

COMPORTAMIENTO DEL KDP SOMETIDO A PRESION

J.A. Martín-Pereda y C. Llanos
Departamento de Electrónica Cuántica.
ETSI. Telecomunicación. Universidad Politécnica
Madrid.

INTRODUCCION

El fosfato dihidrogenado potásico (KDP) es un cristal de tipo ferroeléctrico, cuya estructura en fase apolar es tetragonal, para convertirse en ortorrómbica a temperatura inferior a la de Curie. Los trabajos experimentales de aplicación de presión hidrostática (1)-(3), han dado lugar a conclusiones interesantes que justifican la necesidad de proseguir las investigaciones en este sentido. El efecto producido por la presión sobre la temperatura de transición ferroeléctrica ha sido descrito cualitativamente en función de las variaciones de los parámetros más importantes definidos por los enlaces del hidrógeno, donde los protones se mueven, en la fase paraeléctrica, entre dos mínimos de potencial dentro del enlace con los oxígenos contiguos. La transición ferroeléctrica es provocada por una ordenación de los protones en el enlace, que se acoplan con una vibración de las subredes $K-PO_4$; la reducción de uno de los modos acoplados resultantes, con la disminución de la temperatura, es la responsable de la transición. Para valores elevados de la presión aplicada, se anula la transición ferroeléctrica. No se han efectuado estudios analíticos que establezcan el comportamiento óptico del cristal en condiciones como las indicadas. Solamente algunos trabajos han sido publicados para otros tipos de cristales con estructura cristalina centrada en las caras y tomando como base aproximaciones no armónicas, lo que da lugar a una complejidad tal que hacen el análisis prácticamente inviable.

ANALISIS DE LA INFLUENCIA DE LA PRESION

Para hacer el cálculo del comportamiento del cristal se ha desarrollado un modelo matemático del KDP, cuyas constantes de fuerza han sido calculadas siguiendo una aproximación armónica, sobre un modelo de corto alcance del tipo de Born-von Karman, modificado de acuerdo con los enlaces químicos del la molécula del KDP, teniendo en cuenta las masas atómicas y las distancias interatómicas, de forma similar a

lo realizado previamente por uno de nosotros para el caso del cuarzo(4).

Puesto que la estructura cristalina del KDP en la fase paraeléctrica indica que el enlace O-H-O, que es el fundamentalmente afectado por la presión, como demostraron los experimentos realizados, se encuentra prácticamente en el plano xy, se han elegido las direcciones de los ejes x e y para someter al cristal a una compresión. Este es el caso de mayor influencia en el comportamiento óptico del cristal y además permite dejar libre de elementos de presión al eje z, utilizado para la modulación láser, por ser el eje óptico del KDP.

El comportamiento elástico del cristal en función de sus simetrías cristalinas y de las constantes de elasticidad determinadas experimentalmente, permite cuantificar la deformación producida, comprobándose una compresión en las direcciones de los ejes x e y de valor relativo $14,6 \cdot 10^{-6} P$ (P expresada en bar). Por consiguiente se sigue manteniendo su estructura tetragonal y su grupo de simetría, ya que la extensión según el eje z es de un valor relativo de $13,4 \cdot 10^{-6} P$. No hay, en consecuencia alteración en la distribución de modos de vibración ni en sus condiciones de observación.

Cuando se somete al cristal deformado por la presión a excitación óptica para obtener el modo blando de vibración, responsable de la transición ferroeléctrica, se pueden determinar las frecuencias de vibración en la nueva situación. Dando valores variables a la presión aplicada, mediante un programa de ordenador desarrollado a tal efecto (5) se van obteniendo la frecuencias de acuerdo con la gráfica de la Fig. 1 .

Los valores de frecuencia calculados, permiten establecer la siguiente relación:

$$f = 80 + 0,702 P \quad (\text{cm}^{-1})$$

donde P viene en Kbar.

Por otra parte, cuando el efecto de la presión sobre la longitud del enlace O-H-O es tal que impida el desplazamiento del protón entre los extremos de mínimo potencial se anula la transición ferroeléctrica, lo cual se produce para una presión de 16,3 Kbar, valor en buena concordancia con el obtenido experimentalmente(3) de 17 kBar.

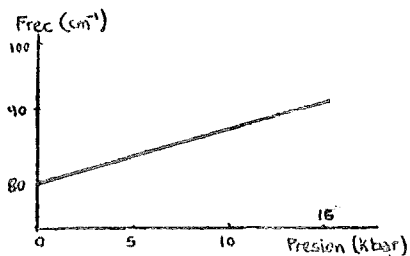


FIG. 1

BIBLIOGRAFIA

- (1) B. Morosin & G.A. Samara. *Ferroelectrics*. V 3, 49.1971.
- (2) R. Blinc, et al. *Solid State Comm.* V10, 387. 1972.
- (3) G.A. Samara. *Ferroelectrics*. V 22, 925. 1979.
- (4) J.A. Martín-Pereda et al. *Physics Letters*. V 42A, 442, 1973.
- (5) C. Llanos. Tesis Doctoral ETSIT. UPM.