

Trabalho

Título em Português:	Índice de Refração em Materiais para Lasers: Validação da Equação de Gladstone-Dale
Título em Inglês:	refractive index in laser materials: validation of the gladstone-dale equation.
Autor:	Davi Santoro de Oliveira
Instituição:	Universidade de São Paulo
Unidade:	Instituto de Física de São Carlos
Orientador:	Tomaz Catunda
Área de Pesquisa / SubÁrea:	Áreas Clássicas de Fenomenologia e suas Aplicações
Agência Financiadora:	USP - Programa Unificado de Bolsas

Índice de Refração em Materiais para Lasers: Validação da Equação de Gladstone-Dale

Davi Santoro de Oliveira

Prof. Dr. Tomaz Catunda

Instituto de Física de São Carlos / Universidade de São Paulo

davi.santoro@usp.br

Objetivos

O objetivo deste trabalho foi investigar a validade da equação de Gladstone-Dale para o cálculo do índice de refração de materiais para lasers a partir de sua composição, bem como estimar a variação do índice de refração com a dopagem

Métodos e Procedimentos

A metodologia do trabalho utilizou uma abordagem comparativa. Primeiramente o índice de refração (n), foi calculado teoricamente utilizando a equação de Gladstone-Dale, que relaciona o índice de refração com a densidade do material (ρ) e a constante de Gladstone-Dale (K_{GD}) característica do material, por meio da seguinte expressão

$$\frac{n-1}{\rho} = K_{GD} = \sum m_i k_i \quad (1)$$

Na qual, k_i e m_i correspondem a constante de Gladstone-Dale e fração mássica do i -ésimo constituinte.

Quanto ao cálculo da variação do índice de refração com a dopagem, utilizou a forma diferencial da equação de Gladstone-Dale Eq. (2).

$$dn = \rho dk + k d\rho \quad (2)$$

Os valores de densidade, constantes K_{GD} e massas molares foram obtidos de tabelas disponíveis na literatura [1, 2], enquanto que os valores experimentais foram extraídos de [4].

Resultados

Os valores de índice de refração calculados (n_{calc}) e experimentais (n_{exp}), encontram-se registrados na Tabela 1. Enquanto que os valores da variação do índice de refração com dopagem calculado (dn_{calc}) e experimental (dn_{exp}), estão presentes na Tabela 2.

Tabela 1: Índice de refração de materiais para lasers: Comparação entre os valores calculados (n_{calc}) pela Eq.1 e os valores experimentais (n_{exp}).

Composto	n_{calc}	n_{exp}	Erro (%)
$Y_3Al_5O_{12}$ (YAG)	1,845	1,865	1,07
$Y_3Ga_5O_{12}$	1,984	1,948	1,84
$LiSrAlF_6$	1,411	1,401	0,71
$LiCaAlF_6$	1,403	1,390	0,94
$La_2Be_2O_5$	1,971	1,987	0,81
$YLiF_4$	1,518	1,462	3,83
YVO_4	2,042	2,020	1,09

Tabela 2: Comparação entre os valores calculados (dn_{calc}) pela Eq.2 e experimentais (dn_{exp}) para variação do índice de refração com a dopagem.

Composto	$\frac{dn_{calc}}{dc}(10^{-3})$	$\frac{dn_{exp}}{dc}(10^{-3})$
YAlO ₃ :Nd	1,25 (at%) ⁻¹	1,2 (at%) ⁻¹
Y ₃ Al ₅ O ₁₂ :Nd	0,88 (at%) ⁻¹	0,44 (at%) ⁻¹
Al ₂ O ₃ :Cr	6 (wt%) ⁻¹	5 (wt%) ⁻¹
CaF ₂ :Nd	3,24 (wt%) ⁻¹	2,34 (wt%) ⁻¹

Conclusões

Os resultados obtidos indicam que a equação de Gladstone-Dale demonstrou uma validade considerável na previsão do índice de refração a partir da composição dos materiais, com um erro médio inferior a 4% em relação aos dados experimentais. Por outro lado, para a estimativa da variação do índice de refração em função de pequenas dopagens, a equação apresentou limitações significativas, resultando em desvios de até 50%. Tais desvios sugerem que a equação, embora robusta para a previsão baseada na composição elementar, não se aplica de forma direta para modelar os efeitos complexos da dopagem na estrutura dos materiais.

Os autores declaram não haver conflito de interesses.

Referências

1. MANDARINO, J. A. The Gladstone-Dale relationship; Part IV, The compatibility concept and its application. **The Canadian Mineralogist**, v. 19, n. 3, p. 441-450, 1981.
2. CRC Press. Handbook of chemistry and physics. 78th ed. Boca Raton: CRC Press; 1997-1998.
3. GAUME, Romain. **A crystal chemistry approach for high-power ytterbium doped solid-state lasers. Diffusion-bonded crystals and new crystalline hosts**. 2002. Tese (Doutorado em Ciências Químicas) – Chimie ParisTech, Paris, 2002.
4. WEBER, M. J. **CRC Handbook of Laser Science and Technology**. Boca Raton: CRC Press, 1981-1994. 5 v.

Refractive Index in Laser Materials: Validation of the Gladstone-Dale Equation.

Davi Santoro de Oliveira

Prof. Dr. Tomaz Catunda

Institute of Physics of São Carlos/University of São Paulo

davi.santoro@usp.br

Objectives

The objective of this work was to investigate the validity of the Gladstone-Dale equation for calculating the refractive index of laser materials from their composition, as well as to estimate the variation of the refractive index with doping.

Materials and Methods

The methodology of the work used comparative approach. First, the refractive index (n) was theoretically calculated using the Gladstone-Dale equation, which relates the refractive index to the material's density (ρ) and the characteristic Gladstone-Dale constant (KGD) of the material, through the following expression

$$\frac{n-1}{\rho} = K_{GD} = \sum m_i k_i \quad (1)$$

Where k_i and m_i correspond to the Gladstone-Dale constant and the mass fraction of the i -th constituent. Regarding the calculation of the refractive index variation with doping, the differential form of the Gladstone-Dale equation was used, Eq. (2) :

$$dn = \rho dk + k d\rho \quad (2)$$

The values for density, KGD constants, and molar masses were obtained from tables available in the literature [1, 2], while the experimental values were extracted from [4].

Results

The calculated refractive index values (n_{calc}) and experimental values (n_{exp}) are recorded in Table 1. Whereas the calculated (dn_{calc}) and experimental (dn_{exp}) refractive index variation values with doping are present in Table 2.

Table 1: Refractive index of laser materials: Comparison between calculated values (n_{calc}) by Eq. 1 and experimental values (n_{exp}).

Compound	n_{calc}	n_{exp}	Error(%)
Y ₃ Al ₅ O ₁₂ (YAG)	1,845	1,865	1,07
Y ₃ Ga ₅ O ₁₂	1,984	1,948	1,84
LiSrAlF ₆	1,411	1,401	0,71
LiCaAlF ₆	1,403	1,390	0,94
La ₂ Be ₂ O ₅	1,971	1,987	0,81
YLiF ₄	1,518	1,462	3,83
YVO ₄	2,042	2,020	1,09

Table 2: Comparison between calculated values (dn_{calc}) by Eq. 2 and experimental values (dn_{exp}) for refractive index variation with doping.

Compound	$\frac{dn_{calc}}{dc} (10^{-3})$	$\frac{dn_{exp}}{dc} (10^{-3})$
YAlO ₃ :Nd	1,25 (at%) ⁻¹	1,2 (at%) ⁻¹

Y ₃ Al ₅ O ₁₂ :Nd	0,88 (at%) ⁻¹	0,44 (at%) ⁻¹
Al ₂ O ₃ :Cr	6 (wt%) ⁻¹	5 (wt%) ⁻¹
CaF ₂ :Nd	3,24 (wt%) ⁻¹	2,34 (wt%) ⁻¹

Conclusions

The obtained results indicate that the Gladstone-Dale equation demonstrated considerable validity in predicting the refractive index from the composition of materials, with a mean error of less than 4% compared to experimental data.

On the other hand, for estimating the refractive index variation as a function of low doping levels, the equation showed significant limitations, resulting in deviations of up to 50%.

These deviations suggest that the equation, although robust for prediction based on elemental composition, does not directly apply to modeling the complex effects of doping on the materials' structure.

The authors declare no conflict of interest.

References

1. MANDARINO, J. A. The Gladstone-Dale relationship; Part IV, The compatibility concept and its application. **The Canadian Mineralogist**, v. 19, n. 3, p. 441-450, 1981.
2. CRC Press. Handbook of chemistry and physics. 78th ed. Boca Raton: CRC Press; 1997-1998.
3. GAUME, Romain. **A crystal chemistry approach for high-power ytterbium doped solid-state lasers. Diffusion-bonded crystals and new crystalline hosts**. 2002. Ph.D. Dissertation (or Thesis) in Chemical Sciences – Chimie ParisTech, Paris, 2002.
4. WEBER, M. J. **CRC Handbook of Laser Science and Technology**. Boca Raton: CRC Press, 1981-1994. 5 v.