



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Instituto de
Investigación en
Ciencias
Básicas y
Aplicadas

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS



Control Escolar de Licenciatura

VOTOS DE APROBATORIOS

Secretaria Ejecutiva del Instituto de Investigación en Ciencias Básicas Aplicadas de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
P r e s e n t e .

Por medio de la presente le informamos que después de revisar la versión escrita de la tesis que realizó el C. **YERED IBSAN GÓMEZ BADILLO** con número de matrícula **20144006713** cuyo título es:

“GENERACIÓN DE ALTOS ARMÓNICOS EN EL RANGO DE TERAHERTZ CON PARAELECTRICOS”

Consideramos que **SI** reúne los méritos que son necesarios para continuar los trámites para obtener el título de **LICENCIADO EN TECNOLOGÍA CON ÁREA TERMINAL EN FÍSICA APLICADA.**

Cuernavaca, Mor a 08 de diciembre del 2021

Atentamente
Por una universidad culta

Se adiciona página con la e-firma UAEM de los siguientes:

DR. J. JESÚS ESCOBEDO ALATORRE
DR. LUIS MANUEL GAGGERO SAGER
DR. VOLODYMYR GRIMALSKY
DRA. SVITLANA KOSHOVA VOLODYMYVNA
DRA. MARGARITA TECPOYOTL TORRES

PRESIDENTE
SECRETARIO
VOCAL
PRIMER SUPLENTE (NO PARTICIPA)
SEGUNDO SUPLENTE



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

J JESUS ESCOBEDO ALATORRE | Fecha:2022-02-28 10:21:20 | Firmante

ib8w1AF7hdfgp1beL2TefuwUmTP3ddpsun2aj7loVz+HH8dO3WnyY91cyVI2AVrtZVkfDYbljnGYxdBgNbXuq9W51qE3/6boyJS292m40cqA4BjC00BF9tGKX2Xkwm7Aw2mkmic0ALhscPFqg3jVLSBt2WbD2OX4Qg9zEtzj39HDWH2nD4xOX8YRY3uCU3loFPJ82t4jppqGgDsxDOPGhEdjgKI3P4eU11YgCzWSV6Sak5dPj4TtTjHO1CO+UAAmakO4kV/V/big8O9qwarq3uuzqfw5MxEfaWXqU9klaHUYrFl2lZ/mSfknkLFxt1zAn4O5WTLZWphMk9xWcLA==

LUIS MANUEL GAGGERO SAGER | Fecha:2022-02-28 12:30:11 | Firmante

KQr2xWBKLo4DVXCBfRWYfe9ojne9aDKMwODKPPeeVogyVyUMkCW7Uy1ImfMSV8DKs9JrzhDpfey+rCumo9Jmf8wmczvr53l7ugGyqMW9l+41EiWmGC2/9AgIn8BNFs0jkbFBF3lhnn/wlZaP/8KbCgEJZQq/rEDGC1Y3ZqqUV2qbu4UVDMMWc+wwSGM7N5CJ4zFmlX75fghdmhoRl0OFTwOQMEQoPW3fdbFX23QGp/6gV7mgspphhFv/uJKFfJA1p3X/6vuwQUov0Du1HkX2aYXUnPO7in7HKxCQ+oQW8dfa1CfueukvSPk8Ew0ERT8/cKceKNR7L/fvXC4jSGQbw==

MARGARITA TECPOYOTL TORRES | Fecha:2022-02-28 13:35:54 | Firmante

hwwPuxC2cq2UGs/3/fo2PbC7WXLsPyU1XhqbS/l869bgL2SVIGrnnv87lCaF0sDa3L+WKiWbpp6Rw/25xyHGkrq1AW1fw3EDY1odik0XWkJlpJJcCv3CoqLVLWC/RTRutkKiB/DTmJBWl6nkS6jZFI+aAnhPvMGuBHd38N7eUlxjJffvP+heKyt1mmBH9xBm6HwA0PjKXZuM69XYITRQCZunqjkFJjtjbLpROuYl+HaXISB1aGc9BuOelQBZAE77ouZ6GPM5sdiCNM5vq/ZAf6q/YxnT4WtsGSJXBWugu6V0EWE6umzfpntH0UpXJZ4JFYfvc7269nCNjrbpNg==

VOLODYMYR GRIMALSKY | Fecha:2022-03-01 14:34:08 | Firmante

jlQCqXgV66B5ik3kSe9JkryqU5jSjdBQMUAHVM+7sHiYR9rvRB8AnEHU5ppUbVDPz80Pb656H1aKzms05tUxkBpb3azcBV9O5UrbyvSVFQJd3OaUJLdVzB/AqOEYSsplQ0b3St6cnOLHFvOOAgJXNLKAO1GjGUdUxfwrnNVKOTHF8wE6MHvwqyFZHcbPeZzYUyaWun1+rVw7qyPqkKcesxICL1pudygv6VSf0PCaJN9rUvcV+Z6KQFpUit7XbE0o3FxR67wThUQBxQqM8SYRgtSWXDNzWMPVCRsz8CZvw+fvND+5PebOEXaloD5bhZvR9hX4N35A5YxKyv/Gmsw==

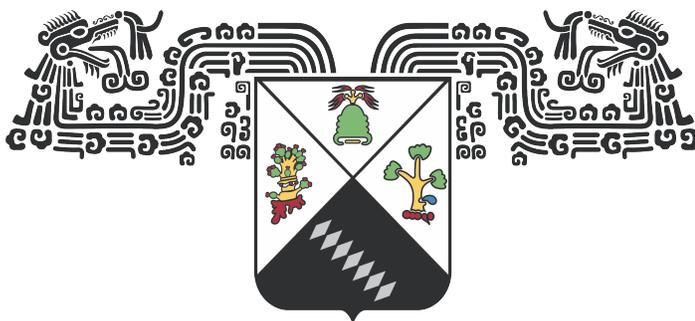
Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



e1tZNkuhT

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/Z7AWEwmhesBE527pq3AqTgIMoCuCH861>





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y
APLICADAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA Y CIENCIAS APLICADAS

Tesis para obtener el grado de:
Licenciatura en Tecnología (Física Aplicada)

GENERACIÓN DE ALTOS ARMÓNICOS EN EL RANGO DE TERAHERTZ
CON PARAELECTRICOS

Estudiante

Yéred Ibsán Gómez Badillo

Director

Volodymyr Grimalsky

Sinodales

Dra. Svetlana Koshova
Dra. Margarita Tecpoyotl T.
Dr. Luis M. Gaggero S.
Dr. J. Jesús Escobedo A.

Cuernavaca, Morelos

Generación de altos armónicos en el rango de Terahertz con Praeléctricos

Yéred Ibsán Gómez Badillo

2020-01-20

Índice general

1. Introducción	2
2. Materiales Ferroeléctricos	3
2.1. Polarización Expontánea	3
2.2. Transiciones	4
3. Ferroeléctricos en dispositivos de microondas	7
3.1. Dependecia de la temperatura	7
4. Modelo para la polarización no-lineal de ondas EM	13
5. Generación de altos armónicos	17
5.1. Simulación numérica	18

1

Introducción

En los últimos 20 años ha existido una intensa asimilación del rango de frecuencias de terahertz (0.1 - 30 THz). Los dieléctricos y semiconductores no-lineales pueden ser utilizados como materiales volumétricos no-lineales en este rango de frecuencias. Los materiales ferroeléctricos en su fase no polar, también llamados paraeléctricos (como el SrTiO_3 y KTaO_3), son utilizados como dieléctricos no-lineales. Los paraeléctricos cristalinos poseen alta no-linealidad cúbica y bajas pérdidas en la parte baja del rango de frecuencias de terahertz y temperaturas moderadamente bajas. A diferencia del rango de microondas, en el rango de THz existe una frecuencia de dispersión cuando la frecuencia se acerca a la frecuencia de modo suave, la frecuencia más baja de los modos ópticos de la red de oscilaciones.

La dinámica del campo electromagnético no-lineal está determinada principalmente por la dinámica del modo suave. En el SrTiO_3 cristalino, la frecuencia del modo suave decrece con el aumento de temperatura. Debido a los altos valores de permitividad en la parte baja del rango de terahertz, las longitudes de onda electromagnéticas son muy pequeñas ($< 10 \mu\text{m}$), así que las dimensiones del cristal pueden escogerse convenientemente $< 1\text{cm}$.

Como la no-linealidad aumenta con el incremento de $\varepsilon(0)$, es decir, a temperaturas más bajas, las intensidades de ondas electromagnéticas incidentes pueden ser más pequeñas. En consecuencia, a temperaturas más altas la frecuencia del modo suave aumenta, así que es posible un rango de generación de armónicos más amplio.

2

Materiales Ferroeléctricos

Un material ferroeléctrico es un sistema aislante con dos o más estados estables o meta estables discretos de polarización no nula en ausencia de un campo eléctrico aplicado, esta polarización se conoce como polarización espontánea. Para que un material se considere ferroeléctrico, debe ser posible cambiar entre estos estados bajo la influencia de un campo eléctrico, el cual cambia la energía relativa entre los estados, acoplado dicho campo a la polarización.

El concepto de polarización eléctrica es la clave para entender la ferroelectricidad. Para un sistema finito, la polarización eléctrica se define simplemente como el momento dipolar, obtenido con la densidad de carga, dividida por el volumen del sistema, ya que para sistemas muy pequeños, los bordes del sistema no son relevantes. Para un cristal infinito, la definición de polarización es más difícil de formular.

2.1. Polarización Espontánea

Los cristales se clasifican, dependiendo de su grado de simetría, en siete sistemas. Estos sistemas se subdividen en 32 clases de cristales, de los cuales, 11 poseen centro de simetría. Cuando a estos cristales *centrosimétricos* se les aplica una tensión uniforme, el pequeño movimiento de carga es distribuido simétricamente alrededor del centro de simetría de tal forma que los desplazamientos relativos se distribuyen uniformemente. La aplicación de un campo eléctrico produce una deformación, pero dicha deformación no cambia al revertir el campo eléctrico, es decir que este efecto es cuadrático. A esta propiedad o efecto se le llama *electrostricción* y ocurre naturalmente en todas las sustancias. De las 21 clases de cristales restantes, todas excepto una presentan polaridad eléctrica cuando se les aplica tensión. El efecto en

ellos es lineal, es decir, al revertir el campo se revierte la deformación. Este efecto se denomina efecto *pizoelectrico*. De estas 20 clases de cristales, 10 tienen como característica que presentan un único eje polar, a estos cristales se les conoce como *polares* debido a que presentan una *polarización espontánea* o momento eléctrico por unidad de volumen. Generalmente la polarización espontánea cambia dependiendo de la temperatura y a este efecto se le conoce como efecto *piroeléctrico*.

Se dice que un cristal es *ferroeléctrico* cuando éste tiene dos o más estados orientados en ausencia de un campo eléctrico y puede pasar de uno de estos estados a otro al aplicar un campo eléctrico. En estos cristales, cualquiera de sus dos estados orientados son idénticos en su estructura cristalina, pero difieren únicamente en su vector de polarización eléctrica en ausencia de campo eléctrico. Existen materiales en los cuales pueden crearse estados de polarización meta-estables a los cuales se pueden acceder al aplicar un campo eléctrico sobre ellos, es por esto que un cristal puede ser o no ferroeléctrico dependiendo de las limitaciones experimentales que se tengan. [2]

2.2. Transiciones

Los materiales cristalinos pueden cambiar su estructura cristalina a otra conforme varíen la presión y/o la temperatura. Generalmente una estructura que es estable a una temperatura de cero absoluto, posee la menor energía interna accesible. Incluso ésta estructura puede cambiar al aplicar presión sobre ella, debido a que un menor volumen favorecerá la formación de estructuras incluso metálicas. El hidrógeno y el xenón, por ejemplo, se vuelven metálicos bajo una presión extrema.

Algunas transiciones tienen efectos muy pequeños en las propiedades físicas macroscópicas del material. Sin embargo, si la transición es provocada por una presión aplicada, la estructura cristalina podría ceder fácilmente cerca de la temperatura de transición porque las proporciones relativas a ambas fases cambian bajo presión. Otras transiciones pueden provocar grandes efectos en las propiedades eléctricas macroscópicas del material. Las transiciones ferroeléctricas se caracterizan por la aparición de polarización eléctrica espontánea. Los materiales ferroeléctricos son de gran interés teórico y técnico debido a que presentan valores inusualmente altos y una inusual dependencia de la constante dieléctrica del material con la temperatura, presentan también efectos como el pizoelectrico, piroeléctrico, electro-óptico y el efecto de duplicado de frecuencia óptica. [1]

La perfección del cristal, la conductividad eléctrica y las condiciones de presión y temperatura, son factores que afectan la reversibilidad de la polarización en

una transición ferroeléctrica, es por eso que el carácter ferroeléctrico no puede ser determinado únicamente por sus características cristalográficas. Además, la posibilidad de cambio entre estados usualmente implica una estructura polar caracterizada únicamente por pequeñas distorsiones de un estado no ferroeléctrico de alta simetría. [2]

Un cristal ferroeléctrico presenta un momento dipolar eléctrico incluso en la ausencia de un campo eléctrico externo. En el estado ferroeléctrico el centro de la carga positiva del cristal no coincide con el centro de la carga negativa. La gráfica de la polarización contra el campo eléctrico para el estado ferroeléctrico muestra una región de histéresis. Un cristal en un estado dieléctrico normal usualmente no muestra una histéresis significativa cuando el campo eléctrico incrementa y luego se revierte lentamente. La ferroelectricidad normalmente desaparece después de una cierta temperatura llamada temperatura de transición (temperatura o punto de Curie T_c). Más allá de la temperatura de transición se dice que el cristal se encuentra en estado *paraeléctrico*. El término paraeléctrico sugiere una analogía con el paramagnetismo: existe una caída rápida en la constante dieléctrica conforme la temperatura aumenta. [1]

La agitación térmica tiende a destruir el orden ferroeléctrico. La fase de estructura ferroeléctrica de más alta simetría se le llama fase *prototipo*, dicha fase es la fase con la más alta temperatura. Algunos cristales no poseen temperatura de transición porque se funden antes de dejar la fase prototipo y alcanzar otra fase ferroeléctrica estable.

Como resultado de los pequeños desplazamientos estructurales de una fase prototipo no polar, un ferroeléctrico presenta polarización espontánea, la cual decrece con el aumento de la temperatura y frecuentemente desaparece de forma discontinua al alcanzar la temperatura de Curie T_c (o temperatura de transición). Sin embargo, como las cristales de clase polar no suelen corresponder a sistemas de menor simetría que las clases no polares, las transiciones que se producen desde fases no polares a polares como función de una temperatura creciente pueden y normalmente ocurren, y dP_s/dT no siempre es negativo. A pesar de esto, para los ferroeléctricos más conocidos, el comienzo de la ferroelectricidad ocurre como una función de temperatura decreciente.

Un cambio de fase ferroeléctrica es un tipo de transición estructural especial caracterizada por la aparición de polarización espontánea. Por encima del punto de Curie T_c , la transición presenta una respuesta dieléctrica diferencial divergente o permitividad ϵ que cerca de T_c varía con la temperatura como $\epsilon = C/(T - T_0)$, donde $T_0 = T_c$ únicamente para el caso de una transición continua. Por debajo de T_c , en ausencia de un campo eléctrico aplicado, hay por lo menos dos direcciones

en las que se puede desarrollar la polarización espontánea. La fase inicial desde la cual se efectúa la transición a una fase ferroeléctrica se denomina fase *paraeléctrica* y no es estrictamente necesario que la fase paraeléctrica sea la fase prototipo, aunque muchas veces así es. [2]

3

Ferroeléctricos en dispositivos de microondas

En la actualidad, los materiales ferroeléctricos están atrayendo cada vez más atención de los especialistas que trabajan en la tecnología de microondas debido a que éstos aumentan las capacidades de los dispositivos de microondas en comparación con los dispositivos basados en materiales semiconductores. Los ferroeléctricos son más simples que los semiconductores, y consumen menos energía que otros materiales. En algunos casos, la implementación de dispositivos ferroeléctricos permite resolver problemas de la tecnología de microondas que no se pueden resolver mediante el uso de dispositivos semiconductores y ferreos.

La principal propiedad de un ferroeléctrico por la cual es de gran interés para la tecnología de microondas, es la existencia de una dependencia de su constante dieléctrica con la intensidad del campo eléctrico aplicado, es decir, su *no linealidad* dieléctrica. Con esta propiedad, se pueden realizar condensadores con una capacidad controlada eléctricamente, guías de onda o líneas de transmisión con una velocidad de fase controlada, filtros ajustables, interruptores, amplificadores paramétricos, entre otros dispositivos.

3.1. Dependencia de la temperatura

Las gráficas 3.1 y 3.2 muestran que ε depende en gran medida de la intensidad del campo y la temperatura, y las pérdidas dieléctricas son relativamente bajas a una temperatura superior a la temperatura en la que se observa una permitividad dieléctrica máxima. En $T < T_c$, surge la polarización espontánea en el estado fe-

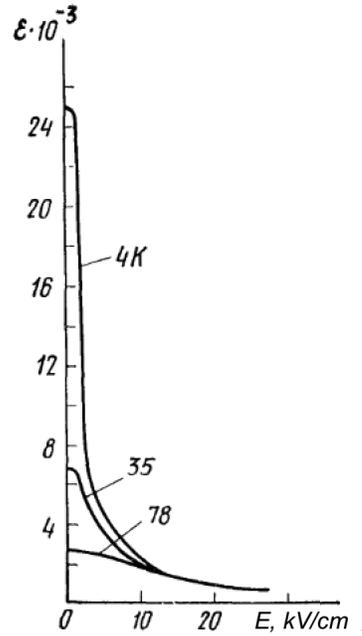


Figura 3.1: Dependencia de la constante dieléctrica ϵ con respecto a la intensidad de campo eléctrico aplicado y la temperatura del Titanato de Estroncio (SrTiO_3)

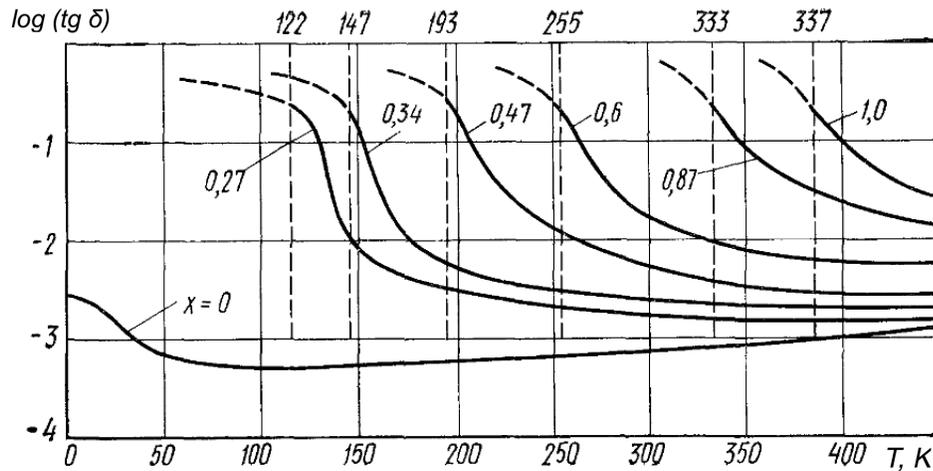


Figura 3.2: Dependencia de las pérdidas electromagnéticas $\log(e''/e')$ de SrTiO_3 - BaTiO_3 con la temperatura a una frecuencia $f = 10\text{GHz}$. Las líneas verticales discontinuas muestran la temperatura de Curie y en $x = 0$ no hay fase de transición.

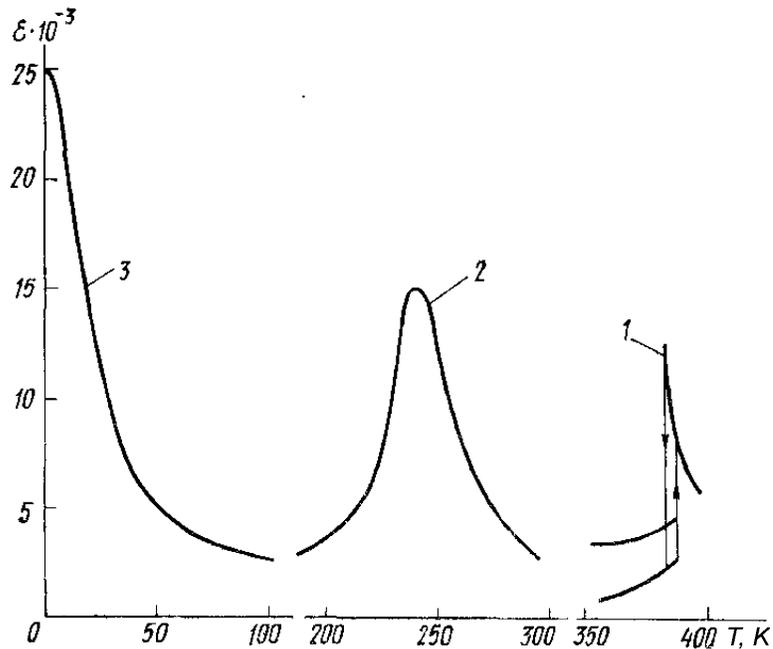


Figura 3.3: Dependencia de la constante dieléctrica con la temperatura para diferentes ferroeléctricos. 1.) BaTiO₃. 2.) BaSrTiO₃. 3.) SrTiO₃.

roeléctrico. En $T > T_c$, no hay polarización espontánea; en este caso, se se mantiene una fase paraeléctrica o parafase. El uso de ferroeléctricos en el rango de microondas es principalmente posible en el rango de temperatura en el que se encuentran en parafase, ya que en este rango de temperatura las pérdidas dieléctricas en el material son menores que en $T < T_c$, y la dependencia de ε con E es muy grande.

La figura 3.3 muestra la dependencia de la constante dielectrica con la temperatura de tres materiales: BaTiO₃, SrTiO₃ y cerámica de (Ba, Sr) TiO₃. El BaTiO₃ presenta una transición de primer orden y por lo tanto, la dependencia de $\varepsilon(T)$ esta condicionada por su T_c . En la cerámica (curva 2.), el comportamiento de la transición de fase no permite no permite atribuirla a una transición de primer o segundo orden debido a que teóricamente $\varepsilon \rightarrow \infty$ en $T = T_c$, sin embargo en el experimento, ε tiene un valor finito y además depende 'suavemente' de T, cuando $T = T_c$. Este hecho indica que existe una transición difusa.

Estrictamente, no existen transiciones de fase ferroeléctricas ya que bajo cualquier condición experimental la permitividad dielectrica permanece finita a todas las temperaturas, incluida la T_c . Sin embargo, el grado de difusión de la transición pue-

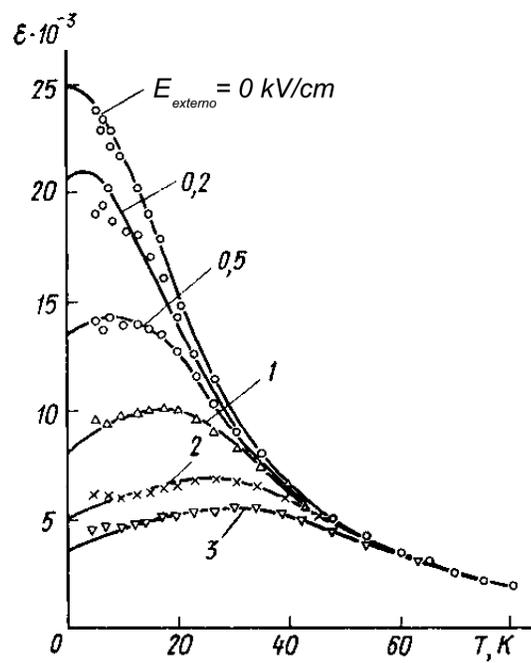


Figura 3.4: Comprobación experimental de la dependencia de la constante dielectrica con la temperatura y el campo eléctrico externo aplicado en SrTiO₃.

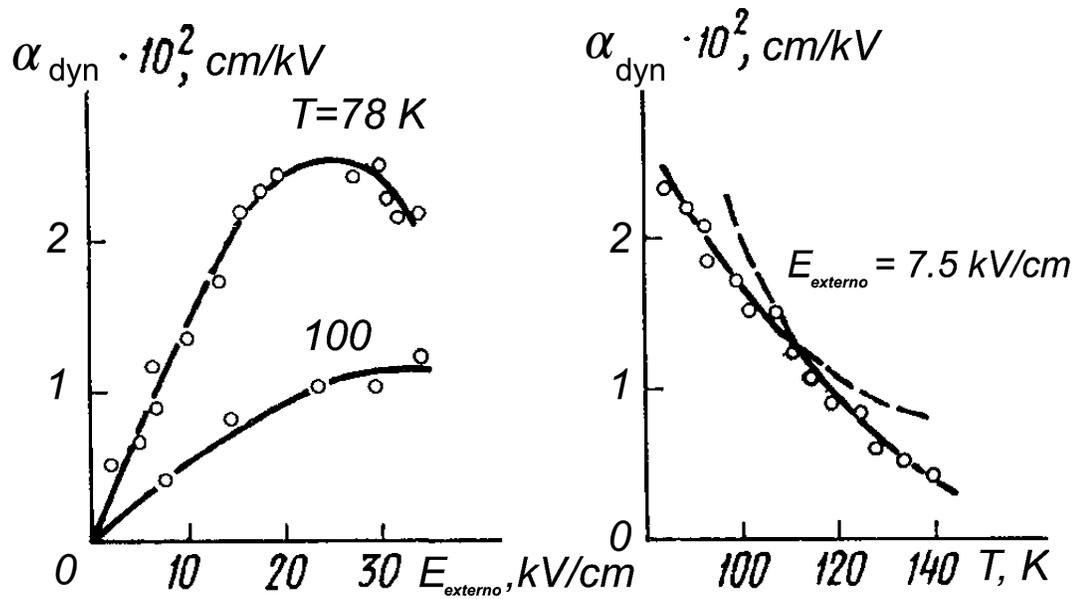


Figura 3.5: Dependencia experimental del coeficiente dinámico de la No-Linealidad del SrTiO_3 con el campo eléctrico constante aplicado a diferentes temperaturas.

de ser muy pequeño y entonces se puede considerar como una transición de segundo orden.

La figura 3.4 muestra la comprobación experimental de la dependencia de la constante dieléctrica con la temperatura y campo eléctrico externo con los siguientes parámetros: $T_c = 40$ K, $\epsilon_{00} = 2300$, $E_H = 14$ kV/cm, $\theta_F = 160$ K.

En la figura 3.5 se muestran los valores experimentales del coeficiente dinámico de no-linealidad α_{din} para SrTiO_3 en función de E_{externo} y T . Es interesante notar que en $T = 110$ K, existe un pliegue en la curva experimental $\alpha_{\text{din}}(T)$ el cual indica la presencia de una transición de fase estructural. Esta transición estructural no afecta de ninguna manera a otras características dieléctricas del SrTiO_3 . [4]

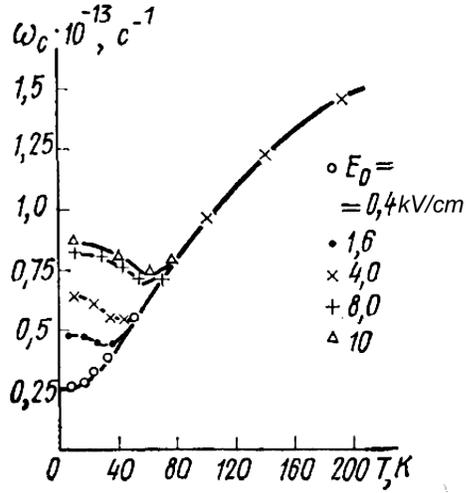


Figura 3.6: Frecuencia del modo ferroeléctrico cuando $k = 0$ en función de la temperatura y el campo E_0 .

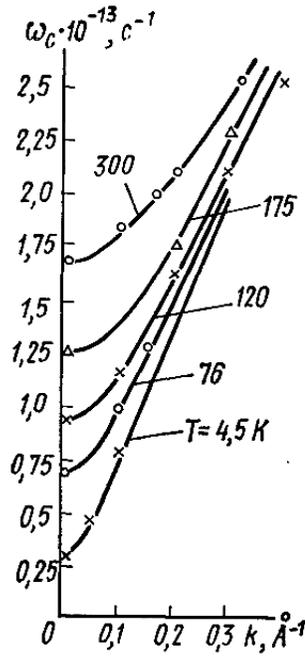


Figura 3.7: Dependencia de la frecuencia del modo óptico de SrTiO_3 con el número de onda a distintas temperaturas.

4

Modelo para la polarización no-lineal de ondas EM

Considerando la propagación no-lineal de ondas electromagnéticas en un medio paraeléctrico cristalino (SrTiO_3) a lo largo del eje OZ , la con la componente de campo eléctrico $E_x = E$. La no-linealidad dieléctrica en el SrTiO_3 se debe a propiedades no-lineales de la polarización provocada por el modo suave optico $\epsilon_0 P$, donde ϵ_0 es la constante dieléctrica. Las ecuaciones que describen la propagacion no-lineal de una onda electromagnetica en SrTiO_3 cristalino paraelectrico son:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial P}{\partial t} + \omega_T^2 \left(1 + \frac{P^2}{P_0^2}\right) P = \epsilon(0) \omega_T^2$$

$$\Delta E \equiv \frac{\partial E^2}{\partial y^2} + \frac{\partial E^2}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}$$

$$D \equiv \epsilon_0(E + P + \epsilon_\infty E) \approx \epsilon_0 P \quad (4.1)$$

sujetas a la condicion $\epsilon_\infty \leq 10 \ll \epsilon(0)$, donde ϵ_∞ es la permitividad de altas frecuencias. $P_0 \equiv \epsilon(0)E_0$, donde el parametro E_0 caracteriza el valor de la no-linealidad. A una temperatura $T = 80$ K, el valor de $E_0 = 60$ kV/cm. A temperaturas menores la no-linealidad incrementa, $E_0 \sim \epsilon(0)^{-3/2}$. La disipacion γ es minima a $T = 80$ K, $\gamma = 2 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$ y aumenta lentamente a diferentes temperaturas. A la temperatura $T = 110$ K, el SrTiO_3 presenta una transicion estructural, asi que las temperaturas cerca de este punto no son consideradas aqui.

Debido a la centrosimetria de los paraelectricos, la no-linealidad presente en las ecuaciones 4.1 es cubica, por lo tanto pueden exitarse los armonicos impares 3, 5,

7, La eficiencia de dicha multiplicacion de frecuencia es baja, asi que es mejor considerar el caso cuando existe un campo electrico de polarizacion, provocando que la no-linealidad dominante sea cuadratica, y la efectiva generacion de armonicos electromagneticos mas altos en SrTiO₃:

$$E = E_s + \tilde{E}$$

$$P = P_s + \tilde{P}$$

$$P_s(1 + \frac{P_s^2}{P_0^2}) = \varepsilon(0)E_s \quad (4.2)$$

P_s es la constante de polarizacion que corresponde al campo electrico de polarizacion E_s ; pero la influencia de la no-linealidad cubica puede ser esencial y relativamente mayor a temperaturas mas altas que $T > 100$ K, asi que las ecuaciones para variar lentamente las amplitudes de los armonicos electromagneticos incluyen ambas no-linealidades, la cubica y la cuadratica. Las ecuaciones 4.1 se reducen a la ecuacion para la parte variable de la polarizacion:

$$\Delta(\frac{\partial^2 \tilde{P}}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \omega_{T_s}^2 \tilde{P}) - \frac{\varepsilon(0)\omega_T^2}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{P}}{\partial t^2} = -3\frac{P_s}{P_0^2}\omega_T^2 \Delta(\tilde{P}^2) - \frac{1}{P_0^2}\omega_T^2 \Delta(\tilde{P}^3)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{E}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \tilde{E}}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{P}^2}{\partial t^2}$$

$$\omega_{T_s}^2 \equiv \omega_T^2(1 + 3\frac{\tilde{P}_s^2}{P_0^2}) \quad (4.3)$$

Buscando una solucion de la forma:

$$\tilde{E} = \frac{1}{2} \sum_{j=1,2,3,\dots} A_j(z, y) e^{i(\omega_j t - j k_1 z)} + c.c. \quad (4.4)$$

que satisfaga las ecuaciones cuando la no-linealidad es moderada, es decir, $|\tilde{E}| < E_s < E_0$, ($|\tilde{P}| < P_s < P_0$), en el caso estacionario de generacion de armonicos, se tiene que:

$$\frac{\partial A_j}{\partial z} + \frac{i}{2k_j} \frac{\partial^2 A_j}{\partial y^2} + i(k_j - j k_1) A_j + \Gamma_j A_j - 3i(N^{(3)} j j j |A_j|^2) + 2 \sum_{m \neq j} N^{(2)} m m j |A_m|^2 A_j =$$

$$\begin{aligned}
&= i \sum_{m < j} N^{(2)} j m A_{j-m} A_m + 2i \sum_{m > j} N^{(2)} j m A_{*m-j} A_m + i \sum_{m, p, j > m+p} N^{(3)} j m p A_{j-m-p} A_m A_p \\
&\quad + 3i \sum_{\substack{m, p, j < m+p \\ m, p \neq j}} j m p A_{*m+p-j} A_m A_p + 3i \sum_{m, p} N^{(3)} j m p A_{m+p+j} A_{*m} A_{*p} \quad (4.5)
\end{aligned}$$

con:

$$\begin{aligned}
\omega_j &\equiv j\omega_1 \\
k_j &\equiv \text{Re}(k(\omega_j)) > 0 \\
k(\omega_j) &= \frac{\omega_T}{c} \left(\frac{\varepsilon(0)\omega_j^2}{\omega_{T_s}^2 - \omega(\omega - i\gamma)} \right)^{\frac{1}{2}} \equiv k_j - i\Gamma_j \quad (4.6)
\end{aligned}$$

El grupo de ecuaciones 4.5 muestra la estructura basica para una lenta variacion de amplitudes $A_j(z, y)$. Aqui, (z, y) son las componentes longitudinal y transversal, ω_j son las frecuencias de los armonicos, k_j son sus numeros de onda correspondientes; $N_{jm}^{(2)} \approx E_s$ asi como $N_j^{(3)} mp$ son los coeficientes de la no-linealidad cuadratica y cubica respectivamente, y $\Gamma_j \approx \omega_j^2$ son los coeficientes de la disipacion. El cambio de fase entre el primer armonico y otros mas altos esta dado por $\Delta k_j \equiv k_j - jk_1$ y debe satirfacer la condicion $|\partial A_j / \partial z| \ll k_j |A_j|$.¹

Debido a la no-linealidad cubica, existe la **auto-accion o self-action** que limita la eficiencia de la generacion de altos armonicos en ausencia de un campo de polarizacion electrica E_s .

La pelicula de SrTiO₃ posee un espesor finito L_y ubicada a lo largo del eje OY . Entonces las condiciones en la frontera son:

$$\begin{aligned}
A_j(z = 0) &= 0 \quad j > 1 \\
A_j(y = 0, L_y) &= 0 \quad j \geq 1 \\
A_1(z = 0) &= A_{10} \exp\left(-\left(\frac{y - \frac{L_y}{2}}{y_0}\right)^6\right) M(y) \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Donde A_{10} es la amplitud maxima del pulso incidente, el cual, presenta una dependencia del tiempo $F_t(t)$ casi rectangular; el parametro y_0 determina el grosor del pulso incidente a lo largo de la coordenada transversal y . La longitud del cristal

¹Los coeficientes de la no-linealidad poseen estructura compleja y no son cosiderados aqui.

es L_z . La funcion $M(y)$ representa el posible enfoque del rayo incidente debido a que la permitividad de los materiales dielectricos laterales tanto en $y < 0$ como $y > L_y$ es mucho menor que la permitividad de SrTiO_3 , el campo electrico no penetra en estos materiales; sin embargo la dinamica no-lineal ocurre dentro de SrTiO_3 y no depende del espesor L_y pero si del grosor del rayo electromagnetico incidente. Debido a esto, no es necesario considerar la influencia de los bordes laterales, asi que se considera el caso sin reflexiones en la entrada ($z = 0$) y la salida ($z = L_z$) del cristal.

Si el enfoque del pulso incidente es producido por una antena circular de radio de curvatura R , la onda electromagnetica incidente gana un cambio de fase adicional:

$$-k_1\Delta(y) = -k_1\left(R - \left(z_F^2 + \left(y - \frac{L_y}{2}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}\right) \quad (4.8)$$

donde z_F es la distancia al punto focal de la antena $z_F = \left(R^2 - \left(\frac{L_y}{2}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}$, k_1 es el numero de onda del primer armonico, correspondiente a la amplitud de entrada en el plano $z = 0$.

5

Generación de altos armónicos

La generación efectiva de altos armónicos puede lograrse bajo campos eléctricos de polarización relativamente bajos. La frecuencia de la onda electromagnética de entrada debe ser 10 - 50 veces menor que la frecuencia del modo suave. Gracias al enfoque de la onda electromagnética (el primer armónico) producido por la antena circular, se pueden excitar armónicos mas altos con un incremento significativo en la eficiencia y existe la posibilidad de seleccionar el numero apropiado de armónico (3, 4, ..., 12) cuando el valor del campo eléctrico de polarización E_s , el radio de curvatura de la antena R y la longitud del cristal L_z se escogen adecuadamente. Las amplitudes incidentes son esencialmente mas pequeñas comparadas con el caso de «auto-acción» debido a la influencia puramente de la no-linealidad cubica. Cuando la generación de altos armónicos se lleva a cabo a diferentes temperaturas, existe la posibilidad de cubrir la parte mas baja del rango de frecuencias de THz, desde los 0.3 THz (a bajas temperaturas) hasta los 2.5 THz a temperaturas mas altas.

Los valores típicos del campo eléctrico E_s y las amplitudes de entrada para el primer armónico son:

$$\frac{E_s}{E_0} = 0.2, \dots, 0.5$$

$$\frac{A_{10}}{E_0} = 0.02, \dots, 0.1$$

y por lo tanto $P_s \approx \varepsilon(0)E_s$.

En valores mas altos del campo eléctrico, polarización P_s se satura y aparece la no-linealidad cuadrática. ¹ Por el contrario, para campos mas bajos $E_s/E_0 < 0.2$,

¹También tiene lugar la disipación no lineal, la cual no es considerada aquí.

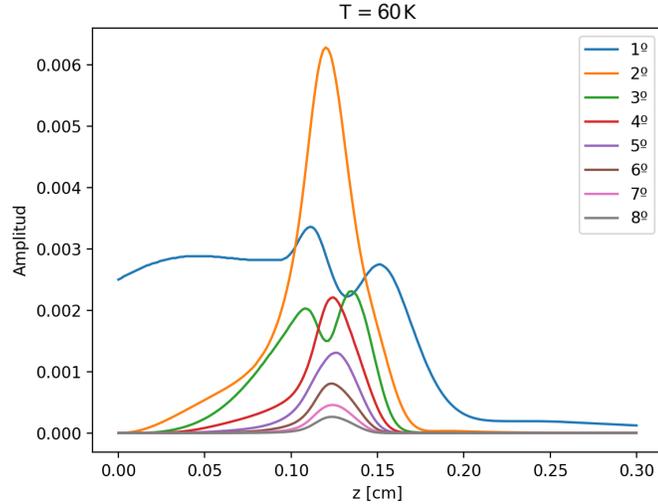


Figura 5.1: Generación de altos armónicos a 60K de temperatura. El armónico dominante es el segundo.

la no-linealidad cuadrática es pequeña y la eficiencia de la generación de armónicos mas altos es baja, aun cuando se aplica un enfoque incidente. Los valores de las frecuencias de los primeros armónicos son $\omega_1 = 10^{11}$, ..., $6 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$.²

5.1. Simulación numérica

Los resultados obtenidos por simulación numérica se muestran en las figuras 5.1 - 5.4

La simulación se llevo a cabo con atención en la distribución de los armónicos en el centro $y = L_y/2$ del cristal no-lineal. Los valores del campo eléctrico variable \tilde{E} están relacionados con el campo eléctrico no-lineal característico E_0 .³

En la figura 5.1, con $T = 60\text{K}$, $\omega_1 = 4 \cdot 10^{11}\text{s}^{-1}$, la amplitud del primer armónico es $\frac{A}{E_0} = 0.05$, la anchura inicial $y_0 = 0.08\text{cm}$ y el radio de curvatura de la antena $R = 0.15\text{cm}$; se puede apreciar como el segundo armónico es dominante.

En la figura 5.2, con $T = 77\text{K}$, $\omega_1 = 2 \cdot 10^{11}\text{s}^{-1}$, la amplitud del primer armónico

²Las frecuencias correspondientes a los armónicos incidentes mas altos, están en la parte mas baja del rango de terahertz.

³Se ha considerado en todos los casos $\frac{E_s}{E_0} = 0.3$.

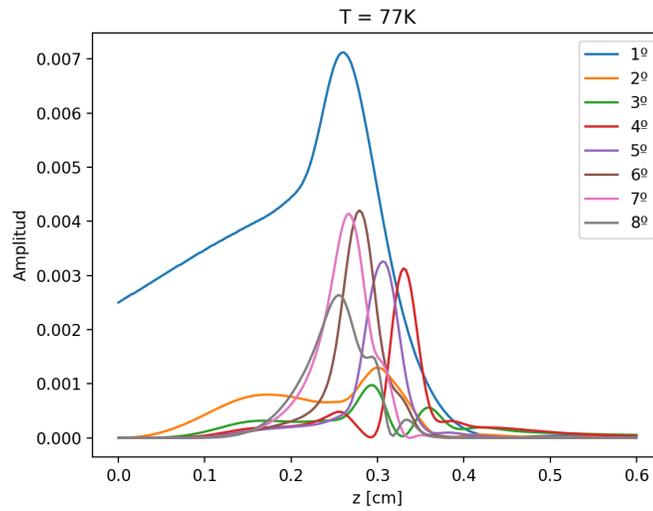


Figura 5.2: Generación de altos armónicos a 77K de temperatura. Después del primer armónico, los armónicos mas dominantes son el 6^o y 7^o.

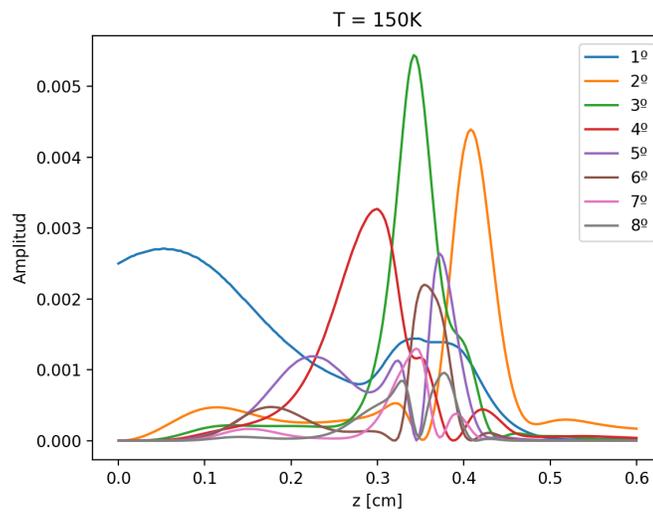


Figura 5.3: Generación de altos armónicos a 150K de temperatura. Domina el tercer armónico, seguido por el segundo y cuarto.

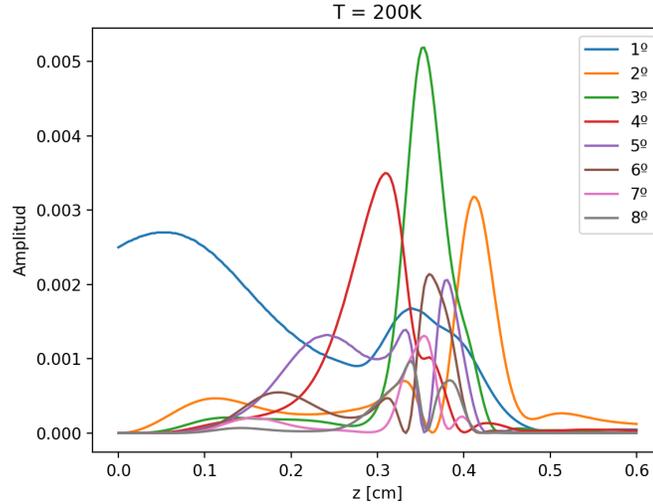


Figura 5.4: Generación de altos armónicos a 200K de temperatura. Nuevamente domina el tercer armónico y le siguen el segundo y cuarto.

es $\frac{A}{E_0} = 0.05$, la anchura inicial $y_0 = 0.2\text{cm}$ y el radio de curvatura de la antena $R = 0.35\text{cm}$; se puede apreciar como el primer armónico es dominante, sin embargo, tanto el sexto como el séptimo armónico también muestran cierta relevancia y podrían ser aprovechados de igual forma, incluso los armónicos 4, 5 y 8.

En la figura 5.3, con $T = 150\text{K}$, $\omega_1 = 5 \cdot 10^{11}\text{s}^{-1}$, la amplitud del primer armónico es $\frac{A}{E_0} = 0.05$, la anchura inicial $y_0 = 0.2\text{cm}$ y el radio de curvatura de la antena $R = 0.4\text{cm}$; se puede apreciar como el tercer armónico es dominante y los armónicos 2 y 4 también presentan una intensidad considerable.

En la figura 5.4, con $T = 200\text{K}$, $\omega_1 = 6 \cdot 10^{11}\text{s}^{-1}$, la amplitud del primer armónico es $\frac{A}{E_0} = 0.05$, la anchura inicial $y_0 = 0.2\text{cm}$ y el radio de curvatura de la antena $R = 0.4\text{cm}$; se puede apreciar como nuevamente domina el tercer armónico y los armónicos 2 y 4 le tienen intensidades considerables.

Los cristales paraeléctricos como el $SrTiO_3$ pueden ser utilizados para la generación de altos armónicos en la parte mas baja del rango de frecuencias de TeraHertz y por debajo del la frecuencia de modo suave bajo niveles moderados de enfriamiento ($T = 50 - 200\text{K}$). Para obtener la no-linealidad cuadrática es necesario aplicar un campo electrico externo así como aplicar el enfoque inicial para el primer armonico. Cuando existe enfoque es posible ajustar la eficiencia de generación para exitar el armónico apropiado. El la parte mas baja del rango de temperaturas ($T 60\text{K}$) existen

altos niveles de no-linealidad, mientras que a temperaturas mas altas ($T > 120\text{K}$) la frecuencia de modo suave es mas alta y el rango más amplio de frecuencias puede ser utilizado para la multiplicación de la frecuencia.

Bibliografía

- [1] Introduction to Solid State Physics. Charles Kittel. Wiley 2005. 8th ed.
- [2] Principles and applications of ferroelectrics and related materials. Lines M.E., Glass A.M. Clarendon Press 1997.
- [3] Physics of Ferroelectrics: A Modern Perspective. Rabe K.M., Ahn C.H., Triscone J.-M. (eds.). Springer 2007. Topics in applied physics 105.
- [4] Сегнетоэлектрики в технике СВЧ. Под редакцией ВЕНДИКА О. Г. Советское радио 1979.

Índice de figuras

3.1.	Dependencia de la constante dieléctrica ε con respecto a la intensidad de campo eléctrico aplicado y la temperatura del Titanato de Estroncio (SrTiO_3)	8
3.2.	Dependencia de las pérdidas electromagnéticas $\log(e''/e')$ de SrTiO_3 - BaTiO_3 con la temperatura a una frecuencia $f = 10\text{GHz}$. Las líneas verticales discontinuas muestran la temperatura de Curie y en $x = 0$ no hay fase de transición.	8
3.3.	Dependencia de la constante dieléctrica con la temperatura para diferentes ferroeléctricos. 1.) BaTiO_3 . 2.) BaSrTiO_3 . 3.) SrTiO_3	9
3.4.	Comprobación experimental de la dependencia de la constante dieléctrica con la temperatura y el campo eléctrico externo aplicado en SrTiO_3	10
3.5.	Dependencia experimental del coeficiente dinámico de la No-Linealidad del SrTiO_3 con el campo eléctrico constante aplicado a diferentes temperaturas.	11
3.6.	Frecuencia del modo ferroeléctrico cuando $k = 0$ en función de la temperatura y el campo E_0	12
3.7.	Dependencia de la frecuencia del modo óptico de SrTiO_3 con el número de onda a distintas temperaturas.	12
5.1.	Generación de altos armónicos a 60K de temperatura. El armónico dominante es el segundo.	18
5.2.	Generación de altos armónicos a 77K de temperatura. Después del primer armónico, los armónicos más dominantes son el 6º y 7º.	19
5.3.	Generación de altos armónicos a 150K de temperatura. Domina el tercer armónico, seguido por el segundo y cuarto.	19
5.4.	Generación de altos armónicos a 200K de temperatura. Nuevamente domina el tercer armónico y le siguen el segundo y cuarto.	20