



## Simulación numérica de la radiación de Cherenkov sobre una estructura de CNT de tamaños variables para diferentes velocidades de carga

### Numerical simulation of Cherenkov radiation on a CNT structure of variable sizes for different charge velocities

Medina-Ángel Gustavo

Universidad Autónoma del Estado Morelos  
Facultad de Contaduría, Administración e Informática  
Correo: [gustavo.isc@hotmail.com](mailto:gustavo.isc@hotmail.com)  
<https://orcid.org/0000-0002-0279-3492>

Martínez-Sánchez Erika

Facultad de Ingeniería  
Universidad Autónoma de Coahuila  
Correo: [erika.martinez@uadec.edu.mx](mailto:erika.martinez@uadec.edu.mx)  
<https://orcid.org/0000-0002-9096-3163>

Burlak Gennadiy

Universidad Autónoma del Estado Morelos  
Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas  
Correo: [gburlak@uaem.mx](mailto:gburlak@uaem.mx)  
<https://orcid.org/0000-0003-4829-8435>

#### Resumen

Se investigó el campo electromagnético que genera un sistema de nanotubos de carbono de longitud y radio variable que interactúa con una carga que viaja a una velocidad rápida por encima de una nanoestructura de CNTs. Los nanotubos simulados se encuentran resonando a una determinada frecuencia  $\omega_p$ , parámetro importante de resonancia que genera diferentes niveles de plasmones de superficie. Se aplicó el método Diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) para estudiar un rango de frecuencias  $\omega_p$  en donde se encontró un pico máximo de energía de plasmones-polaritones con un acoplamiento óptimo entre la carga y el sistema de CNTs.

**Descriptor:** CNT, Cherenkov, Plasmon-polariton, FDTD, Carga.

#### Abstract

The electromagnetic field generated by a system of carbon nanotubes of variable length and radius that interacts with a charge that travels at a fast velocity above a CNT nanostructure was investigated. The simulated nanotubes are found resonating at a certain frequency  $\omega_p$ , an important resonance parameter that generates different levels of surface plasmons. The Finite Differences in the Time Domain method (FDTD) was applied to study a frequency range  $\omega_p$  where a maximum peak of plasmon-polariton energy was found with an optimal coupling between the charge and the CNTs system.

**Keywords:** CNT, Cherenkov, plasmon-polariton, FDTD, Charge.

## INTRODUCCIÓN

Las telecomunicaciones son una rama importante de aplicación de tecnologías emergentes en la transmisión de señales rápidas y un área de investigación candente. Las comunicaciones ópticas en la transmisión de datos han sido aplicables a una gran parte de micro señales.

En este trabajo se investigó la interacción entre una carga rápida que genera la radiación de Cherenkov que pasa por encima de un arreglo de nanotubos resonantes con base en carbono (CNT), dicha interacción entre la partícula radiante y el sistema de nanotubos producen una señal alta que pueden alcanzar los terahercios (Nomura *et al.*, 2005; Barnes *et al.*, 2004; Kaliteevski *et al.*, 2000; Valmorra *et al.*, 2011; Xiao *et al.*, 2016; Slepian *et al.*, 1999; Shuba, *et al.*, 2012). Estas señales se producen como emisiones de luz llamadas plasmones-polaritones predominantes sobre la superficie de los nanotubos que se encuentran verticales a la dirección por la que pasa la carga (Burlak *et al.*, 2019; Barnes *et al.*, 2003).

Las nanoestructuras compuestas a base de grafeno enrolladas, forman nanotubos de carbono con morfología de CNT y actualmente son muy útiles en la fabricación de nano dispositivos electrónicos y en la conducción de la corriente eléctrica debido a su bajo costo y su baja resistividad al paso de los electrones entre sus paredes. Se utilizó este elemento como uno de los actores principales en la simulación numérica (Foygel *et al.*, 2005; Hu *et al.*, 2008; Coleman *et al.*, 1998), con la finalidad de brindar información necesaria al campo industrial y tecnológico en el dominio de las micro señales rápidas y a futuras investigaciones asociadas al estudio de los campos electromagnéticos.

## RADIACIÓN DE CHERENKOV

La radiación de Cherenkov se produce cuando la velocidad de la partícula supera la velocidad de transmisión de la luz sobre un medio dieléctrico o metal conductor (Afanasiev, 2004; Luo *et al.*, 2003).

Investigaciones recientes indican que la radiación de Cherenkov se estudia en materiales dieléctricos y diferentes configuraciones como son las nano-estructuras CNTs. El espectro de frecuencia en un medio dieléctrico está dado por la siguiente formula:

$$\frac{d^2 E}{dx d\omega} = \frac{q^2}{4\pi} \omega \left( 1 - \frac{c^2}{v^2 n^2(\omega)} \right) \quad (1)$$

Aquí, el índice de refracción del material de la carga ( $q$ ) está dada por  $n(\omega)$ , la carga viaja a una velocidad  $v$  con una frecuencia  $\omega$  emitida por la radiación de la partícula,

mientras que la constante  $c$  es la velocidad de la luz. Al ser una frecuencia continua en el espectro visible, la intensidad de la radiación de Cherenkov es relativa por unidad de frecuencia  $\omega$ , es por ello que las frecuencias más altas son más intensas en la dirección que sigue y donde pasa la carga móvil. El ángulo  $\theta$  en la que se emite tal radiación en un material o medio transparente es:

$$\sin \theta d\theta = c / vn^2(\omega) (dn(\omega) / d\omega) \quad (2)$$

La radiación de Cherenkov se produce en los reactores nucleares generalmente asimilada con un tono azulado. La radiación de Cherenkov tiene una forma de cono, debido a las ondas que se expanden tras el paso de la partícula similar a las olas que produce un barco sobre el mar y que se expanden a su paso. En la Figura 1 se observa el cono típico de la radiación de Cherenkov sobre la superficie de un material metálico, en el cual se puede apreciar que el cúmulo de luz producido por los plasmones-polaritones (Pitarke *et al.*, 2006), forma un campo electromagnético sobre el frente de onda con morfología cónica.

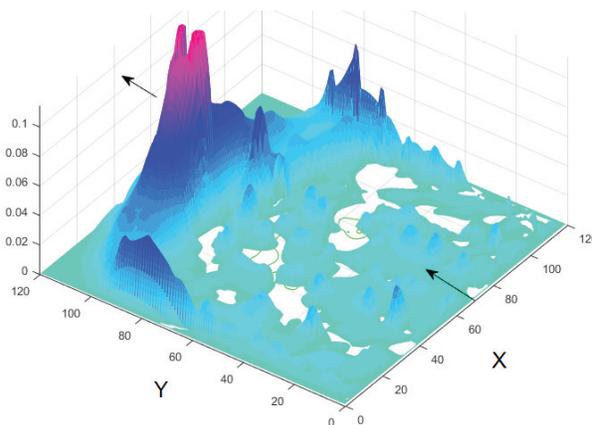


Figura 1. Superficie de frente de onda del campo electromagnético de plasmones de superficie sobre un metal dieléctrico que produce la radiación de Cherenkov. Las flechas indican la entrada y salida de la carga

## DISPERSIÓN EN NANOTUBOS CONDUCTORES

Utilizamos la teoría de conductividad dispersa en cilindros finitos para analizar la energía que produce un CNT en donde se considera una columna de plasma magnetizada con radio  $a$  que se encuentra dentro del nanotubo conductor de radio  $b$  en una sustancia dieléctrica. La dirección longitudinal está indicada por la flecha  $z$ , ver Figura 2.

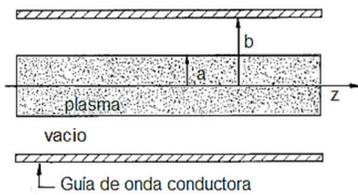


Figura 2. Imagen que muestra una sección del nanotubo infinito capaz de producir plasma

La conductividad en el nanotubo se representa analíticamente como un sistema dieléctrico, teniendo en cuenta esto, la permitividad dieléctrica para este tipo de materiales está gobernada por la ecuación de Drude.

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_h - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma_e \omega} \quad (3)$$

Donde  $\omega_p$  es la frecuencia del plasma, ( $\omega_p^2 = e^2 N_e / \epsilon_0 m_e$ ),  $\epsilon_h = 1$ , para casos  $\epsilon_r > 1$ , mientras que la permitividad en el vacío se representa por  $\epsilon_0$ , los flujos de pérdida de energía del electrón están dadas por  $\gamma_e$ , mientras que  $N_e$  y  $m_e$  son la densidad y masa del electrón, respectivamente.

### SIMULACIÓN NUMÉRICA MEDIANTE EL MÉTODO FDTD

El método de Diferencias Finitas en el Dominio del Tiempo (FDTD) es un método computacional utilizado para el cálculo numérico de las ecuaciones de Maxwell para la simulación de las ondas electromagnéticas con aproximación a la solución analítica (Taflove & Hagness, 2005).

Los métodos numéricos han sido muy eficientes al discretizar valores analíticos como son las típicas fracciones numéricas, sin embargo, en estas conversiones siempre hay pequeños valores que escapan al redondeo, como por ejemplo al sumar  $1/3$  tres veces  $\rightarrow 1/3 + 1/3 + 1/3 = 1$ , el resultado naturalmente es 1, pero para la computadora esto tendría que ser expresado más o menos de la siguiente manera:  $0.3333 + 0.3333 + 0.3333 = 0.9999$ , dependiendo de los decimales que la memoria de la computadora (RAM) soporte el resultado será más exacto, pero con una pérdida de precisión finita, hoy en día debido a las altas bondades y recursos con las que son dotadas las computadoras, esta pérdida de precisión finita se ha podido reducir lo suficiente para aceptar un valor aproximado al valor analítico. El método de diferencias finitas en el dominio del tiempo es uno de los métodos más usados para la solución numérica de ecuaciones diferenciales, como son las ecuaciones de Maxwell, las cuales se aplicaron en esta investigación para generar el campo  $E_x$  3D de los nanotubos resonantes.

El objetivo es simular una carga que pasa sobre un grupo de nanotubos CNT acomodados de manera vertical aplicando el método FDTD. Mientras la carga que viaja a una determinada velocidad produce la radiación sobre los nanotubos dieléctricos CNT, los nanotubos también son excitados a una determinada frecuencia y se produce una interacción de energía radiada entre ambos sistemas. Como resultado se produce una energía radiada de plasmones-polaritones dentro y sobre la superficie de los CNTs a unas frecuencias muy rápidas, alcanzando los niveles de terahercios. En la Figura 3 se observa el modelo que muestra la relación del sistema carga + nanotubos. En la Figura 3a se aprecia un grupo de nanotubos CNT verticales de diferentes tamaños, donde se aplicó una distribución aleatoria más apropiada y cercana a la creación de nanotubos reales, ya que tecnológicamente es difícil construir nanotubos periódicos del mismo tamaño (Burlak & Medina, 2018). La flecha Q (carga), indica la entrada de la carga sobre el sistema de CNT a una determinada velocidad  $v$ , que pasa por encima de los CNTs. En la imagen de la Figura 3b, se aprecian los detalles de la morfología del CNT o SWCNT, conocida mejor como nanotubo de carbono de pared blanda.

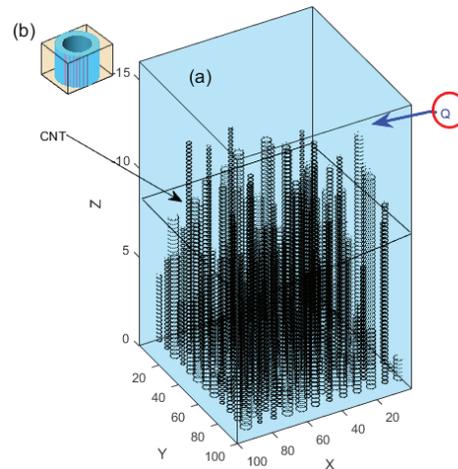


Figura 3. Modelado de un grupo de nanotubos de carbono con tamaños aleatorios (en longitud y radio) simulando nanotubos de manera vertical y paralelos al eje Z que interactúan con una carga rápida Q, que se mueve sobre el plano XY con una velocidad uniforme

Los nanotubos periódicos a menudo son difíciles de conseguir en la experimentación real y su precisión varía dependiendo del tipo de caracterización que se utilice, a menudo podemos encontrar más nanotubos con una pequeña desviación  $\sigma_h$  y  $\sigma_r$  en sus longitudes y radios, respectivamente, debido a ello, en este estudio se utiliza un enfoque de nanotubos con medidas aleatorias. Para generar el factor aleatorio en los tamaños de

nanotubos se aplicó el método Monte Carlo (Gu *et al.*, 2016; Rubinstein & Kroese, 2016).

La idea fue incorporar el factor aleatorio en un rango de valor gamma  $\gamma \in [0,1]$  y aplicar el método random para la longitud  $h$  y radio  $r$  de los nanotubos como:  $h = h_{min} + (h_{max} - h_{min})\gamma$ , mientras que para el radio externo del nanotubo se tiene que  $R = r_{min} + (r_{max} - r_{min})\gamma$ , y el radio interno  $R_i = 0.8R$ , siendo 20 % más pequeño que el radio externo. Se estandarizaron las medidas a escalas típicas de los nanotubos en nanómetros  $nm$  utilizando las siguientes variables auxiliares:  $l = 500nm$ ,  $h_{max} = 6l$ ,  $3 \times 10^3nm$ ,  $h_{min} = 0$ ,  $r_{max} = 1.5R_0$ ,  $r_{min} = 0$ , donde  $R_0 = 0.35l = 175nm$  (para más detalles ver apéndice A).

### APROVECHAMIENTO FDTD

Teniendo la ecuación 1 correspondiente a la radiación de Cherenkov y la ecuación 2 para la dispersión de plasma en nanotubos conductores, se aplicó el método FDTD (Sullivan, 2013) para modelar el sistema entre carga y nanotubos CNT de tamaño aleatorio (Figura 3).

El estudio de plasmones-polaritones en un sistema complejo 3D para la generación de señales ópticas está lejos de ser una tarea trivial en términos computacionales, por lo que este estudio se limita al régimen antes mencionado. Para este caso de estudio se distribuyeron 100 CNTs, dentro de la malla numérica de simulación, característica no considerada en estudios anteriores (Burlak, & Medina, 2019; Burlak *et al.*, 2019).

Ya que un nanotubo SWCNT a base de grafeno también es un semiconductor dieléctrico, se tomó como base la permitividad dieléctrica Drude de los metales:  $(\omega) = \epsilon h - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\gamma_e \omega)$ . El valor de la permitividad dieléctrica de la matriz CNT es  $\epsilon_h = 2$ , la frecuencia de plasma se representa por  $\omega_p$ , y  $\gamma_e \ll \omega_p$ , representan las pérdidas *gamma*, que son mucho menores a las frecuencias de oscilación *omega p*, ver Figura 3.

Una vez teniendo las condiciones necesarias para la simulación numérica se procedió a la generación de las pruebas numéricas, teniendo como parámetros importantes la velocidad  $v$  a la que se mueve la carga y la frecuencia de oscilación de los nanotubos en la matriz de simulación  $\omega_p$ .

En las Figuras 4 y 5, se observa el comportamiento que produce el efecto Cherenkov sobre la superficie de los nanotubos dieléctricos.

En la Figura 4 se observa la formación de plasmones-polaritones que produce la interacción entre los nanotubos y la carga, para este caso se tiene una frecuencia de oscilación en los nanotubos de  $\omega_p = 6 \times 10^{14} s^{-1}$ , mientras que para el caso de la Figura 5 existe una frecuencia de oscilación de  $\omega_p = 4.1 \times 10^{15} s^{-1}$  con una velocidad de carga de  $v = 0.98$  para ambos casos y normalizada a la velocidad de la luz  $c$  ( $3 \times 10^8$  m/s) en el vacío.

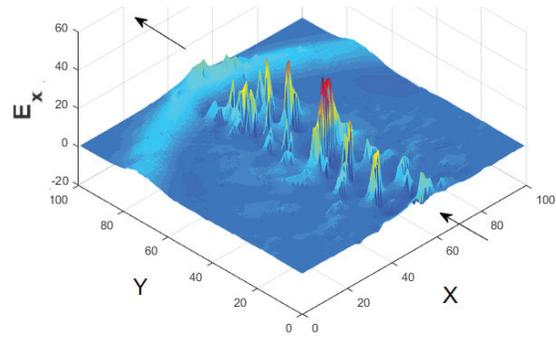


Figura 4. Plasmones de superficie tras el paso de la partícula que produce la radiación de Cherenkov, se observa el campo eléctrico en su dirección  $E_x$ , con una altura radiada de energía aproximadamente de 60 unidades en intensidad. La frecuencia de oscilación de los nanotubos para este caso es de  $\omega_p = 6 \times 10^{14} s^{-1}$ . Las flechas muestran la dirección que sigue la carga sobre el sistema resonante CNT

De las Figuras 4 y 5 se puede observar un comportamiento diferente para ambos casos, mientras que en la Figura 4 se distingue una forma de cono bien definida con picos sobre la ruta que sigue la carga y en el frente de onda cerca del final la malla de simulación, en la Figura 5 se observa que en la ruta principal de la carga se distribuyen los picos de mayor intensidad con aproximadamente 100 unidades, alcanzando una altura en colectividad de energía sobre el campo  $E_x$  superior al del ejemplo de la Figura 4.

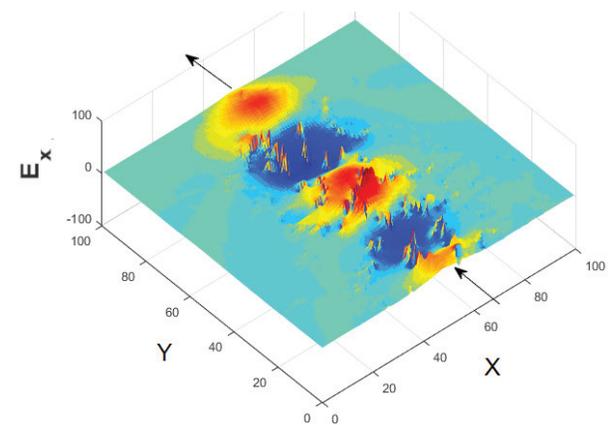


Figura 5. Se aprecia lo mismo que en la Figura 4, pero con diferente frecuencia de oscilación en los nanotubos CNT, para este caso se aplicó una frecuencia de  $\omega_p = 4.1 \times 10^{15} s^{-1}$ . Con una altura de superficie de plasmones-polaritones aproximadamente de 100 unidades en intensidad sobre el campo  $E_x$

De los ejemplos de las Figuras 4 y 5 se puede observar que el parámetro  $\omega_p$  (frecuencia de resonancia de los nanotubos), juega un papel importante para estos dos casos, ya que, si se altera este parámetro en los CNTs, los valores de radiación de energía pueden aumentar o disminuir y la dispersión de plasmones-polaritones

puede ser variable, lo que motiva a estudiar un rango para diferentes frecuencias  $\omega_p$ .

### RESULTADOS

Se investigó un amplio espectro de frecuencias para conocer el comportamiento de emisión de plasmones de superficie cuando se varía el valor de  $\omega_p$ , el intervalo de frecuencias estudiadas fue de un rango de frecuencias de  $\omega_p=[1 \times 10^{14}$  hasta  $5 \times 10^{16}] \text{ s}^{-1}$  con velocidades de carga  $v_1=0.81$ ,  $v_2=0.87$ ,  $v_3=0.92$  y  $v_4=0.98$  que emite la radiación de Cherenkov.

En la Figura 6 se pueden apreciar los resultados que se calcularon para el rango de frecuencias  $\omega_p=[1 \times 10^{14}$  hasta  $5 \times 10^{16}] \text{ s}^{-1}$ , en el cual se presenta mayor actividad en la radiación de plasmones-polaritones. El primer valor de frecuencia con mayores cambios comienza en  $\omega_p=6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  donde existe una disminución de energía indicada por la flecha A (Valor mínimo de radiación de plasmones y polaritones con tendencia ascendente), y topa con un valor máximo de energía (indicado por la flecha B) con frecuencia  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ . Posteriormente se sigue una relación sin cambios hasta la última frecuencia del intervalo estudiado  $\omega_p=5 \times 10^{16}$ .

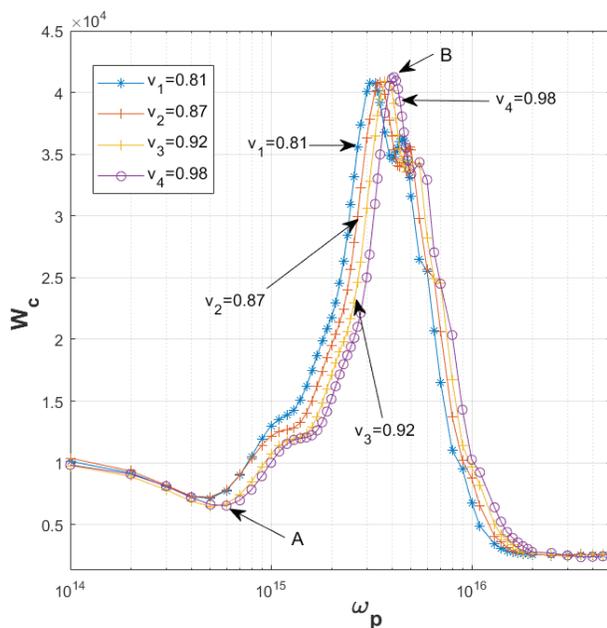


Figura 6. Se muestra la energía radiada ( $W_c$ ) para 4 velocidades de carga ( $v_1-v_4$ ) en un intervalo estudiado de  $\omega_p=[1 \times 10^{14}$  hasta  $5 \times 10^{16}] \text{ s}^{-1}$ , se puede observar un crecimiento de energía que asciende desde un valor inicial de  $\omega_p=6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  (indicado por la flecha A) hasta alcanzar un valor máximo en  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  (indicado por la flecha B) con una velocidad de carga  $v=0.98$  para ambos casos, considerando el valor de frecuencia  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  como el mejor valor de acoplamiento entre la carga y el sistema resonante CNT

Se puede apreciar que existe una mayor radiación de energía para el valor del pico B con frecuencia de  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  en comparación con frecuencias más bajas y más altas a esta.

Encontrar los puntos con menor y mayor radiación de energía nos motiva a analizar el comportamiento y la estructura que se genera sobre los CNTs cuando pasa la carga sobre los nanotubos oscilado en frecuencias  $\omega_p=6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  y  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  puntos con menor y mayor energía respectivamente (A y B). Es por ello que en las Figuras 7 y 8, se observan imágenes con cortes de capas de tomografías para los puntos con mayor relevancia A y B de la Figura 6. Estas figuras dan una idea de lo que sucede dentro de la nano estructura de los CNTs y cómo se distribuye el campo  $E_x$  al paso de la carga. Para ello se calcula la dinámica superficial e interna haciendo pasar la partícula (como se muestran en las Figuras 4 y 5), sobre la frecuencia de dichos puntos para el campo de la estructura 3D que la partícula va dejando sobre los nanotubos resonantes, la cual comienza cuando la carga entra y termina hasta que sale del sistema, es decir, desde un tiempo 0 hasta un tiempo cuando la partícula toca la rejilla de simulación de salida. Para cada tiempo los datos que forman la estructura 3D son almacenados en una base de datos que más tarde pueden graficarse en forma de Isosurface (cuerpo 3D) o en cortes de la misma para obtener tomografías del sistema.

La Figura 7 muestra 9 paneles desde  $i=2$ , hasta  $i=100$ , que corresponden a 9 cortes transversales de la nanoestructura en profundidad, donde la primera capa  $i=2$  corresponde al corte más cercano a la superficie, mientras que el corte  $i=100$  corresponde al corte más profundo de la nanoestructura y cerca de la base de los nanotubos. Dichos paneles corresponden al valor de frecuencia  $\omega_p=6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  señalada por la flecha A de la Figura 6, punto de frecuencia donde la energía comienza a elevarse.

En la Figura 8 se muestran los mismos cortes que en la Figura 7, pero con una frecuencia de resonancia para los nanotubos de  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ , que corresponde al valor máximo de energía alcanzado del rango estudiado ( $[1 \times 10^{14}$  hasta  $5 \times 10^{16}] \text{ s}^{-1}$ ) y de mejor acoplamiento entre la carga y los CNTs (ver flecha B de la Figura 6). Se aprecia una dispersión del campo eléctrico  $E_x$  muy similar a la de la Figura 7, pero con mayor intensidad de dispersión entre los campos de los nanotubos.

Se puede distinguir una diferencia marcada entre las capas de la Figura 7 y la Figura 8, con predominancia de dispersión del campo  $E_x$  cuando la frecuencia es  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ .

A menudo es mejor visualizar el campo de los nanotubos internos en un estado 3D, ya que brinda una mejor apreciación a la vista, a diferencia de los cortes en forma de tomografía estudiados anteriormente.

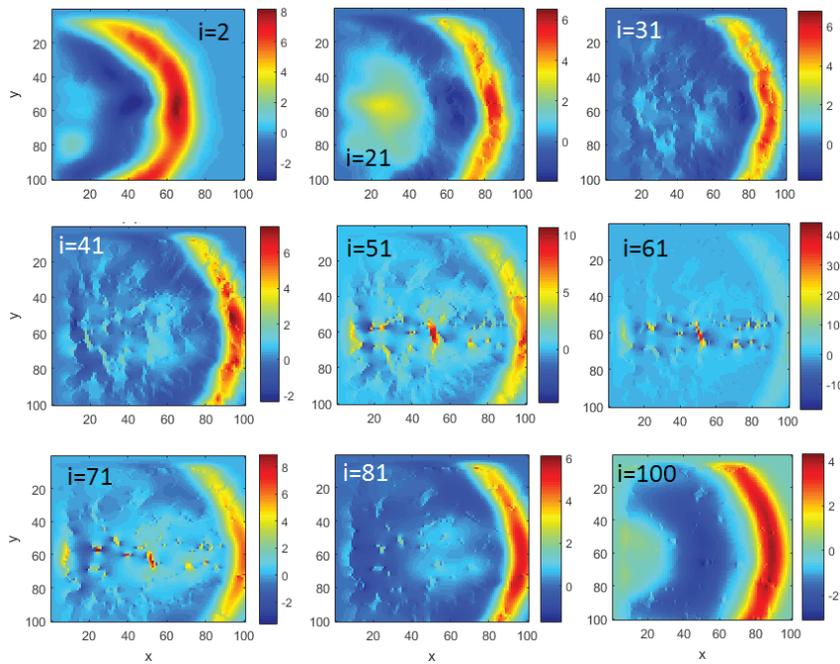


Figura 7. Se muestran los cortes internos del campo  $E_x$  de la nanoestructura de CNTs divididos en 9 paneles que van desde  $i=2$  hasta  $i=100$ . Se observa un patrón bien definido del cono Cherenkov que genera el campo de los nanotubos resonantes al interactuar con la radiación que emite la carga. Los paneles corresponden al valor de frecuencia  $\omega_p=6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  con una velocidad de carga de  $v=0.98$  que se indica en la flecha A de la Figura 6

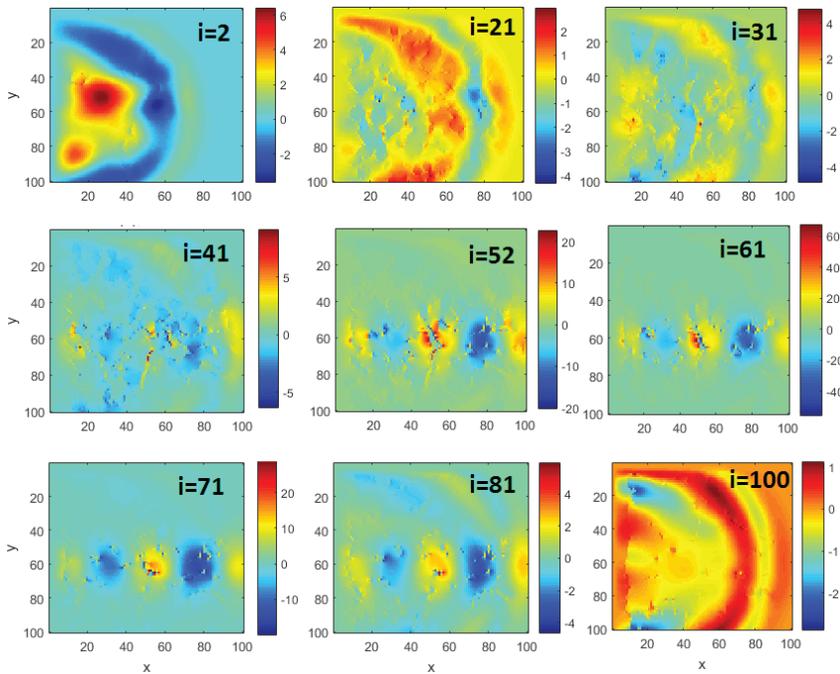


Figura 8. Distribución del campo  $E_x$  en la parte interna de la nanoestructura. Se observan cortes en profundidad similares a las de la Figura 7, pero con frecuencia  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  (ver flecha B de la Figura 6) con un fuerte acoplamiento entre el sistema CNT y la carga radiante

En las Figuras 9 y 10 se observa la estructura 3D del campo eléctrico  $E_x$  generado por los nanotubos resonantes dentro de la nanoestructura, que corresponden a las frecuencias  $\omega_p=6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  y  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  de los CNTs indicadas por las flechas A y B de la Figura 6, los cuales se estudiaron en este trabajo.

Para el caso de la Figura 9, se puede observar la distribución del campo  $E_x$  irradiada dentro de la nanoestructura 3D. La flecha Q apunta al campo eléctrico que generan

los nanotubos, mientras que la flecha P apunta al campo generado por la carga cerca de la superficie. Las flechas azules indican la dirección de entrada y salida de la carga.

Se tiene el mismo caso para la Figura 10, pero con frecuencia  $\omega_p=4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  con mayor acoplamiento entre la carga y los CNTs correspondientes al pico de energía señalado con la flecha B de la Figura 6. Se puede observar que en tal frecuencia el campo electromagnético del sistema de nanotubos 3D tiene una

forma de nanotubos de longitud y radio variable bien definidas, así como un campo más extenso en comparación con el campo de la Figura 9.

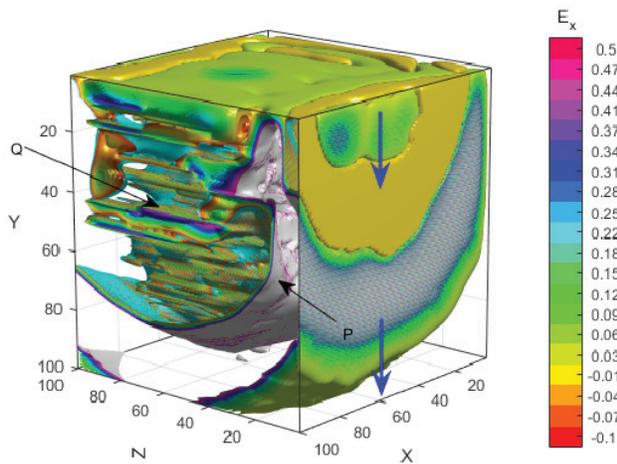


Figura 9. Estructura del campo tridimensional  $E_x$  del sistema que genera la carga radiante y el sistema de nanotubos con frecuencia de plasma  $\omega_p = 6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  correspondiente al valor mínimo de generación de energía que se presenta en la Figura 6 (flecha A). Las flechas azules muestran la dirección de la carga, así como la entrada y salida de la misma

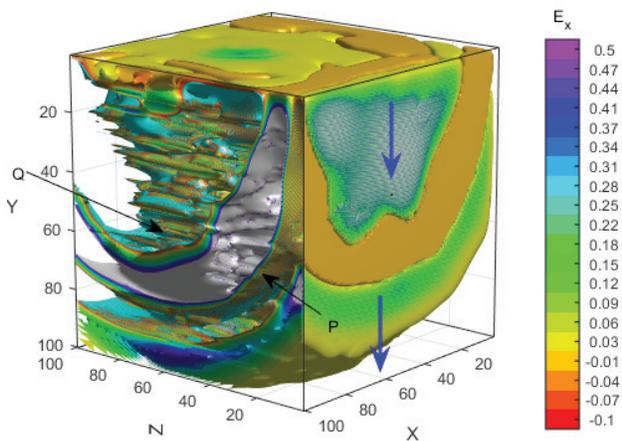


Figura 10. Distribución del campo  $E_x$  con frecuencia  $\omega_p = 4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  que corresponde al acoplamiento máximo señalado por la flecha B de la Figura 6

### DISCUSIÓN DE RESULTADOS

La emisión de plasmones-polaritones en metamateriales produce frecuencias rápidas capaces de transmitir señales, alcanzando los niveles de terahercios, bondad tecnológica que puede ser directamente aplicada a procesadores de alto rendimiento en donde las transmisiones de datos tienden a ser muy aceleradas.

En esta investigación se simula una alternativa para generar plasmones-polaritones considerando el campo electromagnético resultante que forman un arreglo de nanotubos resonantes de morfología aleatoria y una carga rápida pasa por encima de ellos. La estructura electromagnética formada por los nanotubos al paso de la carga radiante desprende una alta radiación en forma de plasmones y polaritones cuando aplicamos frecuencias de resonancia a la nanoestructura.

Los nanotubos en la malla de simulación FDTD se sometieron a un espectro de frecuencias de  $\omega_p = 1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  hasta  $5 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ , intervalo importante de frecuencias que fueron investigadas para encontrar entre ellas una frecuencia con mayor desprendimiento de energía de plasmones-polaritones, los nanotubos interactúan con una carga radiante que viaja en primera instancia a una velocidad de  $v=0.81$ , posteriormente variamos la velocidad para los valores  $v=0.87, 0.92$  y  $0.98$ , esta relación se puede apreciar en la Figura 6, en donde se observa que para las primeras frecuencias  $\omega_p = 1 \times 10^{14}$  hasta  $6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  la energía decae tenuemente para todas las velocidades, no obstante el punto con menos radiación se produce cuando la velocidad de la carga es de  $v=0.98$  con una frecuencia en los nanotubos de  $6 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  considerando este valor como el más bajo en la generación de plasmones-polaritones (Ver flecha A de la Figura 6). Posterior al punto mínimo se produce un aumento de energía en el espectro de frecuencias hasta alcanzar un punto máximo de radiación con una frecuencia de  $\omega_p = 4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  y con una velocidad de carga de  $v=0.98$ , relación que se observa en la Figura 6, donde sobresale un pico de energía apuntado por la flecha B que indica el mejor acoplamiento entre la carga y la nanoestructura que produce un mayor número de plasmones-polaritones.

El efecto que produce la interacción entre la carga y los nanotubos resonantes para los valores óptimos de acoplamiento ( $\omega_p = 4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  y  $v=0.98$ ), resulta en un desprendimiento de energía (plasmones-polaritones) a lo largo de toda la nanoestructura, esta apreciación es imaginable solamente, pero gracias a las simulaciones con el método FDTD es posible observar el plasma óptico que se genera, tal como se muestra en la Figura 10, donde se muestra claramente la pronunciación de los nanotubos a lo largo de la malla como resultado del campo electromagnético formado por los nanotubos resonantes.

La Figura 8 presenta lo mismo que en el caso 3D, solo que aquí se examinan las tomografías en profundidad del sistema, en donde la imagen con valor  $i=2$  presenta el primer corte tomográfico muy cercano a la superficie de la carga, y avanza en profundidad hasta la base de la nanoestructura, siendo el último corte la tomografía con el valor  $i=100$ , corte muy cercano a la base

de los nanotubos. Podemos observar que para cada corte, existe una intensidad representada mediante el color, entre las cuales sobresale el corte con el valor  $i=60$ , donde se aprecia una mayor intensidad, considerada como la parte donde se condensan más plasmones-polaritones.

Entre los múltiples efectos que se pueden generar entre la interacción de nanoestructuras y radiación por medio de láseres o cargas aceleradas, esta investigación brinda información precisa del punto en el cual se pueden producir un mayor número de señales rápidas, ya que se descubre un punto de acoplamiento óptimo entre los sistemas antes considerados.

### CONCLUSIÓN Y TRABAJO A FUTURO

En este trabajo se estudió la interacción entre una carga móvil radiante y un sistema de nanotubos resonantes CNT con morfología aleatoria en un arreglo 3D, se encontró un pico de energía en el cual existe un óptimo acoplamiento entre la carga radiante y la nanoestructura resonante para la generación de plasmones y polaritones con una frecuencia de plasma  $\omega_p = 4.1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$  y una velocidad de carga  $v = 0.98$ . Esta investigación brinda información que puede ser aprovechada en tecnologías futuras o emergentes que involucren señales rápidas de plasmon-polariton aplicables a nanotransistores.

Como trabajo a futuro se pretenden investigar diferentes configuraciones en las orientaciones de los nanotubos que produzcan intercepciones y formen un camino con percolación en la nanoestructura, aplicando también una distribución gaussiana en la longitud y grosor de los nanotubos, analogía más comúnmente encontrada a los sistemas de fabricación artificial en la mayor parte de nanoestructuras enrolladas, dichos factores darán apertura a una gama de posibilidades de estudio y resultados por ahora pendientes de conocer.

En este trabajo solo se revisó el caso para la carga negativa (electrón), como se aprecia en la fórmula para la permitividad, sin embargo, en trabajos futuros se pretende estudiar el comportamiento de la interacción para cargas positivas con nanoestructuras de CNTs.

En esta investigación se utilizó el método FDTD para el cálculo de los resultados numéricos, no obstante, para investigaciones posteriores se utilizarán otros métodos diferentes, que optimicen los resultados de calculación.

### APÉNDICE A. GENERACIÓN DE NÚMEROS ALEATORIOS MEDIANTE EL MÉTODO MONTECARLO

Para generar los números aleatorios se consideró en primera instancia la variable aleatoria discreta  $\gamma \in [0,1]$  (con valores pseudoaleatorios) que servirá para generar variables aleatorias extendidas  $\xi \in [a, b]$ , donde  $a$  y  $b$  son los valores reales arbitrarios para los rangos de los CNTs, la condición que debe cumplirse para este caso es que siempre  $a < b$  de tal manera que  $\xi = a + (b - a) \gamma$ , donde el valor de la media es  $\bar{\xi} = (b + a)/2$  y una desviación de  $\sigma_{\xi}^2 = \overline{\xi^2} - \bar{\xi}^2 = (b - a)^2 / 12$  para la medida de desorden.

Donde  $\frac{\sigma_h^2}{l^2} = h_{max}^2 / 12l = 0.5$  y la desviación promedio de la longitud  $h$  es  $\sqrt{\sigma_h^2} = h_{max} / \sqrt{12}$  correspondiente a un alto desorden de factor aleatorio. Por otra parte, incorporamos también el valor de una semilla (seed), para cuando se requieren repetir pruebas en un punto de interés o verificar resultados.

### AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue apoyado en parte por CONACYT (México) bajo la subvención Núm. A1-S-9201.

### REFERENCIAS

- Afanasyev, G. N. (2004). *Cherenkov radiation in a dispersive medium, Vavilov-Cherenkov and Synchrotron Radiation*. Springer.
- Barnes, W. L., Dereux, A., & Ebbesen, T. W. (2003). Surface plasmon subwavelength optics. *Nature*, 424(6950), 824-830.
- Barnes, W. L., Murray, W. A., Dintinger, J., Devaux, E., & Ebbesen, T. W. (2004). Surface plasmon polaritons and their role in the enhanced transmission of light through periodic arrays of subwavelength holes in a metal film. *Physical review letters*, 92(10), 107401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.107401>
- Burlak, G., & Medina, G. (2019). Structure of optical Cherenkov radiation in a three-dimensional compound medium with carbon nanotubes. *JOSA B*, 36(2), 187-193. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.36.000187>
- Burlak, G., & Medina, G. (2018). The optimization at studying of electrical conductivity in the dielectric nanocomposites with disordered nanotubes. *Progress in Electromagnetics Research*, 74, 77-82.
- Burlak, G., Cuevas, C., Medina, G., Martínez-Sánchez, E., & Calderón-Segura, Y. Y. (2019). Plasmon-polariton oscillations in three-dimensional disordered nanotubes excited. *Journal of Applied Physics*, 126(1), 013101. <https://doi.org/10.1063/1.5098019>
- Coleman, J. N., Curran, S., Dalton, A. B., Davey, A. P., McCarthy, B., Blau, W., & Barklie, R. C. (1998). Percolation-dominated conductivity in a conjugated-polymer-carbon-nanotube composite. *Physical Review B*, 58(12), R7492. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.R7492>

- Foygel, M., Morris, R. D., Anez, D., French, S., & Sobolev, V. L. (2005). Theoretical and computational studies of carbon nanotube composites and suspensions: Electrical and thermal conductivity. *Physical Review B*, 71(10), 104201. [https://ui.adsabs.harvard.edu/link\\_gateway/2005PhRvB..71j4201F/doi:10.1103/PhysRevB.71.104201](https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2005PhRvB..71j4201F/doi:10.1103/PhysRevB.71.104201)
- Gu, H., Wang, J., & Yu, C. (2016). Three-dimensional modeling of percolation behavior of electrical conductivity in segregated network polymer nanocomposites using Monte Carlo method. *Advances in Materials*, 5(1), 1-8.
- Hu, N., Masuda, Z., Yan, C., Yamamoto, G., Fukunaga, H., & Hashida, T. (2008). The electrical properties of polymer nanocomposites with carbon nanotube fillers. *Nanotechnology*, 19(21), 215701.
- Luo, C., Ibanescu, M., Johnson, S. G., & Joannopoulos, J. D. (2003). Cerenkov radiation in photonic crystals. *Science*, 299(5605), 368-371.
- Kaliteevski M. A., Brand S., Abram R. A., Nikolaev V. V., Maximov M. V. (2000). Exciton polaritons in a cylindrical microcavity with an embedded quantum wire. *Physical Review B*, 61(20), 13791. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.13791>
- Nomura, W., Ohtsu, M., & Yatsui, T. (2005). Nanodot coupler with a surface plasmon polariton condenser for optical far/near-field conversion. *Applied Physics Letters*, 86(18), 181108. <https://doi.org/10.1063/1.1920419>
- Pitarke, J. M., Silkin, V. M., Chulkov, E. V., & Echenique, P. M. (2006). Theory of surface plasmons and surface-plasmon polaritons. *Reports on progress in physics*, 70(1), 1.
- Rubinstein, R. Y., & Kroese, D. P. (2016). *Simulation and the Monte Carlo method*. Vol. 10. John Wiley & Sons.
- Shuba, M. V., Paddubskaya, A. G., Plyushch, A. O., Kuzhir, P. P., Slepyan, G. Y., Maksimenko, S. A., & Macutkevicius, J. (2012). Experimental evidence of localized plasmon resonance in composite materials containing single-wall carbon nanotubes. *Physical Review B*, 85(16), 165435. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.165435>
- Slepyan, G. Y., Maksimenko, S. A., Lakhtakia, A., Yevtushenko, O., & Gusakov, A. V. (1999). Electrodynamics of carbon nanotubes: Dynamic conductivity, impedance boundary conditions, and surface wave propagation. *Physical Review B*, 60(24), 17136. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.17136>
- Sullivan, D. M. (2013). *Electromagnetic simulation using the FDTD method*. John Wiley & Sons.
- Taflov, A., & Hagness, S. C. (2005). *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech house.
- Valmorra, F., Bröll, M., Schwaiger, S., Welzel, N., Heitmann, D., & Mendach, S. (2011). Strong coupling between surface plasmon polariton and laser dye rhodamine 800. *Applied Physics Letters*, 99(051110), 99. <https://doi.org/10.1063/1.3619845>
- Xiao, S., Zhu, X., Li, B. H., & Mortensen, N. A. (2016). Graphene-plasmon polaritons: From fundamental properties to potential applications. *Frontiers of Physics*, 11(2), 117801.
- Cómo citar:**  
Medina-Ángel, G., Martínez-Sánchez, E., & Burlak, G. (2022). Simulación numérica de la radiación de Cherenkov sobre una estructura de CNT de tamaños variables para diferentes velocidades de carga. *Ingeniería Investigación y Tecnología*, 23 (04), 1-9. <https://doi.org/10.22201/fi.25940732e.2022.23.4.025>