

UTILIZAÇÃO DE FIBRAS MONOCRISTALINAS DE NIOBATO DE LÍTIO PARA APLICAÇÃO EM ESPECTROPOLARÍMETRO SOLAR

Guilherme Noronha da Silva (UNIFESP, Bolsista PIBIC/CNPq, Aluno do Bacharelado em Ciência e Tecnologia)

E-mail: noronha459@gmail.com

Franciele Carlesso (DIHPA/INPE, Coorientadora, Pesquisadora DIHPA/INPE)

E-mail: franciele.carlesso@inpe.br

Ana Maria do Espírito Santo (ICT/UNIFESP, Coorientadora, Professora ICT/UNIFESP)

E-mail: amesanto@unifesp.br

Luis Eduardo Antunes Vieira (DIHPA/INPE, Coorientador, Pesquisador DIHPA/INPE)

E-mail: luis.vieira@inpe.br

RESUMO

Este trabalho atua como componente da missão GSST (*Galileo Solar Space Telescope*), cujo objetivo primário é entender a evolução das estruturas magnéticas das camadas externas do Sol. A técnica mais confiável para medições de campo magnético solar é baseada em espectropolarimetria, na qual a luz é avaliada em termos de polarização e comprimento de onda. O espectropolarímetro demonstrador de conceito Galileo consiste em um telescópio Ritchey-Chrétiende, um pacote de polarização, um interferômetro Fabry-Pérot (Etalon), filtros de banda estreita, óptica adaptativa e câmeras sCMOS. No entanto, o Fabry-Pérot (Etalon) requer um alto tempo de varredura espectral em relação aos eventos solares rápidos. Uma forma de reduzir as incertezas seria diminuir o tempo de resposta da varredura espectral. Um componente baseado em gravações holográficas no niobato de lítio dopado com ferro, $\text{LiNbO}_3:\text{Fe}$, está em desenvolvimento para atuar como um filtro no espectropolarímetro. Devido às restrições de acesso ao laboratório na pandemia de Covid-19, optou-se pela análise das propriedades estruturais e eletrônicas do niobato de lítio com diferentes dopantes incluindo o mapeamento das possíveis alternativas para a simulação das propriedades do LiNbO_3 . Inicialmente foram consideradas algumas alternativas como VASP, CASTEP e Quantum Espresso (QE). O QE foi escolhido por ser estruturado como um conjunto de pacotes executáveis, com códigos abertos, que possibilitam a otimização da estrutura molecular, o cálculo de propriedades como densidade de estados, estrutura de bandas e dinâmica molecular, também é possível obter diversas informações básicas sobre os níveis de energia e estrutura do material através do método de campo autoconsistente, vale ressaltar que, as informações básicas para a realização dos cálculos do material em análise, são fornecidas por meio de códigos executáveis de pseudopotenciais dos elementos individuais que constituem o material. Para auxiliar na manipulação das estruturas, foi implementado junto ao QE a interface gráfica, Burai 1.3, que tem como diferencial a possibilidade de manipulação da estrutura 3D do material de análise, e também a útil função de agregar os pacotes executáveis de cálculos e pseudopotenciais do QE, diminuindo consideravelmente a necessidade de trabalhar direto com as linhas de código. Na fase atual do trabalho foi construída a estrutura do cristal de LiNbO_3 , possibilitando o teste das funcionalidades de cálculo, manipulação e otimização do QE.