8) en comparación con las calculadas para una NP de aluminio (Fig. 3.3). Sin embargo, las amplitudes de las componentes de la fuerza de retroceso al considerar una NP de bismuto no superan a las calculadas para una NP de oro (Fig. 3.6).

Al considerar una NP de radio  $a = 10$  nm, tanto las componentes longitudinales de la fuerza de retroceso calculadas para una NP de oro [Figs. 3.6(d,f)], como para una NP de bismuto [Figs. 3.8(d,f)], se caracterizan por presentar dos mínimos relevantes y comparables entre sí. La diferencia radica en que la amplitud del primer mínimo es mayor al considerar una NP de oro, mientras que la amplitud del segundo mínimo es mayor cuando se considera una NP de bismuto.

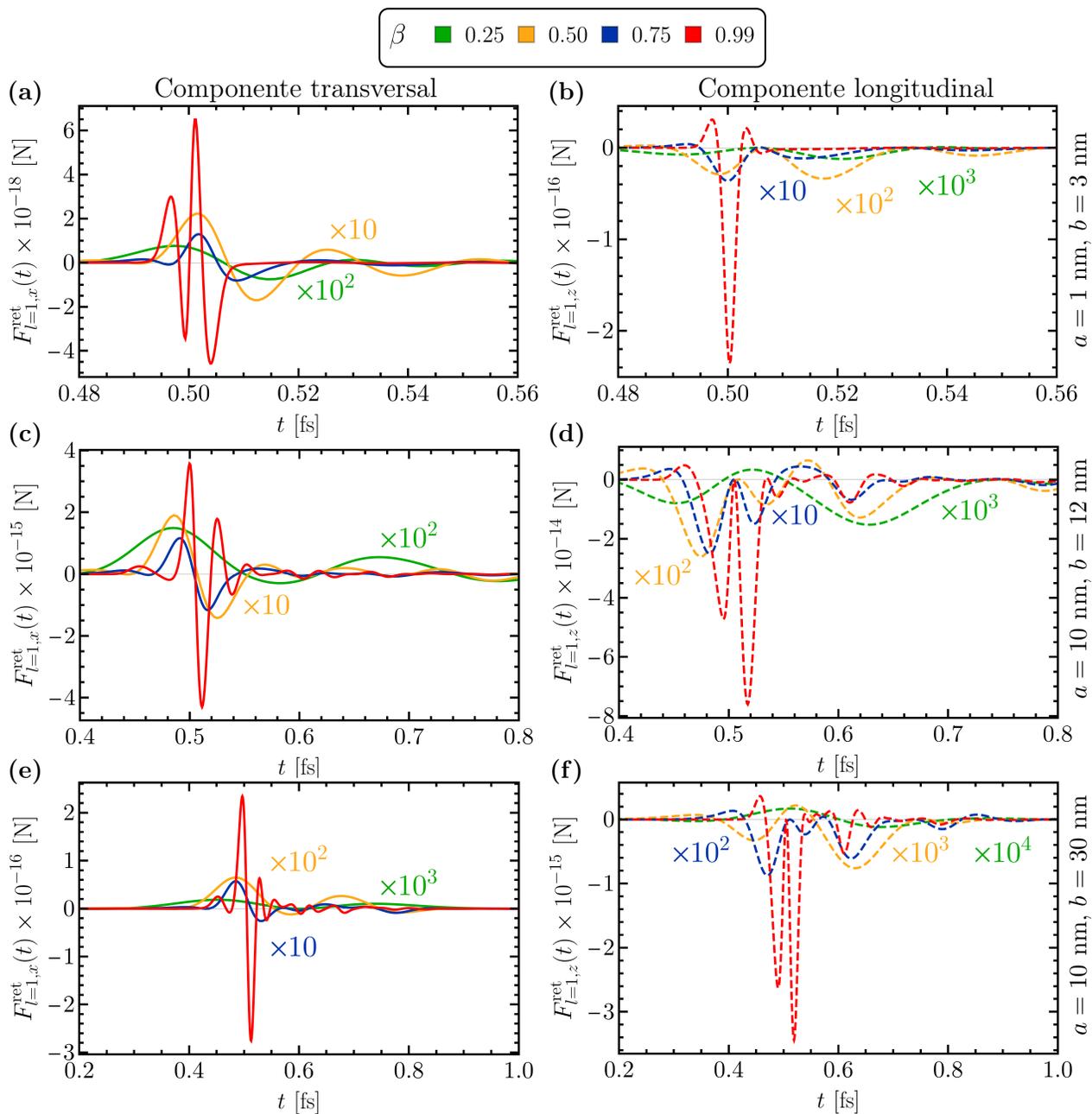
### 3.2.4. Nanopartícula de carburo de silicio

El carburo de silicio es un material dieléctrico de alto índice de refracción, siendo la contribución dipolar magnética más relevante que la dipolar eléctrica, a diferencia de los metales donde predomina la respuesta eléctrica sobre la magnética. La Fig. 3.9 presenta el comportamiento de la fuerza de retroceso en función del tiempo que experimenta una NP hecha de carburo de silicio considerando datos experimentales de la función dieléctrica, ajustada con el modelo de Brendel-Bormann [41, 42], para los arreglos  $\{1, 3\}$ ,  $\{10, 12\}$ ,  $\{10, 30\}$  y para cuatro diferentes valores de la rapidez relativa del electrón  $\beta$ .

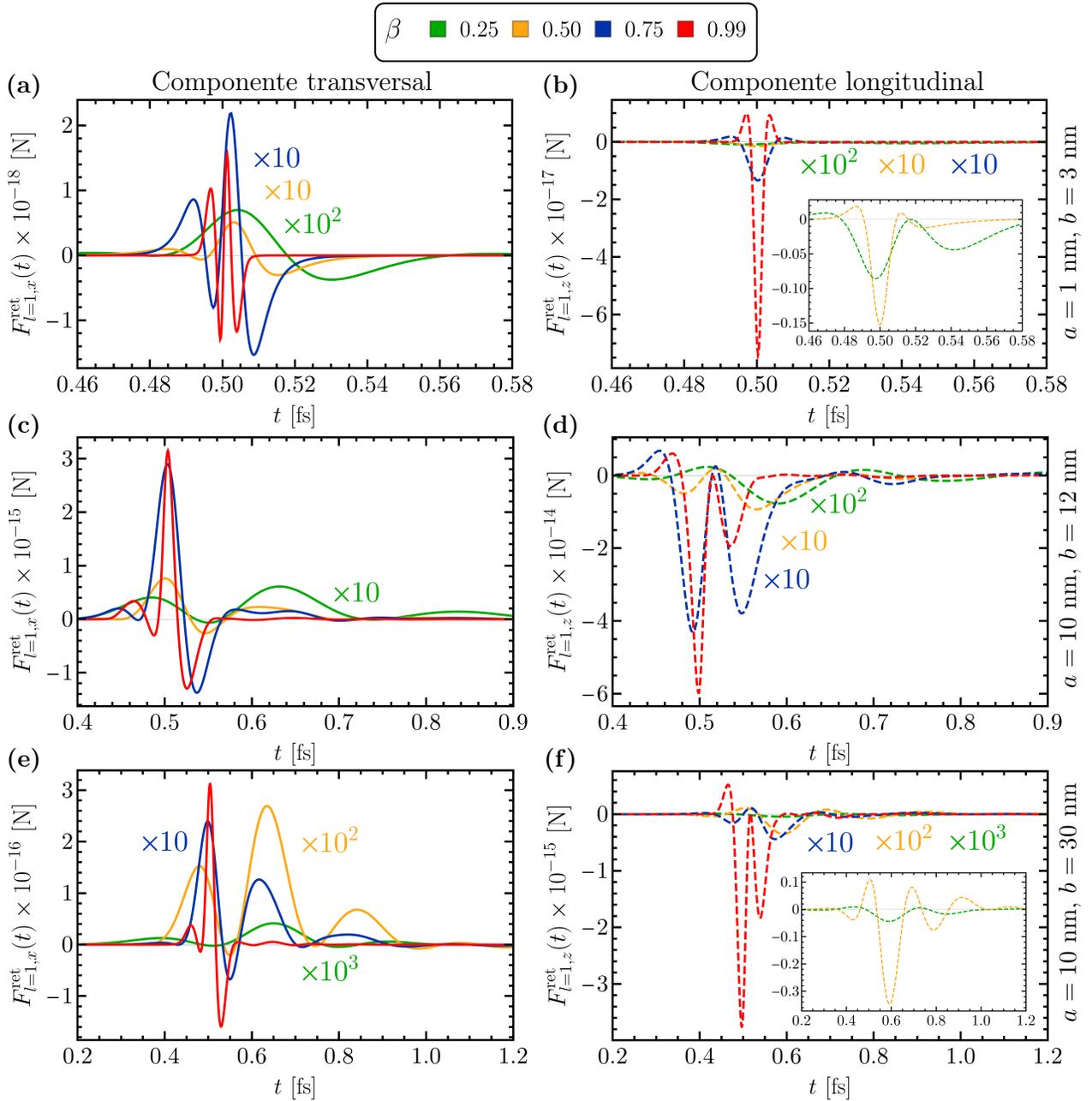
Al considerar una NP de radio  $a = 10$  nm, la fuerza de retroceso calculada para una NP de carburo de silicio se caracteriza por presentar un comportamiento semejante al del bismuto, de tal modo que las componentes transversal [Figs. 3.9(c,e)] y longitudinal [Figs. 3.9(d,f)] coinciden en el orden de magnitud correspondientemente en cada arreglo cuando  $\beta \in \{0.25, 0.50, 0.75\}$ , siendo los casos donde las componentes de la fuerza de retroceso son tales que  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} \lesssim F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$ . Los casos donde la componente longitudinal predomina, es decir  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} > F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$ , se presentan cuando  $\beta = 0.99$  en los tres arreglos y en el arreglo  $\{1, 3\}$  cuando  $\beta \geq 0.50$ . Al comparar la Fig. 3.8 con la Fig. 3.9 se observa que, en general, las amplitudes de las componentes de la fuerza de retroceso para una NP de bismuto y para una NP de carburo de silicio son similares, de manera que las amplitudes de las componentes de la fuerza de retroceso para una NP de carburo de silicio están acotadas inferiormente por las calculadas para una NP de aluminio y superiormente por las calculadas para una NP de oro. Con estos resultados, se puede decir que el comportamiento de la fuerza de retroceso que experimenta una NP dieléctrica es semejante a la que experimenta una semimetálica.

Al comparar entre sí los órdenes de magnitud máximos de las componentes de la fuerza de retroceso que se obtienen para cada arreglo, se confirman dos resultados para el caso de un dieléctrico, obtenidos previamente tanto en metales como en el semimetal: (i) la fuerza de retroceso calculada en el arreglo  $\{1, 3\}$  verifica el resultado que se espera para la aproximación de partícula pequeña, resultando una fuerza prácticamente nula al

compararla con la fuerza de retroceso calculada para el arreglo  $\{10, 12\}$  ( $b \sim a \gg 1$  nm). (ii) Las componentes de la fuerza de retroceso calculada para el arreglo  $\{10, 30\}$  decrece un orden de magnitud en comparación con las componentes calculadas para el arreglo  $\{10, 12\}$ , sugiriendo que el hecho de considerar  $b \gg a \gg 1$  nm tiende al comportamiento de la aproximación de partícula pequeña.



**Fig. 3.8:** Componentes (a), (c), (e) transversal (curvas continuas) y (b), (d), (f) longitudinal (curvas punteadas) de la fuerza de retroceso en el tiempo que experimenta una nanopartícula de bismuto modelando su función dieléctrica con el modelo de Brendel-Bormann [39, 41] con radio  $a$  y parámetro de impacto  $b$ : (a), (b)  $a = 1$  nm y  $b = 3$  nm, (c), (d)  $a = 10$  nm y  $b = 12$  nm, (e), (f)  $a = 10$  nm y  $b = 30$  nm, respectivamente, para velocidades relativas del electrón  $\beta = 0.25$  (verde),  $\beta = 0.50$  (amarillo),  $\beta = 0.75$  (azul) y  $\beta = 0.99$  (rojo). Para el cálculo se considera una superficie de integración esférica de radio  $\rho = 150$  nm.



**Fig. 3.9:** Componentes (a), (c), (e) transversal (curvas continuas) y (b), (d), (f) longitudinal (curvas punteadas) de la fuerza de retroceso en el tiempo que experimenta una nanopartícula de carburo de silicio modelando su función dieléctrica con el modelo de Brendel-Bormann [41, 42] con radio  $a$  y parámetro de impacto  $b$ : (a), (b)  $a = 1$  nm y  $b = 3$  nm, (c), (d)  $a = 10$  nm y  $b = 12$  nm, (e), (f)  $a = 10$  nm y  $b = 30$  nm, respectivamente, para velocidades relativas del electrón  $\beta = 0.25$  (verde),  $\beta = 0.50$  (amarillo),  $\beta = 0.75$  (azul) y  $\beta = 0.99$  (rojo). Para el cálculo se considera una superficie de integración esférica de radio  $\varrho = 150$  nm.

Del análisis de las componentes de la fuerza de retroceso para NP hechas de cuatro diferentes materiales —dos metales, un semimetal y un dieléctrico de alto índice de refracción— se puede concluir en general que la fuerza de retroceso se presenta en NP de radio  $a \gg 1$  nm. Las amplitudes de las componentes de la fuerza de retroceso son comparables entre sí dependiendo de la velocidad relativa del electrón  $\beta$ : (i)  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} \lesssim F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$  si  $\beta \leq 0.75$ , o bien (ii)  $F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}} > F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}$  si  $\beta \simeq 0.99$ . En cuestión de materiales, la respuesta mecánica al momento radiado por el campo EM esparcido por la NP se deberá principalmente a la asimetría en el tiempo del patrón radiación dado por el vector de Poynting asociado al campo EM esparcido en campo lejano.

---

## Conclusiones y trabajo a futuro

---

### 4.1. Conclusiones

Desde el enfoque de la electrodinámica clásica, en este trabajo se estudió la fuerza de retroceso, dada en términos del vector de Poynting resultante, que experimenta una nanopartícula de radio  $a$  debida al campo electromagnético radiado e inducido por el campo electromagnético de un electrón que viaja una velocidad constante  $\mathbf{v} = \beta c \hat{\mathbf{e}}_z$ , que pasa a una distancia  $b$  del centro de la nanopartícula. Los cálculos se realizaron considerando tres diferentes combinaciones de radio  $a$  y parámetro impacto  $b$  (denominadas arreglos  $\{a, b\}$ ) y diferentes materiales del que está hecha la nanopartícula: metales como el aluminio y el oro, semimetales como bismuto y dieléctricos de alto índice de refracción como el carburo de silicio. Las conclusiones que se desprenden del trabajo son las siguientes:

- La fuerza de retroceso es un pulso que considera el tiempo de retardo  $\rho/c$  que tarda en llegar la información a la superficie de integración esférica de radio  $\rho$  donde se calcula el vector de Poynting resultante. De este modo, la fuerza de retroceso se debe a la asimetría del patrón de radiación asociado al vector de Poynting sobre la superficie de integración.
- En la aproximación dipolar, la fuerza de retroceso se debe a la interacción entre el dipolo eléctrico y el dipolo magnético, de modo que si no se considera la presencia de alguno de estos dos términos, la fuerza de retroceso se anula para todo instante debido a la simetría del patrón de radiación asociado al campo EM producido por el dipolo considerado (eléctrico o magnético).
- La fuerza de retroceso tiene dos componentes: la componente longitudinal en dirección  $-\hat{\mathbf{e}}_z$ , es decir, predomina la dirección contraria al movimiento del electrón y la componente transversal en dirección  $\hat{\mathbf{e}}_x$  que oscila en el tiempo entre un carácter atractivo y uno repulsivo (referente al punto donde la trayectoria del electrón interseca al eje  $x$ ).
- En general, la relación entre las amplitudes de las componentes de la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula tienen dos posibles comportamientos que dependen principalmente de la rapidez relativa  $\beta$  del electrón. Si  $\beta \leq 0.75$ , la componente transversal es del mismo orden de magnitud que la componente longitudinal, siendo ambas relevantes para la dinámica de la nanopartícula dada por la fuerza de retroceso. Si  $0.75 < \beta \rightarrow 1$  (límite relativista), la amplitud de la componente longitudinal de la fuerza predomina sobre la amplitud de la componente transversal.
- Al considerar la configuración  $b \sim a \sim 1$  nm, la fuerza de retroceso es prácticamente nula al compararse con la calculada en el arreglo donde  $b \sim a \gg 1$  nm, verificando que la fuerza de retroceso es cero en la aproximación de partícula pequeña. A su vez, la fuerza de retroceso tiende a decrecer, en comparación a la calculada en el arreglo donde  $b \sim a \gg 1$  nm, cuando se considera un parámetro de impacto  $b \gg a \gg 1$  nm.

Tal comportamiento se debe a que la configuración tiende a la aproximación de partícula pequeña por considerar un parámetro de impacto mucho mayor que el radio de la nanopartícula.

- La fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula de aluminio es de menor magnitud que la que se calcula para una nanopartícula de bismuto. En general, la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula de bismuto y una nanopartícula de carburo de silicio son del mismo orden de magnitud. La fuerza de retroceso obtenida al considerar una nanopartícula de oro es la de mayor magnitud entre los materiales estudiados.
- La fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula de bismuto, representativa de los semimetales, se caracteriza por tener una mayor duración que la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula metálica o dieléctrica.

## 4.2. Trabajo a futuro

Las líneas en las que se puede continuar el estudio de la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula son:

- Calcular la fuerza de retroceso que experimenta una nanopartícula en función del radio y del parámetro de impacto considerando las contribuciones multipolares de mayor orden ( $l \geq 2$ ) al campo electromagnético esparcido lejano.
- Emplear la metodología de las funciones espectrales auxiliares y la transformada rápida de Fourier para el cálculo de la fuerza total asociada al campo electromagnético esparcido en la aproximación dipolar en sus tres contribuciones: el término asociado al campo interno, el asociado al campo externo y el asociado al campo lejano (fuerza de retroceso), considerando la integral en la variable  $r$  que no se toma en cuenta en el término de la fuerza de retroceso pero sí en los primeros dos términos de la Ec. (2.29). Esta nueva integral podría calcularse con algún método numérico o bien, analizando las expresiones analíticas, específicamente al calcular integrales de ángulo sólido, para hallar una posible simplificación de las expresiones por medio de su relación con las funciones espectrales auxiliares.
- Calcular la integral temporal de la fuerza de retroceso variando la rapidez relativa del electrón  $\beta$  y parámetro de impacto  $b$  para encontrar posibles valores óptimos que dan lugar a un valor máximo de la componente transversal del momento lineal radiado.

# Solución de Mie extendida: Cálculos suplementarios

---

Para resolver la ecuación vectorial de Helmholtz [28]

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = 0, \quad (\text{A.1})$$

se propone un campo  $\mathbf{M}$  tal que su divergencia sea cero ( $\nabla \cdot \mathbf{M} = 0$ ), expresándolo como el rotacional de otra función vectorial  $\mathbf{V}$ :

$$\mathbf{M} = \nabla \times \mathbf{V}. \quad (\text{A.2})$$

Calculando el operador  $(\nabla^2 + k^2)$  de la Ec. (A.2) se obtiene

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{M}) - \nabla \times (\nabla \times \mathbf{M}) + k^2 \mathbf{M} \quad (\text{A.3a})$$

$$= \nabla[\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{V})] - \nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V})] + k^2 \nabla \times \mathbf{V} \quad (\text{A.3b})$$

$$= \nabla \times [-\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V})] + \nabla \times (k^2 \mathbf{V}) \quad (\text{A.3c})$$

$$= \nabla \times [\nabla^2 \mathbf{V} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{V}) + k^2 \mathbf{V}] \quad (\text{A.3d})$$

$$= \nabla \times [\nabla^2 \mathbf{V} + k^2 \mathbf{V}] - \nabla \times [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{V})] \quad (\text{A.3e})$$

$$= \nabla \times [\nabla^2 \mathbf{V} + k^2 \mathbf{V}]. \quad (\text{A.3f})$$

A su vez, la función vectorial  $\mathbf{V}$  puede ser expresado en términos de una función escalar  $\psi$  de la forma

$$\mathbf{V} = \mathbf{r}\psi, \quad (\text{A.4})$$

donde  $\mathbf{r}$  es el vector de posición. Calculando el laplaciano ( $\nabla^2$ ) en coordenadas esféricas de  $\mathbf{V}$  dado por la Ec. (A.4), se obtiene:

$$\nabla^2 \mathbf{V} = \nabla^2(\mathbf{r}\psi) \quad (\text{A.5a})$$

$$= \nabla \cdot [\nabla(\mathbf{r}\psi)] \quad (\text{A.5b})$$

$$= \nabla \cdot (\psi \nabla \mathbf{r} + \mathbf{r} \nabla \psi) \quad (\text{A.5c})$$

$$= \nabla \cdot (\overleftarrow{\mathbf{I}} \psi + \mathbf{r} \nabla \psi) \quad (\text{A.5d})$$

$$= \nabla \psi + \nabla \cdot (\mathbf{r} \nabla \psi) \quad (\text{A.5e})$$

$$= \nabla \psi + \mathbf{r} \nabla \cdot (\nabla \psi) + \nabla \psi \nabla \cdot \mathbf{r} \quad (\text{A.5f})$$

$$= 4 \nabla \psi + \mathbf{r} \nabla^2 \psi. \quad (\text{A.5g})$$

Sustituyendo el resultado de la Ec. (A.5) en la Ec. (A.3):

$$\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = \nabla \times [\nabla^2 \mathbf{V} + k^2 \mathbf{V}] \quad (\text{A.6a})$$

$$= \nabla \times [4\nabla\psi + \mathbf{r}\nabla^2\psi + \mathbf{r}k^2\psi] \quad (\text{A.6b})$$

$$= 4\nabla \times (\nabla\psi) + \nabla \times [\mathbf{r}(\nabla^2\psi + k^2\psi)] \quad (\text{A.6c})$$

$$= \nabla \times [\mathbf{r}(\nabla^2\psi + k^2\psi)]. \quad (\text{A.6d})$$

Si  $\psi$  cumple con la ecuación escalar de Helmholtz entonces  $\mathbf{M}$  cumple con la ecuación vectorial de Helmholtz. Definiendo otra función vectorial  $\mathbf{N}$  como

$$\mathbf{N} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k}, \quad (\text{A.7})$$

se calcula el operador  $(\nabla^2 + k^2)$  aplicado a  $\mathbf{N}$  dado por la Ec. (A.7):

$$\nabla^2 \mathbf{N} + k^2 \mathbf{N} = \nabla^2 \left( \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \right) + k^2 \left( \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \right) \quad (\text{A.8a})$$

$$= \frac{1}{k} \{ \nabla[\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{M})] - \nabla \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{M})] + k^2 \nabla \times \mathbf{M} \} \quad (\text{A.8b})$$

$$= \frac{1}{k} \{ \nabla \times [-\nabla \times (\nabla \times \mathbf{M})] + \nabla \times (k^2 \mathbf{M}) \} \quad (\text{A.8c})$$

$$= \frac{1}{k} \{ \nabla \times [\nabla^2 \mathbf{M} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{M})] + \nabla \times (k^2 \mathbf{M}) \} \quad (\text{A.8d})$$

$$= \frac{1}{k} \{ \nabla \times (\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M}) - \nabla \times [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{M})] \} \quad (\text{A.8e})$$

$$= \frac{1}{k} [\nabla \times (\nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M})], \quad (\text{A.8f})$$

donde nuevamente, si  $\psi$  cumple con la ecuación escalar de Helmholtz, entonces  $\mathbf{M}$  cumple con la ecuación vectorial de Helmholtz, y por tanto también  $\mathbf{N}$ . Así:

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \mathbf{M} + k^2 \mathbf{M} = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \mathbf{N} + k^2 \mathbf{N} = 0. \quad (\text{A.9})$$

También se tiene que  $\mathbf{N}$  es proporcional a  $\mathbf{M}$ , ya que

$$\nabla \times \mathbf{N} = \nabla \times \left( \frac{\nabla \times \mathbf{M}}{k} \right) \quad (\text{A.10a})$$

$$= \frac{1}{k} [\nabla(\nabla \cdot \mathbf{M}) - \nabla^2 \mathbf{M}] \quad (\text{A.10b})$$

$$= \frac{-\nabla^2 \mathbf{M}}{k} \quad (\text{A.10c})$$

$$= \frac{k^2 \mathbf{M}}{k} \quad (\text{A.10d})$$

$$= k\mathbf{M}. \quad (\text{A.10e})$$

En resumen,  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{N}$  cumplen con las ecuaciones

$$\nabla \times \mathbf{M} = k\mathbf{N}, \quad \nabla \times \mathbf{N} = k\mathbf{M}, \quad (\text{A.11a})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{M} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{N} = 0. \quad (\text{A.11b})$$

Para resolver la ecuación escalar de Helmholtz en coordenadas esféricas

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + k^2 \psi = 0, \quad (\text{A.12})$$

se propone una solución de la forma  $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ , reescribiendo la Ec. (A.12) como

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + k^2 r^2 + \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \right) = 0. \quad (\text{A.13a})$$

Separando (A.13a) en cada variable esférica, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -m^2, \quad (\text{A.13b})$$

$$\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = -l(l+1) \quad (\text{Ecuación asociada de Legendre}), \quad (\text{A.13c})$$

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + k^2 r^2 = l(l+1) \quad (\text{Ecuación esférica de Bessel}). \quad (\text{A.13d})$$

Las soluciones a las Ecs. (A.13) son, en términos de las constantes  $l$  y  $m$ , respectivamente:

$$\Phi_m(\varphi) = \exp(im\varphi), \quad (\text{A.14a})$$

$$\Theta_{l,m}(\theta) = P_l^m(\cos \theta) \quad (\text{Función asociada de Legendre}), \quad (\text{A.14b})$$

$$R_l(r) = z_l^{(j)}(kr) \quad (\text{Función esférica de Bessel}), \quad (\text{A.14c})$$

con  $l \in \{1, 2, \dots\}$  y  $m \in \{-l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l\}$ , y donde el superíndice  $j \in \{1, 2, 3, 4\}$  denota

$$z_l^{(1)}(kr) = j_l(kr) \quad (\text{Función esférica de Bessel del tipo 1}), \quad (\text{A.15a})$$

$$z_l^{(2)}(kr) = y_l(kr) \quad (\text{Función esférica de Bessel del tipo 2}), \quad (\text{A.15b})$$

$$z_l^{(3)}(kr) = h_l^{(+)}(kr) = i j_l(kr) - y_l(kr) \quad (\text{Función esférica de Hankel del tipo 1}), \quad (\text{A.15c})$$

$$z_l^{(4)}(kr) = h_l^{(-)}(kr) = i j_l(kr) + y_l(kr) \quad (\text{Función esférica de Hankel del tipo 2}). \quad (\text{A.15d})$$

La solución a la Ec. (A.12) corresponde a combinaciones lineales del producto de las Ecs. (A.14), obteniendo:

$$\psi^{(j)}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{l,m} z_l^{(j)}(kr) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (\text{A.16})$$

donde  $\psi_{l,m}$  es el coeficiente de la combinación lineal y  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  el armónico esférico escalar de orden  $l, m$  dado por

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = f_{l,m} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \quad \text{con} \quad f_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}, \quad (\text{A.17})$$

que es solución a la parte angular de la Ec. (A.13a). Como  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{N}$  se relacionan con  $\psi$  de la siguiente manera:

$$\mathbf{M}^{(j)} = \nabla \times (\mathbf{r}\psi^{(j)}) = -\mathbf{r} \times \nabla \psi^{(j)}, \quad \mathbf{N}^{(j)} = \frac{\nabla \times \mathbf{M}^{(j)}}{k} = \frac{\nabla \times \left( \frac{\hat{\mathbf{L}}\psi^{(j)}}{i} \right)}, \quad (\text{A.18a})$$

$$i\mathbf{M}^{(j)} = -i\mathbf{r} \times \nabla \psi^{(j)}, \quad \mathbf{N}^{(j)} = \frac{\nabla \times \hat{\mathbf{L}}\psi^{(j)}}{ik}, \quad (\text{A.18b})$$

definiendo los operadores como  $\hat{\mathbf{L}} = -i\mathbf{r} \times \nabla$  [33] y  $\hat{\mathbf{Y}} = (ik)^{-1} \nabla \times \hat{\mathbf{L}}$ , concluyendo que

$$\hat{\mathbf{L}}\psi^{(j)} = i\mathbf{M}^{(j)} \quad \text{y} \quad \hat{\mathbf{Y}}\psi^{(j)} = \mathbf{N}^{(j)}. \quad (\text{A.19})$$

Calculando los operadores  $\hat{\mathbf{L}}$  y  $\hat{\mathbf{Y}}$  aplicados a la Ec. (A.16), se obtiene que:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}\psi^{(j)}(r, \theta, \varphi) &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{l,m} \hat{\mathbf{L}}[z_l^{(j)}(kr) Y_l^m(\theta, \varphi)] \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{l,m} f_{l,m} \hat{\mathbf{L}}[z_l^{(j)}(kr) P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)] \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l G_{l,m}^{\mathbf{M}} i \mathbf{M}_{l,m}^{(j)}(k; r, \theta, \varphi),\end{aligned}\tag{A.20a}$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{Y}}\psi^{(j)}(r, \theta, \varphi) &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{l,m} \hat{\mathbf{Y}}[z_l^{(j)}(kr) Y_l^m(\theta, \varphi)] \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{l,m} f_{l,m} \hat{\mathbf{Y}}[z_l^{(j)}(kr) P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)] \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l G_{l,m}^{\mathbf{N}} \mathbf{N}_{l,m}^{(j)}(k; r, \theta, \varphi).\end{aligned}\tag{A.20b}$$

Definiendo los armónicos esféricos vectoriales como [28]:

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_{l,m}^{(j)}(kr, \theta, \varphi) &= -\mathbf{r} \times \nabla[z_l^{(j)}(kr) P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)] \\ &= iz_l^{(j)}(kr) \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_{\theta} - z_l^{(j)}(kr) \frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_{\varphi},\end{aligned}\tag{A.21a}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{N}_{l,m}^{(j)}(kr, \theta, \varphi) &= -\frac{\nabla \times (\mathbf{r} \times \nabla)}{k} [z_l^{(j)}(kr) P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi)] \\ &= l(l+1) \frac{z_l^{(j)}(kr)}{kr} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_r + \frac{1}{kr} \frac{d}{dr} [rz_l^{(j)}(kr)] \frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_{\theta} \\ &\quad + i \frac{1}{kr} \frac{d}{dr} [rz_l^{(j)}(kr)] \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_{\varphi}.\end{aligned}\tag{A.21b}$$

En conclusión, si un campo vectorial  $\mathbf{G}$  cumple con la ecuación vectorial de Helmholtz (A.1), entonces puede ser escrito como una combinación lineal de los armónicos esféricos vectoriales  $\mathbf{N}_{l,m}$  y  $\mathbf{M}_{l,m}$  [28]:

Descomposición de Helmholtz en términos de los armónicos esféricos vectoriales

$$\nabla^2 \mathbf{G} + k^2 \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{G} = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (i G_{l,m}^{\mathbf{M}} \mathbf{M}_{l,m} + G_{l,m}^{\mathbf{N}} \mathbf{N}_{l,m}).\tag{A.22}$$

Las derivadas involucradas en las Ecs. (A.21) se pueden evitar haciendo uso de las relaciones de recurrencia para las derivadas de las funciones asociadas de Legendre y las funciones esféricas de Bessel [43]:

$$\frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos \theta) = \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) - (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta),\tag{A.23a}$$

$$\frac{1}{kr} \frac{d}{dr} [r j_l(kr)] = (l+1) \frac{j_l(kr)}{kr} - j_{l+1}(kr),\tag{A.23b}$$

que sustituyéndolas en las Ecs. (A.21), los armónicos esféricos vectoriales se reescriben como

## Armónicos esféricos vectoriales

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{l,m}^{(w)}(kr, \theta, \varphi) &= iz_l^{(w)}(kr) \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &\quad - z_l^{(w)}(kr) \left[ \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) - (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \right] \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_\varphi. \end{aligned} \quad (\text{A.24a})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_{l,m}^{(w)}(kr, \theta, \varphi) &= l(l+1) \frac{z_l^{(w)}(kr)}{kr} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_r \\ &\quad + \left[ (l+1) \frac{z_l^{(w)}(kr)}{kr} - z_{l+1}^{(w)}(kr) \right] \left[ \frac{(l-m+1)}{\sin \theta} P_{l+1}^m(\cos \theta) \right. \\ &\quad \left. - (l+1) \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \right] \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &\quad + i \left[ (l+1) \frac{z_l^{(w)}(kr)}{kr} - z_{l+1}^{(w)}(kr) \right] \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta) \exp(im\varphi) \hat{\mathbf{e}}_\varphi, \end{aligned} \quad (\text{A.24b})$$

Como el campo EM producido por el electrón cumple con la ecuación vectorial de Helmholtz, Ec. (A.1), se puede expandir en términos de los armónicos esféricos vectoriales tal como se indica en las Ecs. (1.13). Para calcular los coeficientes  $V_{l,m}$  y  $W_{l,m}$  que aparecen en las Ecs. (1.13), es necesario calcular la expansión multipolar del potencial escalar dado por las Ecs. de Maxwell en el dominio espectral:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}; \omega) = \tilde{\rho}_{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{Ley de Gauss eléctrica}) \quad (\text{A.25a})$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}; \omega) = 0, \quad (\text{Ley de Gauss magnética}) \quad (\text{A.25b})$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) - i\omega \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}; \omega) = \mathbf{0}, \quad (\text{Ley de Faraday-Lenz}) \quad (\text{A.25c})$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega) + i\omega \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}; \omega) = \tilde{\mathbf{J}}_{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega). \quad (\text{Ley de Ampère-Maxwell}) \quad (\text{A.25d})$$

De las Ecs. (A.25b) y (A.25c) se pueden definir los potenciales  $\tilde{\phi}(\mathbf{r}; \omega)$  y  $\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}; \omega)$ , tales que el campo electromagnético está dado por

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) = -\nabla \tilde{\phi}(\mathbf{r}; \omega) + i\omega \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{A.26a})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}; \omega) = \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}; \omega). \quad (\text{A.26b})$$

Considerando que el electrón se mueve en el vacío, se sustituyen las relaciones constitutivas

$$\tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{r}; \omega) = \epsilon_0 \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{A.27a})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}; \omega) = \mu_0 \tilde{\mathbf{H}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{A.27b})$$

las Ecs. (A.26) y la norma de Lorentz [30]

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}; \omega) - i \frac{\omega}{c^2} \tilde{\phi}(\mathbf{r}; \omega) = 0, \quad (\text{A.28})$$

en las Ecs. (A.25a) y (A.25d), obteniendo que los potenciales  $\tilde{\phi}$  y  $\tilde{\mathbf{A}}$  se relacionan con las fuentes externas como

$$\left[ \nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \tilde{\phi}(\mathbf{r}; \omega) = -\frac{\tilde{\rho}_{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega)}{\epsilon_0}, \quad (\text{A.29a})$$

$$\left[ \nabla^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right] \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}; \omega) = -\mu_0 \tilde{\mathbf{J}}_{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega). \quad (\text{A.29b})$$

Realizando una transformada de Fourier espacial de las Ecs. (A.29), bajo la convención

$$\tilde{g}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{k}}\{g(\mathbf{r})\} = \int_{-\infty}^{\infty} g(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3r, \quad (\text{A.30a})$$

$$g(\mathbf{r}) = \mathcal{F}_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{r}}^{-1}\{\tilde{g}(\mathbf{k})\} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{g}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3k, \quad (\text{A.30b})$$

se obtiene que las expresiones para los potenciales en el espacio  $(\mathbf{k}; \omega)$  son

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k}; \omega) = \frac{\tilde{\rho}_{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega)}{\epsilon_0 \left( -k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right)}, \quad (\text{A.31a})$$

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{k}; \omega) = \frac{\mu_0 \tilde{\mathbf{J}}_{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega)}{-k^2 + \frac{\omega^2}{c^2}}. \quad (\text{A.31b})$$

En el caso particular del electrón moviéndose a velocidad constante  $\mathbf{v} = \beta c \hat{\mathbf{e}}_z$ , las fuentes externas de carga y corriente están dadas en términos de la carga  $q = -e$  del electrón como

$$\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) = -e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t), \quad (\text{A.32a})$$

$$\mathbf{J}_{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) = \rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}; t)\mathbf{v}, \quad (\text{A.32b})$$

donde  $\mathbf{r}_t = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}t$  es la posición del electrón al tiempo  $t$  y  $\mathbf{r}_0 = (b, 0, 0)$  su posición en  $t = 0$ , el punto más cercano a la NP. Calculando la transformada de Fourier espacial y temporal de las Ecs. (A.32), y sustituyendo el resultado en las Ecs. (A.31), se obtiene que los potenciales que permiten calcular el campo EM producido por electrón son

$$\tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega) = \frac{-e\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t)}{\epsilon_0 \left( -k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right)}, \quad (\text{A.33a})$$

$$\tilde{\mathbf{A}}^{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega) = \frac{\mu_0 \tilde{\rho}_{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega)\mathbf{v}}{-k + \frac{\omega^2}{c^2}} = \frac{\tilde{\rho}_{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega)\mathbf{v}}{\epsilon_0 c^2 \left( -k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right)} = \frac{\mathbf{v}}{c^2} \tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{k}; \omega). \quad (\text{A.33b})$$

Calculando la transformada de Fourier inversa espacial de los potenciales dados por las Ecs. (A.33), se obtiene

$$\tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -\frac{2e}{4\pi\epsilon_0\beta c} \exp\left(i\frac{\omega z}{\beta c}\right) K_0\left(\frac{|\omega|R}{\beta\gamma c}\right), \quad (\text{A.34a})$$

$$\tilde{\mathbf{A}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \frac{\mathbf{v}}{c^2} \tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{A.34b})$$

donde  $K_0(\alpha)$  es una función de Bessel modificada del segundo tipo [43]. Sustituyendo las Ecs. (A.34) en las Ecs. (A.26), las expresiones para el campo EM producido por el electrón en términos del potencial escalar  $\tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega)$  son

$$\tilde{\mathbf{E}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \left( -\nabla + i\omega \frac{\mathbf{v}}{c^2} \right) \tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{A.35a})$$

$$\tilde{\mathbf{B}}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = \nabla \times \left[ \frac{\mathbf{v}}{c^2} \tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) \right] = \nabla \tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) \times \frac{\mathbf{v}}{c^2}. \quad (\text{A.35b})$$

Para escribir la expansión multipolar del potencial escalar  $\tilde{\phi}^{\text{ext}}$  se resuelve la ecuación escalar de Helmholtz (A.1) (ecuación que cumple el potencial escalar  $\tilde{\phi}^{\text{ext}}$ ) mediante el método de la función de Green [29], obteniendo la expresión

$$\tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -\frac{e}{\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_t) \exp(i\omega t) dt, \quad (\text{A.36})$$

donde  $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_t)$  es la función de Green de la ecuación de Helmholtz y su expansión dada por el teorema de adición [29] es

$$G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_t) = \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_t|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_t|} = k \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l j_l(kr_{<}) h_l^{(+)}(kr_{>}) Y_l^{m*}(\theta_t, \varphi_t) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (\text{A.37})$$

donde

$$r_{<} = \begin{cases} r_t & \text{si } r_t < r \\ r & \text{si } r < r_t \end{cases} \quad \text{y} \quad r_{>} = \begin{cases} r_t & \text{si } r_t > r \\ r & \text{si } r > r_t \end{cases}. \quad (\text{A.38})$$

Considerando  $r_t > r$  y sustituyendo la Ec. (A.37) en la Ec. (A.36), se obtiene la expresión

$$\tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -\frac{ek}{\epsilon_0} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi) \int_{-\infty}^{\infty} h_l^{(+)}(kr_t) Y_l^{m*}(\theta_t, \varphi_t) \exp(i\omega t) dt. \quad (\text{A.39})$$

Para resolver la integral de la Ec. (A.39), se iguala la expresión de  $\tilde{\phi}^{\text{ext}}$  a la dada por la ecuación (A.34a). Posteriormente, realizando varios pasos algebraicos y considerando las relaciones entre las funciones modificadas de Bessel  $K_\nu(\alpha)$  y  $I_\nu(\alpha)$  [44], así como la expansión en serie de Taylor de la función modificada de Bessel de primera especie  $I_\nu(\alpha)$  y de la función exponencial [36], se obtiene que la expansión multipolar del potencial escalar presente en las Ecs. (A.35) es

$$\tilde{\phi}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; \omega) = -\frac{ek}{\epsilon_0 \omega} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^l A_{l,m}^{(+)} K_m \left( \frac{|\omega|b}{\beta\gamma c} \right) j_l(kr) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (\text{A.40})$$

donde

$$A_{l,m}^{(+)} = \frac{f_{l,m}(2l+1)!!}{\beta^{l+1}} \sum_{j=m}^l \frac{i^{l-j}}{(l-j)! \left(\frac{j-m}{2}\right)! \left(\frac{j+m}{2}\right)! (2\gamma)^j} \mathcal{J}_{j,l-j}^{l,m}, \quad (\text{A.41a})$$

y los números  $\mathcal{J}_{j,l-j}^{l,m}$  se calculan mediante la relación de recurrencia

$$(l-m)\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{l,m} = (2l-1)\mathcal{J}_{i_1,i_2+1}^{l-1,m} - (l+m-1)\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{l-2,m}, \quad (\text{A.41b})$$

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

$$\mathcal{J}_{i_1,i_2}^{m,m} = \begin{cases} (-1)^m (2m-1)!! B\left(\frac{i_1+m+2}{2}, \frac{i_2+1}{2}\right), & \text{si } i_2 \text{ es par} \\ 0, & \text{si } i_2 \text{ es impar} \end{cases}, \quad (\text{A.41c})$$

donde  $B(\mu, \nu)$  es la función beta o también llamada integral de Euler de primer orden [36].

Una vez sustituida la Ec. (A.40) en la ecuación (A.35a) y utilizando las Ecs. (1.22a) y (1.22b), se calculan los coeficientes  $V_{l,m}$  y  $W_{l,m}$  presentes en las Ecs. (1.13). Por medio de los coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$ , análogos a los coeficientes de Mie [28], se propone la solución para el campo esparcido e interno. Imponiendo las condiciones de contorno, Ecs. (1.29), y sustituyendo los armónicos esféricos vectoriales dados por las Ecs. (A.21), se obtienen expresiones que necesitan de las relaciones de ortogonalidad entre las funciones asociadas de Legendre y sus derivadas para obtener el sistema de ecuaciones dado por las Ecs. (1.34), que permite calcular  $t_l^E$  y  $t_l^M$  [45].

La solución a la Ec. (A.13c) son las funciones asociadas de Legendre, que para el presente trabajo son definidas como [36]

$$P_l^m(\mu) = (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu) \quad \text{con} \quad P_l(\mu) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\mu^l} (\mu^2 - 1)^l, \quad (\text{A.42})$$

donde  $\mu = \cos \theta$  y  $P_l(\mu)$  es el polinomio de Legendre de orden  $l$ . Así, las funciones asociadas de Legendre cumplen con la relación de ortogonalidad

$$\int_{-1}^1 P_l^m(\mu) P_{l'}^m(\mu) d\mu = \frac{2\delta_{l,l'}}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (\text{A.43})$$

---

Al definir las funciones angulares

$$\pi_l^m(\cos \theta) = \frac{m}{\sin \theta} P_l^m(\cos \theta), \quad (\text{A.44a})$$

$$\tau_l^m(\cos \theta) = \frac{d}{d\theta} P_l^m(\cos \theta), \quad (\text{A.44b})$$

resulta que no son ortogonales, pero  $\pi_l(\mu) \pm \tau_l(\mu)$  sí lo es consigo misma. Para probar la ortogonalidad de  $\pi_l^m \pm \tau_l^m$  se parte de aplicar la Ec. (A.13c) a  $P_l^m$  y multiplicando el resultado por  $P_{l'}^m$ ; repitiendo el procedimiento invirtiendo  $l$  por  $l'$  y sumando las ecuaciones resultantes se obtiene que

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta P_{l'}^m(\cos \theta) \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} + \sin \theta P_l^m(\cos \theta) \frac{dP_{l'}^m(\cos \theta)}{d\theta} \right) + [l(l+1) \\ & + l'(l'+1)] P_{l'}^m(\cos \theta) P_l^m(\cos \theta) \sin \theta = 2 \left( \frac{m P_l^m(\cos \theta)}{\sin \theta} \frac{m P_{l'}^m(\cos \theta)}{\sin \theta} + \frac{dP_l^m(\cos \theta)}{d\theta} \frac{dP_{l'}^m(\cos \theta)}{d\theta} \right) \sin \theta, \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

donde se sumó el término  $2 dP_l^m/d\theta dP_{l'}^m/d\theta$  en ambos lados de la ecuación para completar las derivadas. Integrando la Ec. (A.45) en el intervalo  $\theta \in (0, \pi)$ , o  $\mu \in (-1, 1)$ , y usando las Ecs. (A.42) y (A.43), se obtiene que

$$\int_{-1}^1 [\pi_l^m(\mu) \pi_{l'}^m(\mu) + \tau_l^m(\mu) \tau_{l'}^m(\mu)] d\mu = \delta_{l,l'} \frac{2l(l+1)}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (\text{A.46})$$

Adicionalmente

$$\int_{-1}^1 \pi_l^m(\mu) \tau_{l'}^m(\mu) d\mu = \int_0^\pi m P_l^m(\cos \theta) \frac{dP_{l'}^m(\cos \theta)}{d\theta} d\theta = - \int_{-1}^1 \pi_{l'}^m(\mu) \tau_l^m(\mu) d\mu, \quad (\text{A.47})$$

donde la Ec. (A.42) fue usada en una integración por partes. De este modo, combinando las Ecs. (A.46) y (A.47), se concluye que

$$\int_{-1}^1 [\pi_l^m(\cos \theta) \pm \tau_l^m(\mu)] [\pi_{l'}^m(\cos \theta) \pm \tau_{l'}^m(\mu)] d\mu = \delta_{l,l'} \frac{2l(l+1)}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (\text{A.48})$$

## Simetrías del vector de Poynting externo y esparcido

Para calcular el vector de Poynting asociado al campo EM producido por el electrón, Ecs. (1.7), se emplea la Ec. (2.1b), resultando

$$\mathbf{S}^{\text{ext}}(\mathbf{r}; t) = \left( \frac{q^2 \gamma^2 \beta c}{16\pi^2 \epsilon_0} \right) \left\{ \frac{-(x-b)(z-\beta ct)\hat{\mathbf{e}}_x - y(z-\beta ct)\hat{\mathbf{e}}_y + R^2 \hat{\mathbf{e}}_z}{[R^2 + \gamma^2(z-\beta ct)^2]^3} \right\}. \quad (\text{B.1})$$

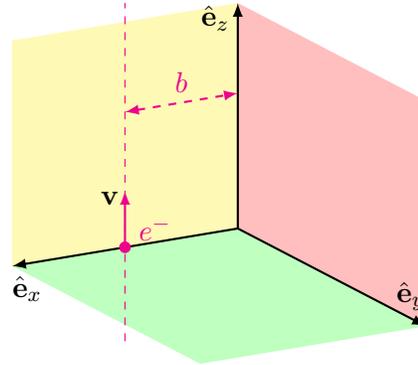
Dado que el movimiento del electrón se considera como rectilíneo uniforme (Fig. B.1), es natural que presente simetrías en las expresiones del campo EM que produce. Tal es el caso de la simetría que presenta respecto al eje definido por la trayectoria del electrón. Reemplazando en la Ec. (B.1),  $x \rightarrow -x + 2b$  y  $y \rightarrow -y$  se obtiene que

$$S_x^{\text{ext}}(-x + 2b, -y, z; t) = -S_x^{\text{ext}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.2a})$$

$$S_y^{\text{ext}}(-x + 2b, -y, z; t) = -S_y^{\text{ext}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.2b})$$

$$S_z^{\text{ext}}(-x + 2b, -y, z; t) = S_z^{\text{ext}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.2c})$$

lo que significa que la distribución del vector de Poynting tiene simetría azimutal para cualquier valor de  $z$  en todo instante de tiempo  $t$ . Basta con analizar un corte longitudinal, respecto a la dirección de movimiento, de la distribución de  $\mathbf{S}^{\text{ext}}$  para conocer su comportamiento general.



**Fig. B.1:** Un electrón (punto magenta) viaja en dirección  $z$  cortando al eje  $x$  a una distancia  $b$  del origen. Se muestran los planos  $x = 0$ ,  $y = 0$  y  $z = 0$  en color rojo, amarillo y verde, respectivamente.

Por otra parte, remplazando  $z \rightarrow z + \beta ct$  en la Ec. (B.1), se obtiene que

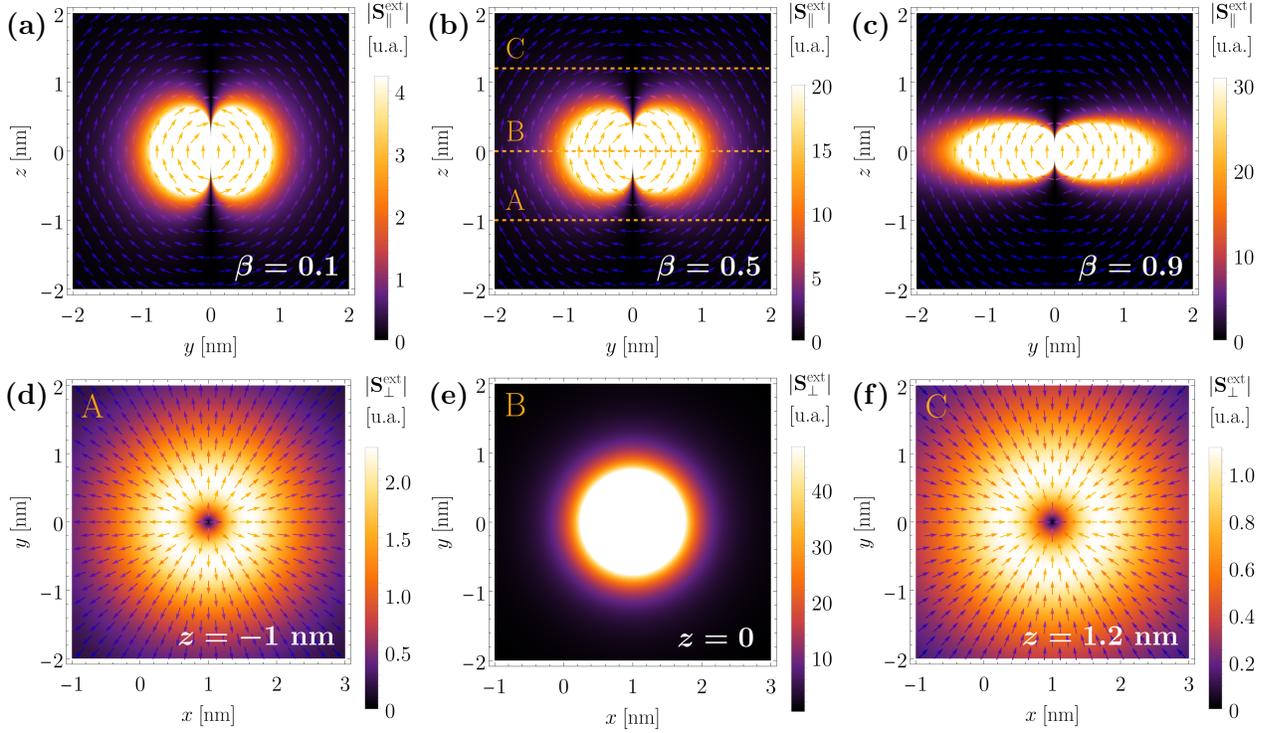
$$\mathbf{S}^{\text{ext}}(x, y, z + \beta ct; t) = \mathbf{S}^{\text{ext}}(x, y, z; 0), \quad (\text{B.3})$$

representado así una simetría de traslación en la dirección  $z$  del vector de Poynting asociado al campo EM producido por el electrón. Evaluando en  $t = 0$  la Ec. (B.1), basta para conocer el comportamiento del campo en general, pues sólo se traslada en la dirección  $z$  a medida que el tiempo transcurre.

Dadas la simetría azimutal respecto al eje que define la trayectoria del electrón y la simetría traslacional en la dirección  $z$  en el tiempo, se evalúa la Ec. (B.1) en  $(b, y, z; 0)$  para analizar el comportamiento longitudinal del vector de Poynting asociado al campo EM producido por el electrón, resultando

$$\mathbf{S}^{\text{ext}}(b, y, z; 0) = \left( \frac{q^2 \gamma^2 \beta c}{16\pi^2 \epsilon_0} \right) \left[ \frac{-yz \hat{\mathbf{e}}_y + y^2 \hat{\mathbf{e}}_z}{(y^2 + \gamma^2 z^2)^3} \right], \quad (\text{B.4})$$

donde la ausencia de componente  $x$  implica que no hay componente transversal al corte realizado en  $x = b$ . En la Fig. B.2 se presentan tres cortes longitudinales, correspondientes a tres diferentes valores de  $\beta$ , para la distribución del vector de Poynting asociado al campo EM producido por el electrón en la parte superior y tres cortes transversales en la parte inferior, correspondientes a los cortes A, B y C indicados en la Fig. B.2b). Por una parte, el efecto que produce el aumentar el valor de la rapidez relativa  $\beta$  del electrón en la distribución del vector de Poynting es que presenta una contracción de Lorentz, aplanando los lóbulos de alta intensidad hacia el plano transversal a la dirección en que se mueve el electrón. Analizando los cortes transversales, se observa que las líneas de campo nacen del eje descrito por la trayectoria del electrón, específicamente por donde ha pasado, mientras que se cierran en la misma línea pero hacia donde estará el electrón. La ausencia de líneas de campo en la Fig. e) se debe a que no tiene componentes transversales, sólo existe componente longitudinal al sustituir  $z = 0$  en la Ec. (B.4).



**Fig. B.2:** Magnitud y líneas de campo del vector de Poynting asociado al campo EM producido por el electrón considerando un parámetro de impacto  $b = 1$  nm. Los cortes longitudinales en  $x = b$  corresponden a valores de la velocidad relativa a)  $\beta = 0.1$ , b)  $\beta = 0.5$  y c)  $\beta = 0.9$ . En la Fig. b), se muestran tres cortes transversales con las etiquetas A, B y C correspondientes a d)  $z = -1$  nm, e)  $z = 0$  y f)  $z = 1.2$  nm.

Dadas las simetrías presentes en el vector de Poynting asociado al campo EM producido por el electrón, es natural preguntarse si también existen simetrías en el vector de Poynting asociado al campo EM esparcido por la NP, con el objetivo de optimizar el tiempo de cómputo al realizar la IFFT de las Ecs. (1.38) y (1.39), así como analizar las implicaciones físicas como la anulación de componentes.

Si bien las expresiones del campo EM esparcido por la NP están dadas en el dominio espectral, de la definición de la transformada de Fourier temporal, Ec. (1.8), se puede afirmar que las simetrías espaciales que presenten las Ecs. (1.38) y (1.39), se preservarán en sus expresiones en el dominio temporal.

Por la configuración del problema planteado en la Fig. 1.1, que se considera tanto al electrón viajando en línea recta como a la NP esférica, se espera que exista una simetría respecto al plano  $y = 0$  que contiene un corte transversal de la NP así como a la trayectoria del electrón. La simetría se presenta al remplazar la coordenada esférica  $\varphi \rightarrow -\varphi$ . Considerando que la dependencia en la variable  $\varphi$  aparece en la funciones trigonométricas sin y cos, cuya paridad es

$$\cos(-\varphi) = \cos \varphi, \quad (\text{B.5a})$$

$$\sin(-\varphi) = -\sin \varphi, \quad (\text{B.5b})$$

las componentes del campo eléctrico esparcido correspondientes al término dipolar, Ecs. (1.38), se ven modificadas como

$$\tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp}}(r, \theta, -\varphi; \omega) = \tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; \omega), \quad (\text{B.6a})$$

$$\tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(r, \theta, -\varphi; \omega) = \tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; \omega), \quad (\text{B.6b})$$

$$\tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(r, \theta, -\varphi; \omega) = -\tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; \omega), \quad (\text{B.6c})$$

mientras que las componentes del campo H dadas por las Ecs. (1.39) cambia a

$$\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp}}(r, \theta, -\varphi; \omega) = -\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; \omega), \quad (\text{B.7a})$$

$$\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(r, \theta, -\varphi; \omega) = -\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; \omega), \quad (\text{B.7b})$$

$$\tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(r, \theta, -\varphi; \omega) = \tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(r, \theta, \varphi; \omega). \quad (\text{B.7c})$$

Realizando un cambio de coordenadas por medio de una matriz de cambio de base [30], las simetrías mostradas en coordenadas esféricas en las Ecs. (B.6) y (B.7) son equivalentes a remplazar la coordenada  $y \rightarrow -y$  en el caso cartesiano. Así, la inversión de coordenadas respecto al plano  $y = 0$  modifica las componentes cartesianas del campo eléctrico como

$$\tilde{E}_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, -y, z; \omega) = \tilde{E}_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, y, z; \omega), \quad (\text{B.8a})$$

$$\tilde{E}_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, -y, z; \omega) = -\tilde{E}_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, y, z; \omega), \quad (\text{B.8b})$$

$$\tilde{E}_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, -y, z; \omega) = \tilde{E}_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, y, z; \omega), \quad (\text{B.8c})$$

mientras que la sustitución  $y \rightarrow -y$  modifica las componentes cartesianas del campo H como

$$\tilde{H}_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, -y, z; \omega) = -\tilde{H}_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, y, z; \omega), \quad (\text{B.9a})$$

$$\tilde{H}_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, -y, z; \omega) = \tilde{H}_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, y, z; \omega), \quad (\text{B.9b})$$

$$\tilde{H}_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, -y, z; \omega) = -\tilde{H}_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, y, z; \omega). \quad (\text{B.9c})$$

Por la definición de la transformada de Fourier inversa temporal, las simetrías del término dipolar del campo eléctrico mostradas en las Ecs. (B.8) se preservan en el dominio temporal como

$$E_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = E_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.10a})$$

$$E_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = -E_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.10b})$$

$$E_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = E_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.10c})$$

mientras que las simetrías para el término dipolar del campo H dadas por las Ecs. (B.9) resultan en el dominio temporal

$$H_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = -H_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.11a})$$

$$H_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = H_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.11b})$$

$$H_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = -H_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, y, z; t). \quad (\text{B.11c})$$

Sustituyendo las Ecs. (B.10) y (B.11) en la Ec. (2.2), se obtiene que el vector de Poynting asociado al término dipolar del campo EM esparcido presenta las siguientes simetrías

$$S_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = S_{l=1,x}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.12a})$$

$$S_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = -S_{l=1,y}^{\text{esp}}(x, y, z; t), \quad (\text{B.12b})$$

$$S_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, -y, z; t) = S_{l=1,z}^{\text{esp}}(x, y, z; t). \quad (\text{B.12c})$$

De manera que, considerando las Ecs. (B.12) para calcular el vector de Poynting resultante por medio de la Ec. (2.28), se obtiene que

Vector de Poynting resultante asociado al término dipolar del campo EM esparcido

$$\mathfrak{S}_{l=1}^{\text{esp}}(\varrho; t) = \mathfrak{S}_{l=1,x}^{\text{esp}}(\varrho; t)\hat{\mathbf{e}}_x + \mathfrak{S}_{l=1,z}^{\text{esp}}(\varrho; t)\hat{\mathbf{e}}_z \Rightarrow \mathbf{F}_{l=1}^{\text{ret}}(t) = F_{l=1,\perp}^{\text{ret}}(t)\hat{\mathbf{e}}_x + F_{l=1,\parallel}^{\text{ret}}(t)\hat{\mathbf{e}}_z, \quad (\text{B.13})$$

lo que significa que sólo aparecerá la componente  $z$  (longitudinal) y la componente  $x$  (transversal) en la fuerza de retroceso, es decir, no hay momento total radiado en la dirección  $y$ .

Otra simetría que se busca en el sistema es la de inversión respecto al origen. Sustituyendo  $\theta \rightarrow \pi - \theta$  y  $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$  en la Ec. (1.38), se tiene que las componentes del campo eléctrico se modifica como

$$\tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp}}(-\mathbf{r}; \omega) = \tilde{E}_{l=1,r}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{B.14a})$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(-\mathbf{r}; \omega) = & \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3k}{c\gamma\beta^2} \left\{ -it_1^{\text{M}}\beta \cos\varphi h_1^{(+)}(kr) K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) + t_1^{\text{E}} \left[ \cos\theta \cos\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{i}{\gamma} \sin\theta K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \right] \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.14b})$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(-\mathbf{r}; \omega) = & - \left( \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{3k}{c\gamma\beta^2} \sin\varphi K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \left\{ -t_1^{\text{E}} \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \right. \\ & \left. + it_1^{\text{M}}\beta \cos\theta h_1^{(+)}(kr) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.14c})$$

mientras que, la inversión de coordenadas respecto al origen en la Ec. (1.39), modifica las componentes del campo H como

$$\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp}}(-\mathbf{r}; \omega) = -\tilde{H}_{l=1,r}^{\text{esp}}(\mathbf{r}; \omega), \quad (\text{B.15a})$$

$$\tilde{H}_{l=1,\theta}^{\text{esp}}(-\mathbf{r}; \omega) = \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{3k}{\gamma\beta^2} K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \sin\varphi \left\{ -it_1^{\text{E}} h_1^{(+)}(kr) + \beta t_1^{\text{M}} \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \cos\theta \right\}, \quad (\text{B.15b})$$

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{l=1,\varphi}^{\text{esp}}(-\mathbf{r}; \omega) = & \left( \frac{e}{4\pi} \right) \frac{3k}{\gamma\beta^2} \left\{ t_1^{\text{E}} h_1^{(+)}(kr) \left[ iK_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \cos\theta \cos\varphi + \frac{1}{\gamma} K_0 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \sin\theta \right] \right. \\ & \left. - \beta t_1^{\text{M}} K_1 \left( \frac{\omega b}{\beta\gamma c} \right) \left[ 2 \frac{h_1^{(+)}(kr)}{kr} - h_2^{(+)}(kr) \right] \cos\varphi \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.15c})$$

donde los términos en verde corresponden a los términos que cambian de signo al realizar la sustitución de coordenadas. De las Ecs. (B.14) y (B.15) se observa que no existen simetrías para las componentes  $\theta$  y  $\varphi$  del

término dipolar del campo EM esparcido. Sin embargo, esto cambia al realizar la aproximación de partícula pequeña para los coeficientes  $t_l^E$  y  $t_l^M$  [28], donde

$$t_l^E \sim x^3, \quad (\text{B.16a})$$

$$t_l^M \sim 0, \quad (\text{B.16b})$$

por lo cual se omitiría la respuesta magnética de la NP, pues directamente se eliminan los términos que contienen el factor  $t_l^M$ . Al sustituir las aproximaciones a tercer orden dadas por las Ecs. (3.1) en las Ecs. (B.14) y (B.15), se obtiene que las Ecs. (3.2) correspondientes al término dipolar del campo EM en aproximación de partícula pequeña presentan las simetrías

$$\tilde{\mathbf{E}}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(-\mathbf{r}; t) = \tilde{\mathbf{E}}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; t), \quad (\text{B.17})$$

$$\tilde{\mathbf{H}}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(-\mathbf{r}; t) = -\tilde{\mathbf{H}}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; t), \quad (\text{B.18})$$

de modo que, preservando esta simetría en el dominio temporal y calculando el vector de Poynting asociado al campo EM esparcido bajo la aproximación de partícula pequeña, se obtiene que

$$\mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(-\mathbf{r}; t) = -\mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(\mathbf{r}; t), \quad (\text{B.19})$$

y al calcular el vector de Poynting resultante por medio de la Ec. (2.28), el resultado es

Vector de Poynting resultante asociado al término dipolar del campo EM esparcido en aproximación de partícula pequeña

$$\mathbf{S}_{l=1}^{\text{esp,a.p.p.}}(\varrho; t) = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{F}_{l=1}^{\text{ret,a.p.p.}}(t) = \mathbf{0}, \quad (\text{B.20})$$

que directamente se asocia con la ausencia de fuerza de retroceso debida al momento radiado por campo EM esparcido.

## Transformada rápida de Fourier

Al calcular la transformada de Fourier de una función  $f(t)$  es posible obtener una integral cuya solución no pueda expresarse de manera analítica, de manera que resulta conveniente abordar el problema con métodos numéricos. En el presente trabajo se emplea la *transformada rápida de Fourier inversa* (IFFT por sus siglas en inglés *Inverse Fast Fourier Transform*) para el cálculo numérico de las integrales que resultan tanto al realizar la transformada de Fourier inversa del término dipolar del campo EM esparcido por la nanopartícula (NP) como las que se obtienen al simplificar la fuerza de retroceso en términos de las funciones espectrales auxiliares. Para dar un esquema general de la transformada rápida de Fourier (FFT por sus siglas en inglés *Fast Fourier Transform*) resulta conveniente empezar con la transformada de Fourier continua (o analítica). La definición y convención de transformada de Fourier temporal y su transformada inversa están dadas por las Ecs. (1.8):

$$\begin{aligned}\tilde{f}(\omega) &= \mathcal{F}_{t \rightarrow \omega}\{f(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(i\omega t) dt, \\ f(t) &= \mathcal{F}_{\omega \rightarrow t}^{-1}\{\tilde{f}(\omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega,\end{aligned}$$

las cuales son transformaciones que permiten expresar una señal (función) dada en el dominio temporal (en función del tiempo  $t$ ) en términos de una función en el dominio espectral (en función de la frecuencia angular  $\omega$ ) [46]. Por la definición de integral de Riemannm [36], una integral se puede expresar como el límite de una suma (o serie, en este caso). En el caso de la transformada de Fourier, se expresa como

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(t) \exp(i\omega t) dt = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{r=-\infty}^{\infty} f(t_0 + r\Delta t) \exp[i\omega(t_0 + r\Delta t)] \Delta t, \quad (\text{C.1})$$

o bien, suponiendo que  $f(t) = 0$  fuera de un intervalo  $t \in \{0, T\}$  y trasladando la función a  $t_0 = 0$ <sup>1</sup>, se puede reescribir (C.1) de la siguiente manera:

$$\int_0^T f(t) \exp(i\omega t) dt = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{r=0}^{N-1} f(t_r) \exp[i\omega t_r] \Delta t, \quad (\text{C.2})$$

donde  $t_r = r\Delta t$  y  $t_{N-1} = T$ . Numéricamente, considerar  $\Delta t$  suficientemente pequeña permite aproximar la función  $\tilde{f}(\omega)$  dada por la definición de transformada de Fourier, siendo así

$$\tilde{f}(\omega) \approx \sum_{r=0}^{N-1} f(t_r) \exp(i\omega t_r) \Delta t. \quad (\text{C.3})$$

<sup>1</sup>Trasladar la función a  $t_0 = 0$  no afecta al comportamiento de la función pues el factor  $\exp(i\omega t_0)$  sólo desplaza  $t_0$  el argumento de la transformada de Fourier tal como se muestra en la Ec. (3.13).

Considerando un mado en el dominio espectral  $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_N\}$ , los valores numéricos  $\{v_1, v_2, \dots, v_N\}$  dados por la *transformada discreta de Fourier* (DFT por sus siglas en inglés *Discret Fourier Transform*) están dados por la expresión

$$v_s = \tilde{f}(\omega_s) = \sum_{r=0}^{N-1} f(t_r) \exp(i\omega_s t_r) \Delta t = \sum_{r=0}^{N-1} f(t_r) \exp[i(s\Delta\omega)(r\Delta t)] \Delta t, \quad (\text{C.4})$$

donde a su vez, considerando el conjunto de  $N$  datos  $\{t_0, t_2, \dots, t_{N-1}\}$  para  $f(t)$ , se define la *transformada discreta de Fourier inversa* (IDFT por sus siglas en inglés *Inverse Discret Fourier Transform*) como

$$u_r = f(t_r) = \frac{1}{2\pi} \sum_{s=0}^{N-1} \tilde{f}(\omega_s) \exp(-i\omega_s t_r) \Delta\omega = \frac{1}{2\pi} \sum_{s=0}^{N-1} \tilde{f}(\omega_s) \exp[-i(s\Delta\omega)(r\Delta t)] \Delta\omega. \quad (\text{C.5})$$

Para calcular la transformada de Fourier en forma de una suma finita, Ec. (C.2), en vez de una transformada de Fourier dada por una serie, Ec. (C.1), se asume que la función se anula fuera de un intervalo  $\{0, T\}$ . Para garantizar lo anterior, se hace uso del teorema de Parseval-Plancherel [46]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{f}(\omega)|^2 d\omega, \quad (\text{C.6})$$

lo que permite delimitar el intervalo en el cual la función  $\tilde{f}(\omega)$  no se anula al ser cuadrado integrable [46]. A su vez, se considera el principio de incertidumbre que relaciona  $\Delta t$  en el tiempo con  $\Delta\omega$  en la frecuencia angular, siendo

$$\Delta t \Delta\omega = \frac{2\pi}{N}, \quad (\text{C.7})$$

donde

$$\Delta t = \frac{t_{N-1}}{N}, \quad \Delta\omega = \frac{2\pi}{t_{N-1}}. \quad (\text{C.8})$$

Numéricamente, si  $\Delta t \gg \Delta\omega$ , el comportamiento de la función en el dominio espectral será dada para frecuencias más cercanas entre sí, del mismo modo que si  $\Delta\omega \gg \Delta t$ , el comportamiento de la función en el tiempo será dado en instantes cada vez más próximos entre sí. Es importante considerar la relación entre estas dos cantidades para no perder información en el dominio deseado. La recolección de datos para generar las gráficas que representan a la función de manera discreta es importante, pues se necesitan más datos para definir secciones de la transformada de Fourier donde el paso  $\Delta\omega$  sea más grande que el ancho de un máximo o un mínimo, tal como lo menciona el teorema de Nyquist<sup>2</sup>. Así, se considera el teorema de Nyquist definiendo el paso  $\Delta\omega$  suficientemente pequeño analizando las gráficas en el dominio espectral para definir los máximos y mínimos de manera clara. Sustituyendo la Ec. (C.7) en las Ecs. (C.4) y (C.5) se obtienen los conjuntos de datos dados por la transformada discreta de Fourier y su inversa, que son de la forma

$$\{v_s\} = \text{DFT}\{u_r\} \quad \text{donde} \quad v_s = \Delta t \sum_{r=1}^N u_r \exp\left(2\pi i \frac{rs}{N}\right), \quad (\text{C.9a})$$

$$\{u_r\} = \text{IDFT}\{v_s\} \quad \text{donde} \quad u_r = \frac{\Delta\omega}{2\pi} \sum_{s=1}^N v_s \exp\left(-2\pi i \frac{rs}{N}\right). \quad (\text{C.9b})$$

De las Ecs. (C.9) se observa que el cálculo de los  $N$  valores dados por la  $\text{DFT}\{v_s\}$  necesita  $N$  operaciones elementales<sup>3</sup> para cada uno de los valores  $v_s$ , de manera que son necesarias  $N^2$  operaciones elementales para obtener todo el conjunto de datos  $\{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ . La transformada rápida de Fourier es un algoritmo que elige

---

<sup>2</sup>Aunque el teorema de Nyquist formalmente sugiere el dividir los intervalos de recolección con diferentes  $\Delta t$ , por simplicidad del presente trabajo se escogió un valor para  $\Delta t$  uniforme debido al comportamiento de las funciones tratadas, así como el hecho de que el tiempo de cálculo no es tan demandante.

<sup>3</sup>Se define como *operación elemental*, en el contexto de transformada discreta de Fourier, a la multiplicación de dos números complejos en adición con otro número complejo [46].

de manera estratégica el número de datos en el dominio  $\{t_1, t_2, \dots, t_N\}$ , minimizando el número de operaciones elementales, optimizando el tiempo de cómputo de la DFT.

La ventaja del método FFT se deriva de la siguiente afirmación: La DFT de un conjunto de  $N = N_1 N_2$  datos, donde  $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$ , necesita sólo  $N(N_1 + N_2)$  operaciones elementales para calcularse [46].

Demostración: Sean  $r, s = 0, 1, 2, \dots, N - 1$  tales que

$$r = r_1 N_1 + r_2, \quad (\text{C.10a})$$

$$s = s_1 N_2 + s_2, \quad (\text{C.10b})$$

donde si  $r_1 = 0, 1, 2, \dots, N_2 - 1$  entonces  $r_2 = 0, 1, 2, \dots, N_1 - 1$  y, análogamente, si  $s_2 = 0, 1, 2, \dots, N_2 - 1$  entonces  $s_1 = 0, 1, 2, \dots, N_1 - 1$ . De modo que, sustituyendo las Ecs. (C.10) en la siguiente expresión, se obtiene

$$\exp\left(2\pi i \frac{rs}{N}\right) = \exp\left[2\pi i \frac{(r_1 N_1 + r_2)(s_1 N_2 + s_2)}{N_1 N_2}\right] \quad (\text{C.11a})$$

$$= \exp\left[2\pi i \left(r_1 + \frac{r_2}{N_1}\right) \left(s_1 + \frac{s_2}{N_2}\right)\right] \quad (\text{C.11b})$$

$$= \exp(2\pi i r_1 s_1) \exp\left[2\pi i \left(r_1 \frac{s_2}{N_2} + s_1 \frac{r_2}{N_1} + \frac{r_2 s_2}{N}\right)\right], \text{ donde } r_1, s_1 \in \mathbb{N} \quad (\text{C.11c})$$

$$= \exp\left[2\pi i \left(r_1 \frac{s_2}{N_2} + s_1 \frac{r_2}{N_1} + \frac{r_2 s_2}{N}\right)\right], \quad (\text{C.11d})$$

sustituyendo el resultado de la Ec. (C.11) en la Ec. (C.9) para calcular el valor de  $u_r$ :

$$\begin{aligned} v_s &= \sum_{r=0}^{N-1} u_r \exp\left[2\pi i \left(r_1 \frac{s_2}{N_2} + s_1 \frac{r_2}{N_1} + \frac{r_2 s_2}{N}\right)\right] \Delta t \\ &= \Delta t \sum_{r=0}^{N-1} u_{r_1 N_1 + r_2} \exp\left(2\pi i r_1 \frac{s_2}{N_2}\right) \exp\left[2\pi i \left(s_1 \frac{r_2}{N_1} + \frac{r_2 s_2}{N}\right)\right], \end{aligned}$$

donde  $r_1 = 0, 1, \dots, N_2 - 1$  y  $r_2 = 0, 1, \dots, N_1 - 1$ , de modo que

$$v_s = \Delta t \sum_{r_2=0}^{N_1-1} \exp\left[2\pi i \left(s_1 \frac{r_2}{N_1} + \frac{r_2 s_2}{N}\right)\right] \sum_{r_1=0}^{N_2-1} u_{r_1 N_1 + r_2} \exp\left(2\pi i r_1 \frac{s_2}{N_2}\right) \quad (\text{C.12a})$$

$$= \Delta t \sum_{r_2=0}^{N_1-1} \exp\left[2\pi i \left(s_1 \frac{r_2}{N_1} + \frac{r_2 s_2}{N}\right)\right] C(r_2, s_2), \quad (\text{C.12b})$$

donde se define

$$C(r_2, s_2) = \sum_{r_1=0}^{N_2-1} u_{r_1 N_1 + r_2} \exp\left(2\pi i r_1 \frac{s_2}{N_2}\right). \quad (\text{C.13})$$

De la Ec. (C.13) se observa que  $C(r_2, s_2)$  está presente  $N_1$  veces para cada valor de  $s$  posible. Es decir,

$$s = \underbrace{\underbrace{s_2}_{s_1=0}, \underbrace{N_2 + s_2}_{s_1=1}, \underbrace{2N_2 + s_2}_{s_1=2}, \dots, \underbrace{(N_1 - 1)N_2 + s_2}_{s_1=N_1-1}}_{N_1 \text{ veces}}$$

Por otra parte, también de la Ec. (C.13) se observa que cada  $C(r_2, s_2)$  requiere  $N_2$  operaciones elementales (términos de la suma). Dado que hay  $N$  posibles  $C(r_2, s_2)$  ( $0 \leq r_2 \leq N_1, 0 \leq s_2 \leq N_2 - 1$ ), se necesitan  $NN_2$  operaciones elementales para calcular todos los  $C(r_2, s_2)$  posibles. Una vez calculados, se sustuyen en la Ec. (C.12), de la cual se observa que son necesarias  $N_1$  operaciones elementales para calcular cada  $v_s$ . Como hay  $N$  valores de  $v_s$ , son necesarias  $NN_1$  operaciones elementales. De manera que, el número total de operaciones elementales para calcular todos los valores  $v_s$  son

$$\underbrace{NN_2}_{C(r_2, s_2) \text{ posibles}} + \underbrace{NN_1}_{\text{suma sobre } r_2} = N(N_1 + N_2). \quad \blacksquare \quad (\text{C.14})$$

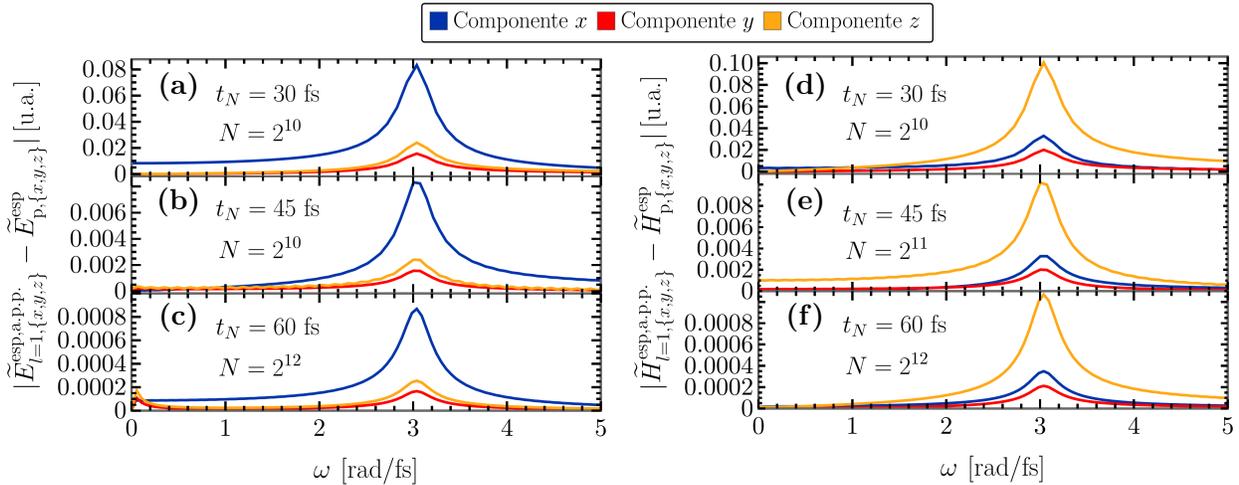
La demostración de que sólo son necesarias  $N(N_1 + N_2)$  operaciones elementales para calcular la DFT cuando el número de datos es de la forma  $N = N_1 N_2$  es la misma para  $N = N_1 N_2 N_3$ , teniendo que realizar solamente  $N(N_1 + N_2 + N_3)$  operaciones elementales. La optimización que descubrieron J. W. Tukey y J. W. Cooley en 1965 [46] de este resultado es elegir  $N = 2^\#$  con  $\# \in \mathbb{N}$ , teniendo que realizar solamente

$$N \underbrace{(2 + 2 + \dots + 2)}_{\# \text{ veces}} = 2\#N = 2N \log_2 N \quad (\text{C.15})$$

operaciones para el cálculo de la DFT (IDFT) de  $2^\#$  datos, lo cual es una ganancia significativa en el tiempo de cómputo considerando que antes se contemplaban  $N^2$  operaciones a realizar.

En el capítulo 3 se menciona que la precisión en el cálculo numérico de la DFT realizado con *Mathematica 13.0*<sup>4</sup>, es tal que los datos obtenidos y mostrados en la Fig. 3.1 difieren de la solución exacta hasta la cuarta cifra decimal. Para obtener este resultado, se calcula el error absoluto [47] entre los valores dados por las expresiones analíticas de las componentes del campo EM esparcido en aproximación de partícula pequeña, Ecs. (3.2), con los datos obtenidos al calcular la DFT de las componentes del campo EM esparcido en la aproximación dipolar eléctrica, Ecs. (3.3).

En las Figs. C.1(a-c) y Figs. C.1(d-f) se muestran las gráficas del error absoluto calculado para los campos eléctrico y H esparcidos, respectivamente, en el dominio espectral considerando distintos valores del límite superior del intervalo de integración  $t_N$  y del número de datos  $N = 2^\#$ . Al aumentar  $t_N$ , el máximo del error absoluto disminuye, siendo para el campo eléctrico:  $\sim 0.08$  u.a. (unidades arbitrarias) si  $t_N = 30$  fs,  $\sim 0.008$  u.a. si  $t_N = 45$  fs y  $\sim 0.0009$  u.a. si  $t_N = 60$  fs; y para el campo H:  $\sim 0.10$  u.a. si  $t_N = 30$  fs,  $\sim 0.009$  u.a. si  $t_N = 45$  fs y  $\sim 0.0009$  u.a. si  $t_N = 60$  fs. Por otra parte, aumentar el número de datos  $N$  no cambia el comportamiento general del error absoluto. Los valores de  $N$  que se muestran en la Fig. C.1 corresponden a los valores mínimos para los cuales las curvas mostradas se suavizan. De las gráficas del error absoluto para el campo EM esparcido mostradas en las Figs. C.1(c,f), se concluye que los datos obtenidos al calcular la DFT de los campos eléctrico y H con  $t_N = 60$  fs difieren del resultado exacto hasta la cuarta cifra decimal, obteniendo un error menor al 0.01 %.

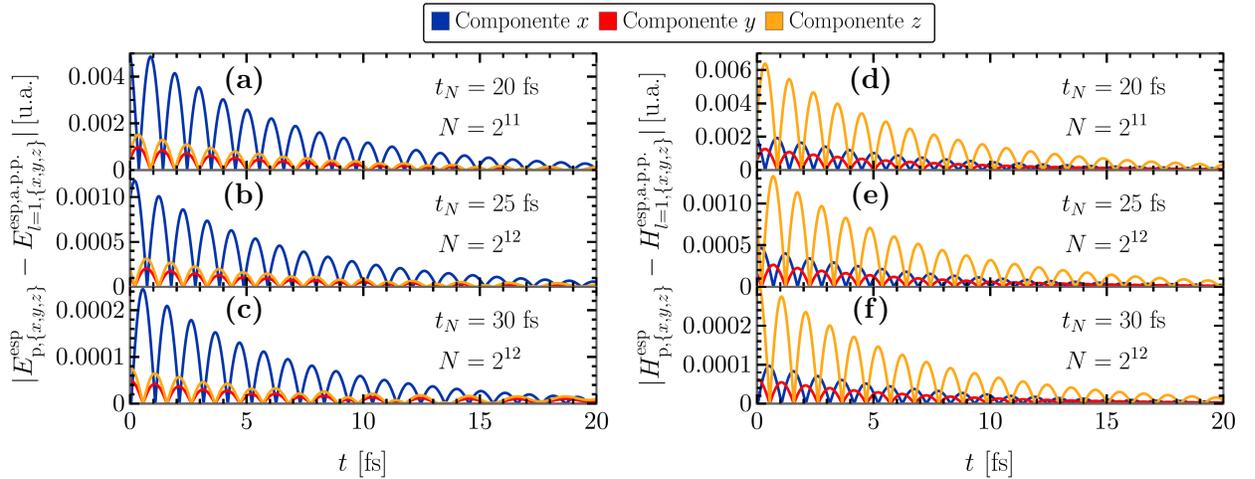


**Fig. C.1:** Error absoluto de las componentes cartesianas del (a-c) campo eléctrico y (d-f) campo H esparcidos por una NP hecha de aluminio [37, 38], de radio  $a = 1$  nm, al interactuar con un electrón con velocidad  $\beta = 0.5c$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm, en el dominio espectral. Para el cálculo de error absoluto se emplea como límite superior de integración (a,d)  $t_N = 30$  fs, (b,e)  $t_N = 45$  fs y (c,f)  $t_N = 60$  fs, para una cantidad de datos (a,b,d)  $N = 2^{10}$ , (e)  $N = 2^{11}$  y (c,f)  $N = 2^{12}$ . Ambos campos se evalúan en el punto  $\mathbf{r}_1 = (0, -5, 1)$  nm, elegido arbitrariamente.

<sup>4</sup>Para el cálculo numérico se utilizan las funciones `Fourier[tabla de datos, FourierParameters -> {1, 1}]` en el caso de la DFT, y la función `InverseFourier[tabla de datos, FourierParameters -> {-1, 1}]` para la IDFT.

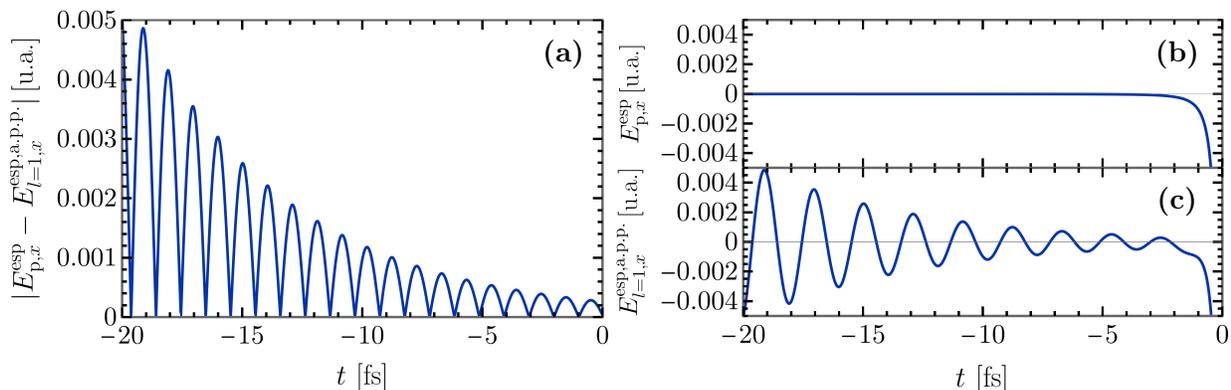
Por otra parte, para verificar la precisión en el cálculo numérico de la IDFT mostrado en la Fig. (3.2), se calcula el error absoluto entre los valores dados por las expresiones analíticas de la componentes del campo EM esparcido en la aproximación dipolar eléctrica, Ecs. (3.3), con los datos obtenidos al calcular la IDFT de las componentes del campo EM esparcido en aproximación de partícula pequeña, Ecs. (3.2).

En las Figs. C.2(a-c) y C.2(d-f) se muestran las gráficas del error absoluto calculado para los campos eléctrico y H esparcidos, respectivamente, en función del tiempo para distintos valores de  $t_N$  y  $N = 2^\#$ . Al igual que en el cálculo del error de la DFT, aumentar el valor de  $t_N$  disminuye el máximo del error absoluto y los valores presentados para  $N$  son los valores mínimos para los cuales se suavizan las curvas presentadas. De las gráficas mostradas en las Figs. C.2(c,f), correspondientes al error absoluto para los campos EM esparcidos en función del tiempo, se concluye que los datos obtenidos al calcular la IDFT con  $t_N = 30$  fs difieren del resultado exacto hasta la cuarta cifra decimal, obteniendo al igual que en el caso de la DFT un error menor al 0.01 %.



**Fig. C.2:** Error absoluto de las componentes cartesianas del (a-c) campo eléctrico y (d-f) campo H esparcidos por una NP hecha de aluminio [37, 38], de radio  $a = 1$  nm, al interactuar con un electrón con velocidad  $\beta = 0.5c$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm, en el dominio temporal. Para el cálculo de error absoluto se emplea como límite superior de integración (a,d)  $t_N = 20$  fs, (b,e)  $t_N = 25$  fs y (c,f)  $t_N = 30$  fs, para una cantidad de datos (a,d)  $N = 2^{11}$  y (b,c,e,f)  $N = 2^{12}$ . Ambos campos se evalúan en el punto  $\mathbf{r}_1 = (0, -5, 1)$  nm, elegido arbitrariamente.

En la Fig. C.2 sólo se presentan gráficas del error absoluto para valores  $t > 0$ , esto debido a que el comportamiento general de las expresiones analíticas es distinto al de los datos obtenidos al calcular la IDFT, aumentando el valor del error absoluto a medida que  $t$  disminuye su valor. Para ejemplificar esta diferencia en el comportamiento entre los datos exactos y los calculados numéricamente, en la Fig. C.3(a) se presentan los valores del error absoluto de la componente  $x$  del campo eléctrico esparcido en función del tiempo, para los valores  $t_N = 30$  fs y  $N = 2^{12}$  correspondientes a la curva azul de la Fig. C.2(c), pero en el intervalo  $[-20, 0]$  fs. En la Fig. C.3(b) se observa que el comportamiento de la expresión analítica  $E_{p,x}^{esp}(\mathbf{r}_1; t)$  es monótonamente decreciente conforme  $t \rightarrow 0$  desde valores negativos, y converge rápidamente a 0 cuando  $t \rightarrow -\infty$ . Por otra parte, en la Fig. C.3(c) se observa que los datos obtenidos de calcular la IDFT del campo eléctrico esparcido presentan un carácter oscilatorio alrededor del valor  $E_{l=1,x}^{esp.lej}(\mathbf{r}_1; t) = 0$ , aumentando su amplitud a medida que  $t$  decrece a valores negativos. Esto se debe a que al calcular una IDFT, en realidad se considera que la función a transformar del espacio de frecuencias al espacio temporal es cíclica con periodicidad dada por el intervalo en el tiempo considerado, en este caso  $[-30, 30]$  fs, de modo que las oscilaciones que se presentan para  $t < 0$  son las correspondientes a tiempos mayores de  $t = 20$  fs, pero que son asignados a valores negativos por el comportamiento cíclico de los valores dados por la IDFT. De lo anterior se concluye que, para valores negativos de  $t$ , el error absoluto no tiene sentido y no es posible establecer una cota que estime el error de los valores calculados, de modo que la precisión está dada por el error absoluto calculado en valores de  $t > 0$ .



**Fig. C.3:** (a) Error absoluto de la componentes  $x$  del campo eléctrico esparcido por una NP hecha de aluminio [37, 38], de radio  $a = 1$  nm, al interactuar con un electrón con velocidad  $\beta = 0.5c$  y parámetro de impacto  $b = 12$  nm, en el dominio temporal, con parámetros  $t_N = 30$  fs y  $N = 2^{12}$ . Comportamiento de los datos (a) exactos y (c) numéricos calculados por medio de la IDFT para la componente  $x$  del campo eléctrico esparcido en función del tiempo. El campo eléctrico se evalúan en el punto  $\mathbf{r}_1 = (0, -5, 1)$  nm, elegido arbitrariamente.

Para el cálculo de la IDFT de las funciones espectrales auxiliares se consideró un intervalo fijo de tiempo considerando  $t_N = 50$  fs. A su vez, el número de datos considerados para el cálculo varió en función de la velocidad relativa  $\beta$ , del arreglo  $\{a, b\}$  y del material de la nanopartícula. En la Tabla C.1 se muestran las potencias del factor 2 elegidas para obtener las gráficas mostradas en el capítulo 3.

Potencia del número de datos $n = 2^\#$				
Arreglo		$\{1, 3\}$	$\{10, 12\}$	$\{10, 30\}$
Material (modelo)	$\beta$	#	#	#
Aluminio (Drude)	0.25	16	14	14
	0.50	16	14	14
	0.75	17	17	15
	0.99	18	17	16
Oro (Drude-Lorentz)	0.25	15	14	14
	0.50	16	15	14
	0.75	17	15	14
	0.99	18	16	16
Bismuto (Brendel-Bormann)	0.25	15	14	14
	0.50	16	14	14
	0.75	17	15	14
	0.99	18	16	16
Carburo de Silicio (Brendel-Bormann)	0.25	15	14	14
	0.50	16	15	14
	0.75	17	15	14
	0.99	18	16	17

**Tabla C.1:** Potencia del factor 2 correspondientes al número de datos considerados para el cálculo de la fuerza de retroceso que experimenta una NP en el arreglo  $\{a, b\}$  en términos la IFFT de las funciones espectrales auxiliares simplificadas, Ecs. (2.32).

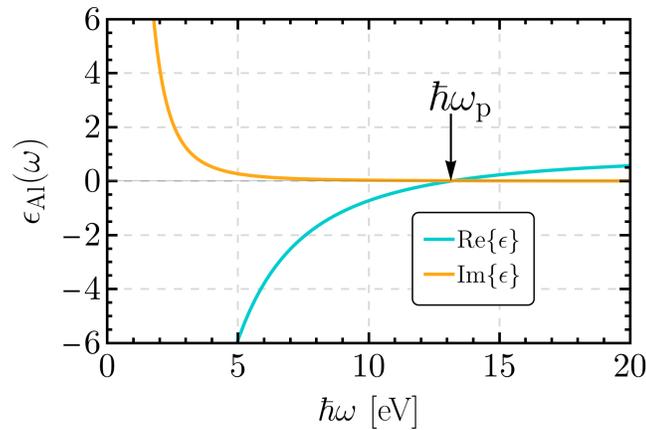
# Funciones dieléctricas

Para la función dieléctrica del aluminio se utiliza el modelo de Drude [37], desarrollado por el físico alemán Paul Drude en 1900, el cual consiste en modelar con mecánica clásica el comportamiento microscópico de los electrones presentes en una red cristalina de un metal, considerándolos como un gas de electrones libres. El modelo proporciona una expresión para la conductividad eléctrica que a su vez permite dar una expresión para la función dieléctrica del metal, la cual es:

$$\epsilon_D(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma)}, \quad (\text{D.1})$$

donde  $\omega_p$  y  $\Gamma$  son la frecuencia de plasma y la constante de amortiguamiento fenomenológica características del metal, respectivamente, mientras que  $\omega$  es la frecuencia angular de la onda electromagnética que excita al metal. El metal que mejor es representado por el modelo de Drude es el aluminio, con parámetros  $\hbar\omega_p = 13.144$  eV y  $\hbar\Gamma = 0.197$  eV [38].

En la Fig. D.1 se muestra el comportamiento de la parte real y la parte imaginaria de la función dieléctrica dada por el modelo de Drude para el aluminio en función de la energía  $\hbar\omega$ . Mientras que la parte real (curva celeste) es una función creciente que cambia de signo cuando la frecuencia es cercana a la frecuencia de plasma  $\omega_p$  con un comportamiento asintótico a  $\text{Re}\{\epsilon\} = 1$  para frecuencias altas, la parte imaginaria (curva amarilla) es una función decreciente que siempre es positiva y asintótica a  $\text{Im}\{\epsilon\} = 0$  en el límite  $\omega \rightarrow \infty$ .



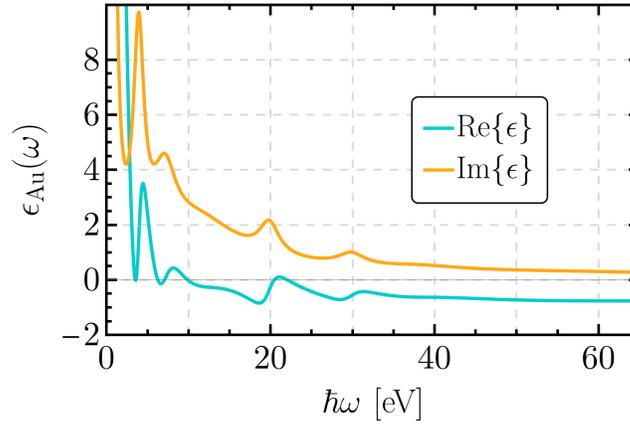
**Fig. D.1:** Parte real (curva celeste) y parte imaginaria (curva amarilla) de la función dieléctrica del aluminio modelada como un material tipo Drude. La frecuencia a la cual se intersecan ambas curvas es cercana a la frecuencia de plasma, que en caso del aluminio es  $\hbar\omega_p = 13.144$  eV [38]. La función dieléctrica es la relativa (normalizada por la del vacío), resultando una cantidad adimensional.

La función dieléctrica del oro empleada se obtiene mediante modelo de Drude-Lorentz [39], desarrollado por el físico neerlandés Hendrik Antoon Lorentz, el cual considera el movimiento de los electrones en un material como el dado por un oscilador armónico sujeto a un campo eléctrico. El modelo emplea la ecuación del oscilador armónico amortiguado y forzado [41] para describir la dinámica de un electrón y con ello, la función dieléctrica del metal:

$$\epsilon_{\text{DL}}(\omega) = 1 + \sum_j \frac{\omega_p^2 f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_j}, \quad (\text{D.2})$$

donde la suma indica la superposición de osciladores armónicos al modelar las contribuciones interbanda [41]. Al igual que en el modelo de Drude,  $\omega_p$  es la frecuencia de plasma, mientras que  $\Gamma_j$  y  $\omega_j$  son el coeficiente de amortiguamiento y la frecuencia característica del  $j$ -ésimo oscilador armónico, respectivamente.  $f_j$  representa el peso que tiene la contribución del  $j$ -ésimo oscilador armónico a la función dieléctrica.

En la Fig. D.2 se muestra el comportamiento de la parte real y la parte imaginaria de la función dieléctrica del oro, en función de la energía  $\hbar\omega$ , dada por el modelo de Drude-Lorentz con el conjunto de datos  $\{f_j, \omega_j, \Gamma_j\}$  reportado en la Ref. [39].



**Fig. D.2:** Parte real (curva celeste) y parte imaginaria (curva amarilla) de la función dieléctrica del oro modelada como un material tipo Drude-Lorentz. La función dieléctrica considera nueve osciladores armónicos. Los datos  $\{f_j, \omega_j, \Gamma_j\}$  están reportados en la Ref. [39]. La función dieléctrica es la relativa (normalizada por la del vacío), resultando una cantidad adimensional.

Por último, las funciones dieléctricas utilizadas para el bismuto y el carburo de silicio están dadas por el modelo de Brendel-Bormann [41], desarrollado por los físicos R. Brendel y D. Bormann, el cual calcula la función dieléctrica como una superposición infinita de osciladores armónicos tipo Drude-Lorentz utilizando un perfil gaussiano. Así, la función dieléctrica dada por el modelo de Brendel-Bormann es [41]:

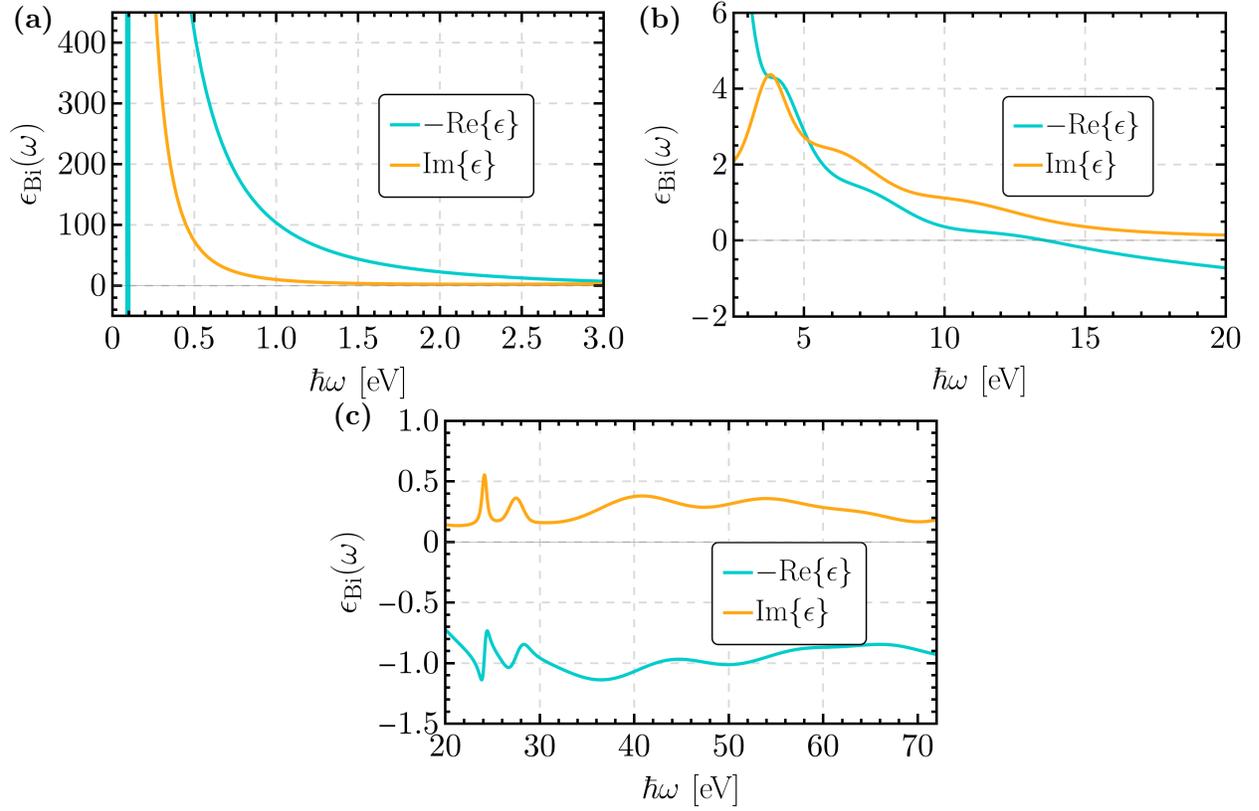
$$\epsilon_{\text{BB}}(\omega) = 1 + \sum_j \frac{i\sqrt{\pi}f_j\omega_p^2}{2\sqrt{2}a_j\omega} \left[ w\left(\frac{a_j - \omega_j}{\sqrt{2}\sigma_j}\right) + w\left(\frac{a_j + \omega_j}{\sqrt{2}\sigma_j}\right) \right], \quad (\text{D.3})$$

donde  $a_j = \sqrt{\omega^2 - i\omega\Gamma_j}$  y  $\sigma_j$  es la desviación estandar del  $j$ -ésimo perfil gaussiano. Se define la función de Faddeeva<sup>1</sup> en términos de la función exponencial y la función error complementaria como

$$w(z) = \exp(-z^2)\text{erfc}(-iz). \quad (\text{D.4})$$

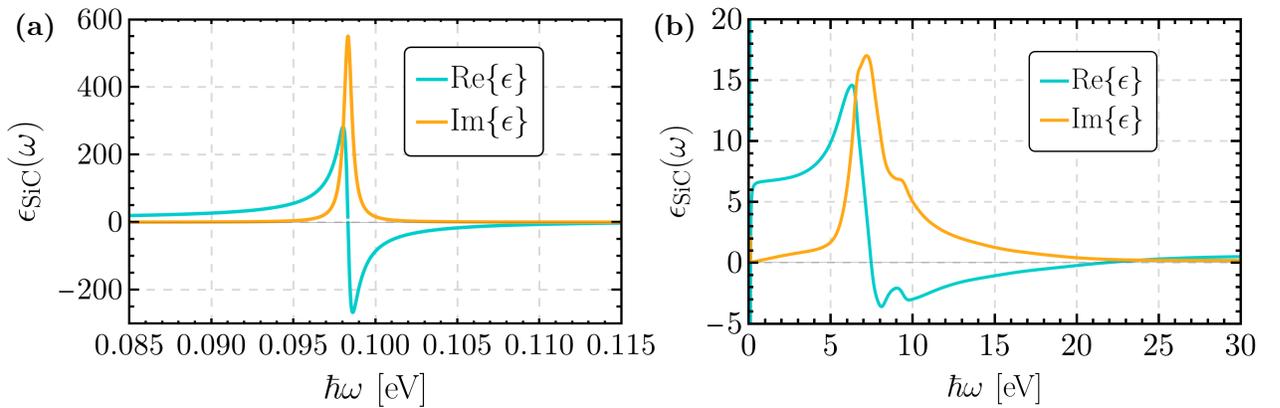
En la Fig. D.3 se muestra el comportamiento de la parte real y la parte imaginaria de la función dieléctrica del bismuto utilizando un ajuste causal de datos experimentales [39] por medio de la función dieléctrica dada por el modelo de Brendel-Bormann [41].

<sup>1</sup>Para el cálculo de la función dieléctrica dada por el modelo de Brendel-Bormann se utilizó la versión 11.0 del software *Mathematica*, pues en las versiones posteriores la función de Faddeeva presenta errores de cálculo para valores cercanos al cero.



**Fig. D.3:** Parte real (curva celeste) y parte imaginaria (curva amarilla) de la función dieléctrica del bismuto calculada mediante el modelo de Brendel-Bormann [41] en función de la energía  $\hbar\omega$  para: (a) 0-3 eV, (b) 2.5-20 eV y (c) 20-70 eV. La función dieléctrica considera un oscilador armónico tipo Drude y 12 osciladores tipo Brendel-Bormann. Los datos  $\{f_j, \omega_j, \Gamma_j, \sigma_j\}$  para el bismuto están reportados en la Ref. [41]. La función dieléctrica es la relativa (normalizada por la del vacío), resultando una cantidad adimensional.

En la Fig. D.4 se observa el comportamiento de la parte real y la parte imaginaria de la función dieléctrica del carburo de silicio utilizando un ajuste causal de datos experimentales [42] por medio de la función dieléctrica dada por el modelo de Brendel-Bormann [41].



**Fig. D.4:** Parte real (curva celeste) y parte imaginaria (curva amarilla) de la función dieléctrica del carburo de silicio calculada mediante el modelo de Brendel-Bormann [41] en función de la energía  $\hbar\omega$  para: (a) 0.085-0.115 eV y (b) 0-30 eV. La función dieléctrica considera un oscilador armónico tipo Drude-Lorentz y 11 osciladores tipo Brendel-Bormann. Los datos  $\{f_j, \omega_j, \Gamma_j, \sigma_j\}$  para el carburo de silicio están reportados en la Ref. [41]. La función dieléctrica es la relativa (normalizada por la del vacío), resultando una cantidad adimensional.

# Bibliografía

---

- [1] G. Binning, H. Rohrer, C. Greber y E. Wibel. Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy. *Phys. Rev. Lett.*, **49**(57), 1982. DOI: [10.1103/PhysRevLett.49.57](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.57) (citado en la pág. 1).
- [2] P. E. Batson. Damping of bulk plasmons in small aluminium spheres. *Solid State Commun.*, **34**(477), 1980. DOI: [10.1016/0038-1098\(80\)90655-9](https://doi.org/10.1016/0038-1098(80)90655-9) (citado en la pág. 1).
- [3] P. E. Batson. Surface Plasmon Coupling in Clusters of Small Spheres. *Phys. Rev. Lett.*, **49**(936), 1982. DOI: [10.1103/PhysRevLett.49.936](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.936) (citado en la pág. 1).
- [4] P. E. Batson. A new surface plasmon resonance in clusters of small aluminium spheres. *Ultramicroscopy*, **9**(277), 1982. DOI: [10.1016/0304-3991\(82\)90212-1](https://doi.org/10.1016/0304-3991(82)90212-1) (citado en la pág. 1).
- [5] A. Howie y R. H. Milne. Energy Loss Spectra and reflection images from surfaces. *J. Microsc.*, **136**(279), 1984. DOI: [10.1111/j.1365-2818.1984.tb00534.x](https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1984.tb00534.x) (citado en la pág. 1).
- [6] A. Howie. Surface reactions and excitations. *Ultramicroscopy*, **11**(141), 1983. DOI: [10.1016/0304-3991\(83\)90229-2](https://doi.org/10.1016/0304-3991(83)90229-2) (citado en la pág. 1).
- [7] A. Howie y C. A. Walsh. Interpretation of localised valence loss spectra. *Radiat. Eff. Defects Solids*, **177**(169), 1991. DOI: [10.1080/10420159108220609](https://doi.org/10.1080/10420159108220609) (citado en la pág. 1).
- [8] R. H. Ritchie, P. M. Echenique, F. Flores y J. R. Manson. The image potential in Scanning Transmission Electron Microscopy and Scanning Tunneling Microscopy. *Radiat. Eff. Defects Solids*, **177**(163), 1991. DOI: [10.1080/10420159108220608](https://doi.org/10.1080/10420159108220608) (citado en la pág. 1).
- [9] P. E. Batson. Motion of Gold Atoms on Carbon in the Aberration Corrected STEM. *Microscopy and Microanalysis*, **14**(89–97), 2008. DOI: [10.1017/S1431927608080197](https://doi.org/10.1017/S1431927608080197) (citado en la pág. 1).
- [10] P. E. Batson, N. Dellby y O. L. Krivanek. Sub-ångstrom resolution using aberration corrected electron optics. *Nature*, **418**(617–620), 2002. DOI: [10.1038/nature00972](https://doi.org/10.1038/nature00972) (citado en la pág. 1).
- [11] M. Quijada, R. Díez-Muiño, A. G. Borisov, J. A. Alonso y P. M. Echenique. Lifetime of electronic excitations in metal nanoparticles. *New Journal of Physics*, **12**(5):053023, 2010. DOI: [10.1088/1367-2630/12/5/053023](https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/5/053023) (citado en la pág. 1).
- [12] F. J. García de Abajo. Optical excitations in electron microscopy. *Rev. Mod. Phys.*, **82**(209–275), 2010. DOI: [10.1103/RevModPhys.82.209](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.209) (citado en la pág. 1).
- [13] J. Nelayah, M. Kociak, O. Stéphan, F. J. García de Abajo, M. Tencé, L. Henrard, D. Taverna, I. Pastoriza-Santos, L. M. Liz-Marzán y C. Colliex. Mapping surface plasmons on a single metallic nanoparticle. *Nat. Phys.*, **3**(348), 2007. DOI: [10.1038/nphys575](https://doi.org/10.1038/nphys575) (citado en la pág. 1).
- [14] A. L. Koh, K. Bao, I. Khan, W. E. Smith, G. Kothleitner, P. Nordlander, S. A. Maier y D. W. McComb. Electron Energy-Loss Spectroscopy (EELS) of Surface Plasmons in Single Silver Nanoparticles and Dimers: Influence of Beam Damage and Mapping of Dark Modes. *ACS Nano*, **3**(3015), 2009. DOI: [10.1021/nn900922z](https://doi.org/10.1021/nn900922z) (citado en la pág. 1).
- [15] J. Nelayah, M. Kociak, O. Stéphan, N. Geuquet, L. Henrard, F. J. García de Abajo, I. Pastoriza-Santos, L. M. Liz-Marzán y C. Colliex. Two-Dimensional Quasistatic Stationary Short Range

- Surface Plasmons in Flat Nanoprimers. *Nano Lett.*, **10**(902), 2010. DOI: [10.1021/nl903653x](https://doi.org/10.1021/nl903653x) (citado en la pág. 1).
- [16] J. Castrejón Figueroa. *Fuerzas de interacción entre un haz de electrones y nanopartículas metálicas*. Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2014. URL: <http://132.248.9.195/ptd2015/enero/0724059/Index.html> (citado en la pág. 1).
- [17] J. Á. Castellanos Reyes. *Transferencia de momento lineal de electrones rápidos a nanopartículas dieléctricas*. Tesis de maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2017. URL: <http://132.248.9.195/ptd2017/junio/0760867/Index.html> (citado en la pág. 1).
- [18] C. A. Maciel Escudero. *Linear momentum transfer from swift electrons to small metallic nanoparticles: dipole approximation*. Tesis de maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2017. URL: <http://132.248.9.195/ptd2017/octubre/0765992/Index.html> (citado en la pág. 1).
- [19] J. Castrejón Figueroa. *Transferencia de momento lineal de electrones relativistas a nanopartículas metálicas y dieléctricas*. Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2017. URL: <http://132.248.9.195/ptd2017/abril/0758136/Index.html> (citado en la pág. 1).
- [20] J. Á. Castellanos Reyes. *Transferencia de momento angular de electrones rápidos a nanopartículas*. Tesis de doctorado, Universidad Nacional Autónoma de México, 2021. URL: <http://132.248.9.195/ptd2021/agosto/0814349/Index.html> (citado en la pág. 1).
- [21] J. Castrejón Figueroa. *Transferencia de momento lineal de electrones rápidos a nanopartículas*. Tesis de doctorado, Universidad Nacional Autónoma de México, 2021. URL: <http://132.248.9.195/ptd2021/agosto/0814306/Index.html> (citado en la pág. 1).
- [22] P. E. Batson, A. Reyes-Coronado, R. G. Barrera, A. Rivacoba, P. M. Echenique y J. Aizpurua. Plasmonic Nanobilliards: Controlling Nanoparticle Movement Using Forces Induced by Swift Electrons. *Nano Lett.*, **11**(8):3388–3393, 2011. DOI: [10.1021/nl201795u](https://doi.org/10.1021/nl201795u) (citado en la pág. 1).
- [23] J. Castrejón-Figueroa, J. Á. Castellanos-Reyes, C. A. Maciel-Escudero, A. Reyes Coronado y R. G. Barrera. Time-dependent forces between a swift electron and small nanoparticle within the dipole approximation. *Phys. Rev. B.*, **103**(155413), 2021. DOI: [10.1103/PhysRevB.103.155413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.155413) (citado en las págs. 1, 3, 24, 26, 29).
- [24] S. Jung-Hwan, S. Jonghwa, L. Hee-Jin y L. Young-Hee. Optical recoil of asymmetric nano-optical antenna. *Opt. Express*, **19**:14929–14936, 16, 2011. DOI: [10.1364/OE.19.014929](https://doi.org/10.1364/OE.19.014929) (citado en las págs. 1, 19, 23).
- [25] C. A. Maciel-Escudero y A. Reyes-Coronado. Electromagnetic fields produced by a swift electron: A source of white light. *Wave Motion*, **86**:137–149, 2019. DOI: [10.1016/j.wavemoti.2019.01.005](https://doi.org/10.1016/j.wavemoti.2019.01.005) (citado en las págs. 3, 6, 8).
- [26] F. J. García de Abajo. Relativistic energy loss and induced photon emission in the interaction of dielectric sphere with an external electron beam. *Phys. Rev. B.*, **59**(4), 1999. DOI: [10.1103/PhysRevB.59.3095](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.3095) (citado en las págs. 3, 6, 11).
- [27] G. Mie. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Ann Phys*, **330**(3):377–445, 1908. DOI: [10.1002/andp.19083300302](https://doi.org/10.1002/andp.19083300302) (citado en la pág. 3).
- [28] C. F. Bohren y D. R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 1998 (citado en las págs. 3, 8-10, 12, 13, 21, 25, 42, 45, 48, 54).
- [29] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, United States, 4.<sup>a</sup> edición, 2007 (citado en las págs. 7, 17, 20, 23, 25, 47, 48).
- [30] D. J. Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Pearson Education, Inc., 4.<sup>a</sup> edición, 2013 (citado en las págs. 7, 18, 19, 29, 46, 52).
- [31] E. M. Purcell y D. J. Morin. *Electricity and Magnetism*. Cambridge University Press, 3.<sup>a</sup> edición, 2013 (citado en la pág. 8).

- [32] H. Bateman. *Tables of integral transforms Vol. 1*. McGraw Hill Book Company, United States, 1954 (citado en la pág. 8).
- [33] F. E. Low. *Classical Field Theory: Electromagnetism and Gravitation*. John Wiley & Sons, Federal Republic of Germany, 3.<sup>a</sup> edición, 1997 (citado en las págs. 9, 10, 44).
- [34] A. Messiah. *Quantum Mechanics, Vol. 1*. Noth-Holland Publishing Company, Netherlands, 1961 (citado en la pág. 12).
- [35] D. J. Griffiths. Relativistic energy loss and induced photon emission in the interaction of dielectric sphere with an external electron beam. *Am. J. Phys.*, **79**:867–872, 2011. DOI: [10.1119/1.3591336](https://doi.org/10.1119/1.3591336) (citado en las págs. 17, 26).
- [36] G. B. Arfken, H. J. Weber y F. E. Harris. *Mathematical Methods for Physics A Comprehensive Guide*. Academic Press of Elsevier, 7.<sup>a</sup> edición, 2013 (citado en las págs. 17, 18, 29, 48, 55).
- [37] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt College Publisher, 1976 (citado en las págs. 27, 28, 30, 31, 58-61).
- [38] M. I. Marković y A. D. Rakić. Determination of optical properties of aluminium including electron reradiation in the Lorentz-Drude model. *Optics and Laser Technology*, **22**(6):394–398, 1990. ISSN: 0030-3992. DOI: [10.1016/0030-3992\(90\)90093-J](https://doi.org/10.1016/0030-3992(90)90093-J) (citado en las págs. 27, 28, 30, 31, 58-61).
- [39] W. S. M. Werner, K. Glantschnig y C. Ambrosch-Draxl. Optical Constants and Inelastic Electron-Scattering Data for 17 Elemental Metals. *J. Phys. Chem.*:1013–1091, 4, 2009. DOI: [10.1063/1.3243762](https://doi.org/10.1063/1.3243762) (citado en las págs. 34, 35, 37, 38, 62).
- [40] S. Dunstan. *Principles of Chemistry*. Van Nostrand Company, London, 1968 (citado en la pág. 37).
- [41] D. Espinosa González. *Ajuste causal de datos experimentales para la función dieléctrica de distintos materiales*. Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2022. URL: <http://132.248.9.195/ptd2022/junio/0825891/Index.html> (citado en las págs. 37-39, 62, 63).
- [42] E. Palik. *Handbook of optical constants of solids*. Academic Press, 1998 (citado en las págs. 37, 39, 63).
- [43] M. Abramowitz e I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. National Bureau of Standards Applied Mathematics Series 55, 1972 (citado en las págs. 45, 47).
- [44] W. Magnus, F. Oberhettinger y R. P. Soni. *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH, 3.<sup>a</sup> edición, 1966 (citado en la pág. 48).
- [45] J. A. Urrutia Anguiano. *Optical response of partially embedded nanospheres*. Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, 2023. URL: <http://132.248.9.195/ptd2023/febrero/0835953/Index.html> (citado en la pág. 48).
- [46] N. H. Asmar. *Partial differential equations with Fourier series and boundary value problems*. Pearson Prentice Hall, 2.<sup>a</sup> edición, 2005 (citado en las págs. 55-58).
- [47] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling y B. P. Flannery. *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 7.<sup>a</sup> edición, 2007 (citado en la pág. 58).