



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

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

Guilherme Noronha da Silva

Relatório de iniciação científica do
programa PIBIC, orientado pela Dra.
Franciele Carlesso, Dra. Ana Maria do
Espírito Santo e Dr. Luis Eduardo
Antunes Vieira.

INPE

São José dos Campos 2021

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-Chrétien, 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 realizada a instalação de um modelo pronto da estrutura do cristal de LiNbO_3 , possibilitando o teste das funcionalidades de cálculo, manipulação e otimização do QE.

LISTA DE FIGURAS

1.1. Diagrama de blocos simplificado do espectropolarímetro demonstrador de conceito.....	6
2.1. Célula unitária do NL.....	7
2.2. Simetria planar no eixo C.....	7
2.3. Diagrama de Fases do NL.	8
2.4. Desenho esquemático da Técnica Czochralski.....	10
2.5. Esquema básico do μ -PD.....	7
3.1. Célula unitária do Silício no Burai.	12
4.1. Estrutura do NL.	14
4.2. Posição inicial (esquerda) e final (direita) dos átomos.....	14
4.3. Estrutura de bandas gerada.	15

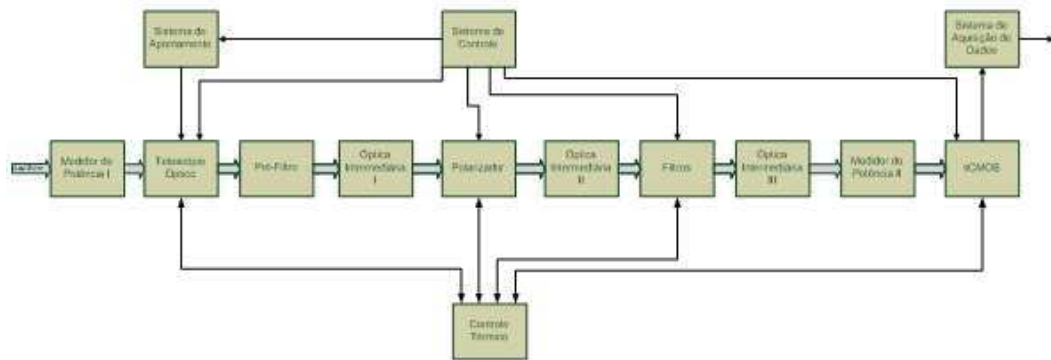
SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
1 INTRODUÇÃO.....	5
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
2.1 Niobato de Lítio: Propriedades e Crescimento Cristalino.....	6
2.2 Métodos de crescimento cristalino.....	9
2.3 Análise computacional e Simulações.....	9
3 PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES.....	11
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	13
5 SEMINÁRIOS.....	16
5.1 Seminário 1: Niobato de Lítio e Formas de Crescimento.....	16
5.2 Seminário 2: Análise Computacional via Quantum Espresso.....	16
6 CONCLUSÃO.....	17
7 REFERÊNCIAS.....	18

1. INTRODUÇÃO

O objetivo primário da missão GSST (Galileo Solar Space Telescope) é entender a evolução das estruturas magnéticas das camadas externas do Sol. A espectropolarimetria é uma técnica amplamente utilizada para avaliar a luz em termos de comprimento de onda e polarização. Na primeira fase do projeto a Divisão de Geofísica Espacial (DIDGE/INPE) desenvolveu com sucesso um conceito de prova (Figura 1) denominado demonstrador de conceito (DC). Esse é composto por um telescópio Ritchey-Chrétien, um pacote de polarização, um interferômetro Fabry-Pérot Etalon, filtros de banda estreita, óptica adaptativa e câmeras sCMOS. No entanto, a varredura em comprimento de onda torna o tempo de resposta relativamente alto para a aquisição das imagens com a resolução que atenda aos requisitos. Atualmente, o grupo utiliza cristais (niobato de lítio dopado com ferro - $\text{LiNbO}_3:\text{Fe}$) adquiridos comercialmente no desenvolvimento de um filtro óptico de seleção de alta resolução espectral com base em grades holográficas de volume (VHG). O projeto desenvolvido pelo grupo GSST tem o objetivo de reduzir o tempo de resposta do instrumento. Fatores como a presença de defeitos cristalinos, presença de contaminantes e distribuição do dopante podem influenciar o processo de gravação das grades volumétricas holográficas para criar os filtros. O estado de oxidação da amostra também tem efeito no processo de fixação da rede, ou seja, na eficiência de difração da rede fixada. Nesse contexto, este projeto de iniciação científica teve por objetivo estudar os parâmetros e propriedades do niobato de lítio. Devido às restrições de acesso ao laboratório na pandemia de Covid-19, optou-se pela revisão bibliográfica 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 .

Figura 1.1. Diagrama de blocos simplificado do espectropolarímetro demonstrador de conceito



Fonte: VIEIRA et al., 2016

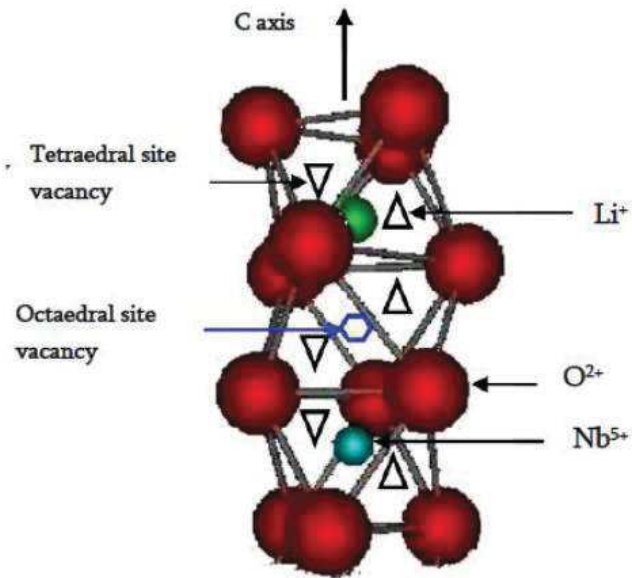
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Niobato de Lítio

O Niobato de lítio (NL) é um material ferroelétrico cujas propriedades são extremamente úteis para aplicações ópticas, acústicas e holográficas, por exemplo (ALIBART *et al.*, 2016). O NL não é um material de ocorrência natural, sendo que seu crescimento cristalino depende de métodos e condições bem específicas para acontecer. De acordo com Oswaldo *et al.* (2020), no final de 1970, o NL foi de grande importância para o desenvolvimento de dispositivos baseados em ondas acústicas de superfície, ficando atrás apenas do quartzo na categoria de materiais piezoelétricos monocristalinos.

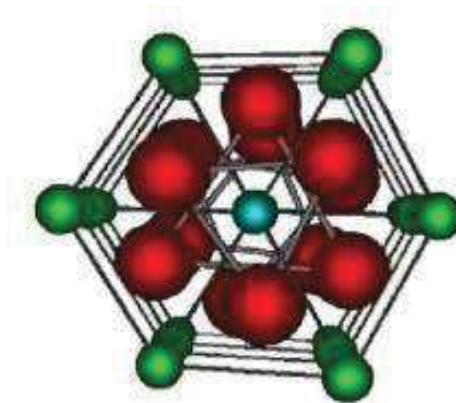
Em relação a sua estrutura, abaixo do ponto Curie (caráter ferroelétrico), o niobato de lítio apresenta uma célula unitária hexagonal romboédrica (DANIELYAN, 2020), onde o lítio e o nióbio se encontram distribuídos entre camadas planares de oxigênio, sendo que, pode-se observar uma simetria planar no eixo C (DANIELYAN, 2020), a estrutura pode ser observado na Figura 2.1 e na Figura 2.2. O comportamento ferroelétrico do LN depende do arranjo não centrossimétrico dos íons constituintes e seus elétrons correspondentes (em baixa temperatura) (OSWALDO *et al.*, 2020).

Figura 2.1. Célula unitária do NL.



Fonte: Danielyan, (2020).

Figura 2.2. Simetria planar no eixo C.



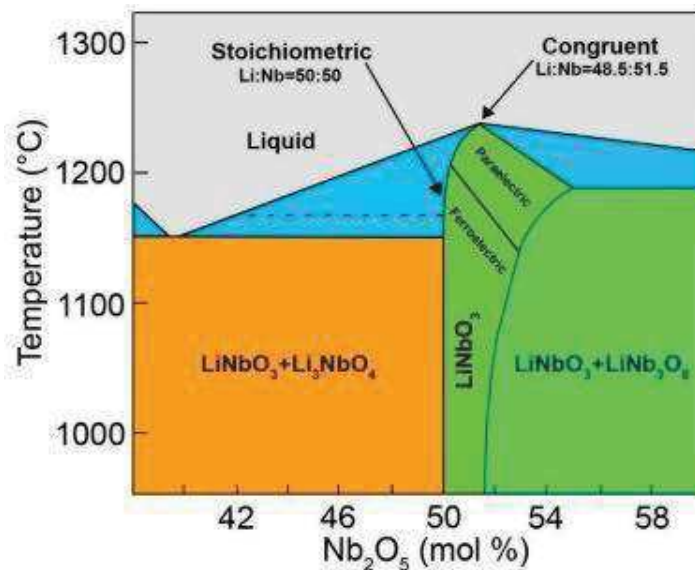
Fonte: Danielyan, (2020).

A concentração de defeitos pontuais, apontados na Figura 2.1, é determinante nas propriedades do cristal. As vacâncias (tanto nos sítios tetraédricos, quanto nos octaédricos) são de extrema importância para a realização de processos de dopagem com outros elementos. Para aplicações onde deseja-se alterar a resistência ao dano óptico, por exemplo, a dopagem com óxido de magnésio é útil devido sua efetividade nessa característica (ALIBART *et al.*,

2016).

A ferroeletricidade pode ser definida como uma característica baseada em uma polarização elétrica espontânea reversível através da aplicação de um campo elétrico externo (SAID; SABRI; SALLEH, 2017). A polarização elétrica está atrelada diretamente à temperatura do material, sendo que altas temperaturas podem causar mudanças no momento magnético intrínseco do material, que é o fator chave para que a ferroeletricidade ocorra. A temperatura na qual o material perde suas propriedades ferroelétricas e magnéticas é denominado temperatura Curie ou também Ponto Curie. O ponto Curie não depende apenas da temperatura, mas também da composição do material, que no caso do NL, será determinado em relação ao teor de Nb_2O_5 e LiO_2 , na composição, isto pode ser observado no diagrama de fases apresentado na Figura 2.3.

Figura 2.3. Diagrama de Fases do NL.



Fonte: Oswaldo *et al.* (2020)

O diagrama de fases é constituído pela temperatura no eixo vertical e pela composição de Nb_2O_5 e LiO_2 no eixo horizontal, sendo que o material só atinge a composição que apresenta ferroeletricidade em uma faixa específica de concentração. É possível perceber também através do diagrama, o quanto a temperatura de Curie (aproximadamente 150 °C) varia com composição da solução sólida (VOLK; WÖHLECKE, 2008).

O NL exibe uma mudança espontânea de polarização em função da temperatura, efeito piroelétrico. A relação entre a mudança de temperatura, ΔT e a mudança na polarização espontânea, ΔP , é linear (WEIS; GAYLORD, 1985). O NL é um material dielétrico, ou seja, ele naturalmente não permite a livre circulação de cargas elétricas (PALATNIKOV *et al.*, 2013; WEIS; GAYLORD, 1985). Geralmente, vários mecanismos ou efeitos de polarização estão relacionados à permissividade e em geral ocorrem em materiais dielétricos (DANIELYAN, 2020).

2.2. Técnicas de Crescimento

Cristais LN são viáveis em geometrias como bulk (volumétrico) e como guias de ondas (fibras). O cristal volumétrico clássico é comumente crescido por métodos convencionais como Czochralski ou Bridgman. O crescimento a partir da fusão é amplamente aplicado na produção em massa ou em laboratório devido à qualidade estrutural e química. Os métodos exigem um conhecimento adequado do diagrama de fases e principalmente das curvas *liquidus versus solidus*. Neste trabalho serão abordados dois métodos considerados adequados para a realização da pesquisa: o método Czochralski e o Micro-Pulling Down (μ -PD).

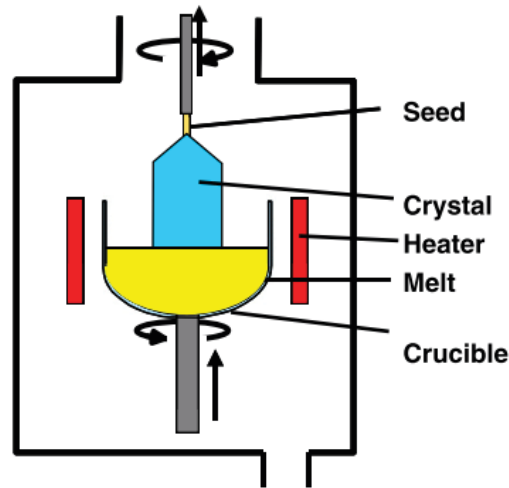
2.2.1. Czochralski

A técnica, introduzida por Jan Czochralski em 1917, é baseada nas condições de equilíbrio sólido-líquido. No método, o material a ser cristalizado é colocado em um cadinho, que é aquecido até a fusão (OCTAVIANO, 1987). Após a total fusão, um pequeno cristal de semente orientado é imerso no fundido a partir do topo, levando à formação de um menisco sobre a interface cristal / líquido. O equilíbrio da interface é alcançado quando a temperatura está ligeiramente acima do ponto de fusão do material (superaquecimento), então a semente é lentamente retirada (sob rotação) e a cristalização ocorre na interface da semente e do fundido (interface sólido / líquido). O crescimento começa em uma condição de não equilíbrio de supersaturação (FRIEDRICH, 2016).

Na Figura 2.4 é apresentado um esquema básico do equipamento utilizado

para a aplicação da técnica Czochralski.

Figura 2.4. Desenho esquemático da Técnica Czochralski.

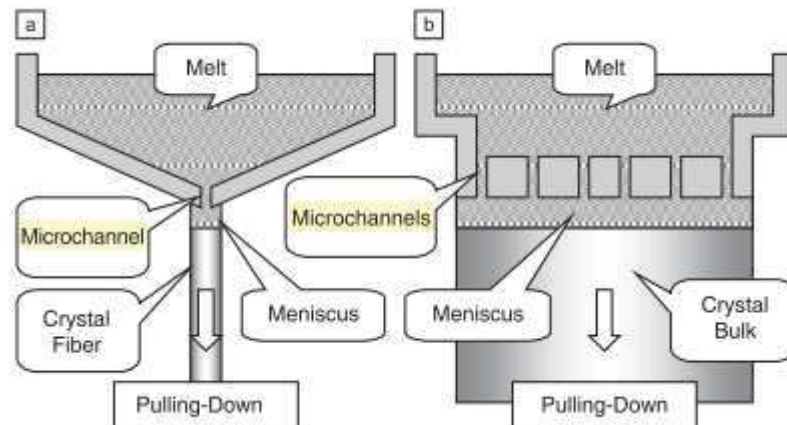


Fonte: Friedrich (2016)

2.2.2. Micro-Pulling-Down

A técnica de Micro-Pulling-Down (Figura 2.5), ou simplesmente μ -PD, apresenta características semelhantes a técnica Czochralski, isto pela utilização de sistemas de puxamento e aplicação de gradientes de temperatura, porém, o μ -PD tem como produto fibras cristalinas, que podem ser utilizadas para análise de propriedades e aplicações de tamanho reduzido.

Figura 2.5. Esquema básico do μ -PD



Fonte: (YOSHIKAWA; CHANI, 2009)

O nome da técnica, μ -PD, explica de forma simples seu funcionamento, sendo que, o termo “Micro-pulling” faz referência ao microcanal localizado na parte inferior do cadinho, cuja funcionalidade é modelar a passagem do material que é fundido no cadinho, e posteriormente será cristalizado. O processo é feito pela circulação de uma corrente no cadinho (*main-heater*), responsável por fundir o material. O cadinho transfere o calor necessário para que o material atinja o ponto de fusão, logo, é de extrema importância que o material seja condutor, e também, que apresente ponto de fusão consideravelmente maior que o do material a ser cristalizado (YOSHIKAWA; CHANI, 2009).

O ajuste do gradiente térmico na interface de crescimento é realizado pelo controle e combinação dos parâmetros como temperatura do cadinho, sistema de isolamento térmico na região do capilar e velocidade de puxamento. Após a fusão do material no cadinho, o fundido é conduzido, inicialmente pela ação da gravidade até o microcanal no fundo do cadinho, onde faz contato com uma semente, dando início ao processo de crescimento. À medida que o material cristaliza e se solidifica, o mesmo é puxado (“*pulling-down*”) através de um sistema de servomotores, formando uma fibra, sendo que o tempo de puxamento é uma variável crucial neste processo, assim como o gradiente de temperatura (YOSHIKAWA; CHANI, 2009).

3. PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES

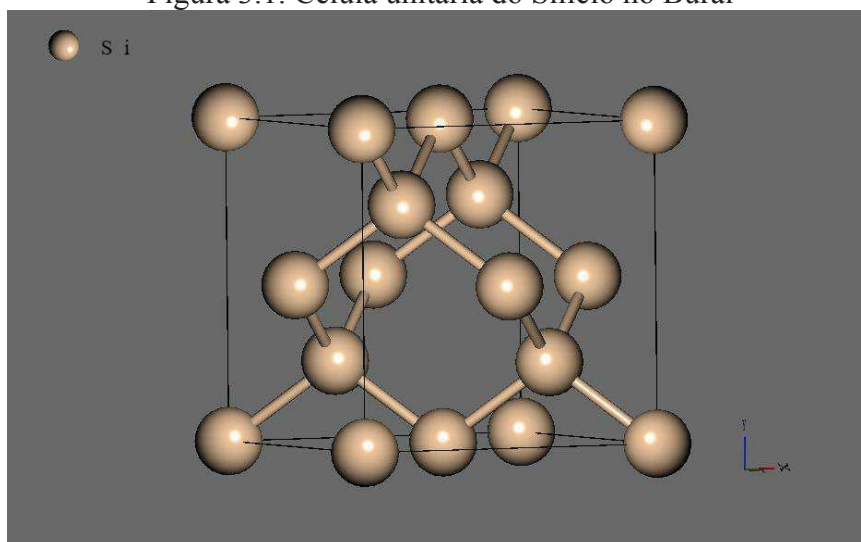
O Quantum Espresso (QE) é uma ferramenta de computacional que trabalha como um conjunto de pacotes executáveis, cujo objetivo é a predição das propriedades de estrutura eletrônica e a modelagem de materiais, sendo que, a base teórica para a realização desses cálculos é a teoria funcional da densidade. O propósito da DFT é descrever um sistema de férmions interagente por meio de sua densidade, dando uma descrição das propriedades do material em seu estado fundamental (SILVA, 2009). Os pacotes executáveis do QE podem ser executados em qualquer compilador que suporte a linguagem Fortran, tanto no sistema Linux, quanto no Windows. Para que os cálculos sejam realizados de forma adequada, é necessário fornecer ao código as informações básicas, como como posicionamento dos átomos nas estruturas e cargas dos átomos do material

a ser analisado. Essas informações são inseridas no código por meio dos pseudopotenciais¹. Os pseudopotenciais, que estão acoplados a análise por meio de ondas planas, tem como objetivo a simplificação dos cálculos de propriedades moleculares usando a teoria DFT. Quando aplicado o conceito de pseudopotenciais, as variações das funções de onda de valência correspondentes a região do núcleo do átomo é removida e substituídas por pseudopotenciais (BYLASKA, 2017).

Além das diferentes opções de cálculos, o QE ainda possui a vantagem de ser uma ferramenta de código aberto (*Open Source*), o que o torna extremamente adequado para a aplicação. Adicionalmente o QE, disponibiliza uma interface gráfica, Burai. O Burai é basicamente um software próprio para o QE, que permite realizar os cálculos por meio de compilações automáticas, sem a necessidade de escrever linhas de códigos, visto que o programa já possui modelos básicos prontos.

Por meio do Burai é possível construir de forma intuitiva as estruturas cristalinas que se deseja analisar, como na Figura 3.1. Também é possível a substituição, remoção ou inserção de diferentes átomos para simular processos de dopagem e defeitos substitucionais e intersticiais.

Figura 3.1. Célula unitária do Silício no Burai



Fonte: Produção do autor

¹ <https://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual>

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, o projeto de pesquisa visava ao crescimento de fibras monocristalinas de NL através da técnica de μ -PD no Laboratório de Materiais Multifuncionais e Sensores da Unifesp. Devido a pandemia Covid-19, o acesso aos laboratórios foi inviabilizado, alternativamente foi iniciada uma análise computacional com o objetivo de estudar as propriedades do NL. Inicialmente, diferentes opções foram analisadas e avaliadas de acordo com suas funcionalidades, sendo que três se destacaram: CASTEP, VASP e Quantum Espresso.

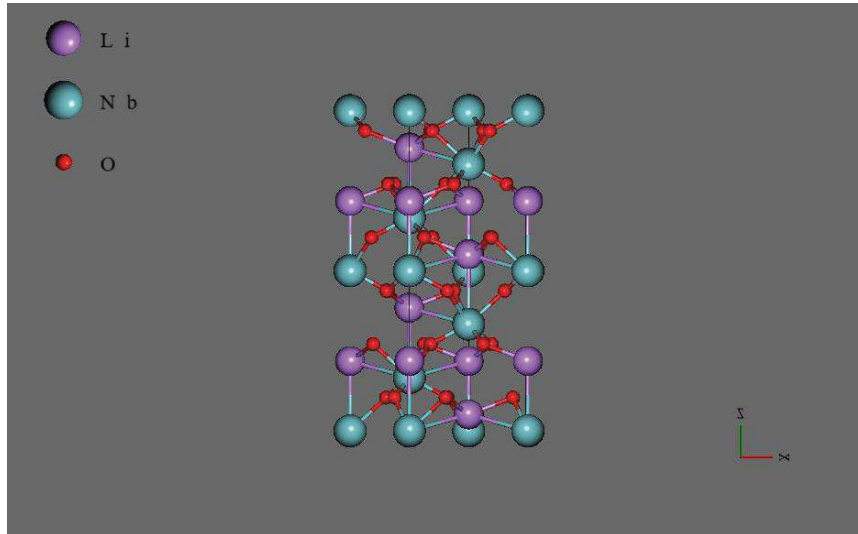
As opções destacadas foram vistas como capazes de fornecer as informações necessárias sobre a estrutura eletrônica e propriedades do material, porém, o QE apresentou duas vantagens, sendo a primeira que seus pacotes executáveis são *Open Source*, o que torna a análise livre, e fomenta a troca de informações a respeito dos códigos para a análise entre os programadores. A segunda vantagem é a interface Burai (que é gratuita, assim como o QE), que possibilita a uma observação e manipulação dinâmica da estrutura do material analisado, além da diminuição da necessidade de trabalhar diretamente com os códigos.

Após a seleção do QE e Burai como ferramentas de análise, seus pacotes e softwares foram devidamente instalados na máquina. Com o objetivo de conhecer o QE e se habituar com a interface, estabeleceu-se como objetivo a construção de sua célula unitária na interface gráfica, e em seguida utilizar a estrutura formada para calcular o GAP de energia e a estrutura de bandas.

A construção da estrutura do NL foi realizada através de *templates* disponíveis no site *The Materials Project*². Os modelos da estrutura são acompanhados dos pseudopotenciais de cada um dos elementos, fato que ajuda a padronizar a análise já que os pseudopotenciais são fornecidos pela mesma fonte. A estrutura cristalina montada pode ser observada na Figura 4.1.

² <https://materialsproject.org/>

Figura 4.1. Estrutura do NL.



Fonte: Produção do autor

A partir da estrutura foi realizado o processo de relaxamento estrutural, onde o código fornece a posição mais estável dos átomos na estrutura. As posições geradas são mostradas na Figura 4.2.

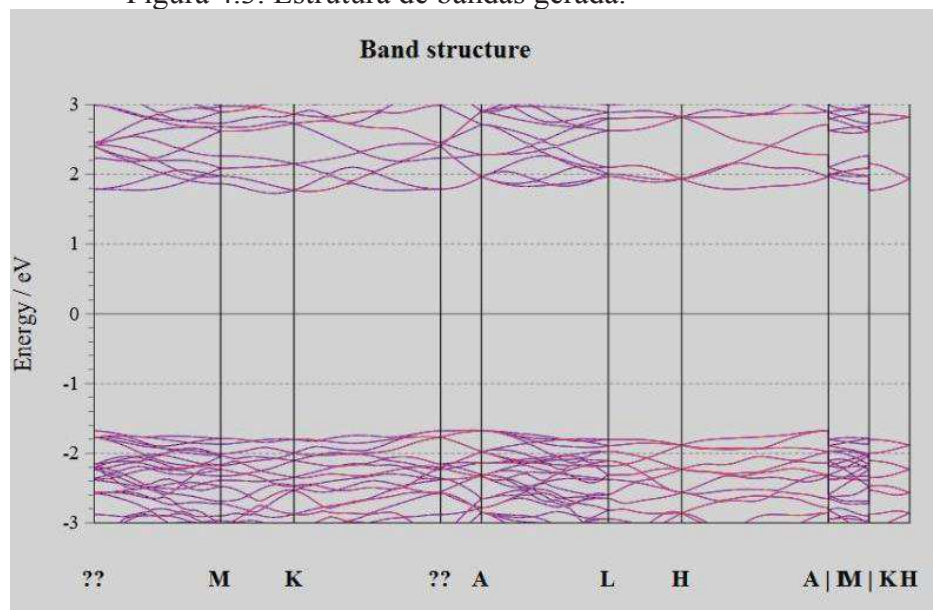
Figura 4.2. Posição inicial (esquerda) e final (direita) dos átomos.

ATOMIC_POSITIONS (angstrom)				ATOMIC_POSITIONS (angstrom)			
Li	2.585442520	1.492705597	0.721078198	Li	-2.611495	1.507747	0.713546
Li	-0.000000000	0.000000000	3.039621305	Li	0.000000	0.000000	3.068419
Li	-0.000000000	2.985412184	5.358329523	Li	-0.000000	3.015495	5.423293
Li	2.585442520	1.492705597	7.677097374	Li	2.611495	1.507747	7.778166
Li	-0.000000000	0.000000000	9.995638851	Li	0.000000	0.000000	10.133040
Li	-0.000000000	2.985412184	12.314352658	Li	-0.000000	3.015495	12.487914
Nb	2.585442520	1.492705597	4.631172725	Nb	2.611495	1.507747	4.698882
Nb	-0.000000000	2.985412184	2.313843168	Nb	-0.000000	3.015495	2.344008
Nb	-0.000000000	2.985412184	9.269857467	Nb	-0.000000	3.015495	9.408629
Nb	-0.000000000	-0.000000000	6.950800818	Nb	0.000000	0.000000	7.053756
Nb	0.000000000	-0.000000000	13.906810135	Nb	0.000000	0.000000	14.118376
Nb	2.585442520	1.492705597	11.587194175	Nb	2.611495	1.507747	11.763503
O	0.637725130	4.438986550	3.747940420	O	0.654660	4.478242	3.814900
O	-1.577694831	2.810910481	3.747940420	O	-1.594106	2.851073	3.814900
O	0.939969701	1.706338533	3.747940420	O	0.939446	1.717169	3.814900
O	-0.637728054	1.452898853	1.431109853	O	-0.654660	1.462747	1.460026
O	1.646059292	3.199379354	1.431109853	O	1.672049	3.224916	1.460026
O	-1.008331238	4.303957357	1.431109853	O	-1.017389	4.358821	1.460026
O	0.637730252	1.452899951	8.387117891	O	0.654660	1.462747	8.524647
O	1.008329188	4.303958711	8.387117891	O	1.017389	4.358821	8.524647
O	-1.646059440	3.199376901	8.387117891	O	-1.672049	3.224916	8.524647
O	1.947986565	2.946413025	6.066039651	O	1.956835	2.970494	6.169774
O	1.645222997	0.213799516	6.066039651	O	1.672049	0.209422	6.169774
O	4.163117999	1.317905241	6.066039651	O	4.205601	1.343326	6.169774
O	3.222901200	2.946407797	13.022059658	O	3.266155	2.970494	13.234395
O	1.007770206	1.317910214	13.022059658	O	1.017389	1.343326	13.234395
O	3.525656154	0.213799770	13.022059658	O	3.550941	0.209422	13.234395
O	-0.637728941	4.438984660	10.703960131	O	-0.654660	4.478242	10.879521
O	-0.939966159	1.706336177	10.703960131	O	-0.939446	1.717169	10.879521
O	1.577695100	2.810914727	10.703960131	O	1.594106	2.851073	10.879521

Fonte: Produção do autor

Com a estrutura já formada, o objetivo seguinte foi realizar o cálculo do *band gap* e gerar a estrutura de bandas. Inicialmente, os resultados obtidos foram inconclusivos, devido ao fato de que a estrutura de bandas gerada não denunciava o nível de Fermi na estrutura (Figura 4.3), sendo este um fator crucial para identificar qual a última banda preenchida. Os cálculos foram realizados repetidas vezes alterando as configurações de relaxamento, porém, em nenhum dos casos foi gerado um resultado conclusivo. Devido a essa dificuldade, foram incluídos momentaneamente no trabalho, dois pesquisadores da UFRPE, sendo eles, o Dr Jonas Romero Fonseca de Lima e seu aluno de doutorado Djardiel da Silva Gomes. Por meio da ajuda de ambos foi identificado que devido à complexidade da estrutura do NL, alguns ajustes específicos deveriam ser realizados nas configurações do relaxamento da estrutura, sendo assim, a simulação foi realizada novamente com a ajuda dos pesquisadores e o gap obtido foi de 3,70 eV.

Figura 4.3. Estrutura de bandas gerada.



Fonte: Produção do autor

5. Seminários

5.1.Seminários apresentados pelo beneficiário

No dia 3 de dezembro de 2020 foi apresentado um seminário ao grupo de pesquisa sobre materiais cristalinos, propriedades do niobato de lítio e suas técnicas de crescimento cristalino. A apresentação foi iniciada com uma introdução incluindo desde definições e formas de identificação de uma estrutura cristalina. Também foram citados os métodos de crescimento de cristais, sendo estas as técnicas baseadas em fusão, precipitação, redução de volume de solução ou adição de solventes. A respeito do crescimento em si, foram discutidos os fatores de influência na escolha da técnica de crescimento (rendimento, taxa de nucleação, requerimento de energia).

Na sequência foi apresentado detalhes do niobato de lítio e principalmente de suas propriedades ópticas, que o tornaram uma opção adequada para o projeto GSST. Além de discutir suas propriedades, também foi discutida a relação entre a transição do caráter ferroelétrico para o paraelétrico (ponto Curie), em função da temperatura e composição, sendo que esta discussão foi feita com o auxílio de um diagrama de fases do niobato de lítio.

Por fim, foram apresentadas as técnicas de crescimento adequadas para o niobato de lítio, que se baseiam no processo de fusão (Czochralski e a μ -PD). Cada método foi descrito desde o funcionamento até os fatores que influenciam na qualidade dos cristais.

5.2.Seminários apresentados pelos demais integrantes da pesquisa

Além da apresentação do beneficiário, foi apresentado também outros seminários referentes a temas do projeto como um todo. Eles serão listados abaixo com seus respectivos seminaristas:

- 25/09 - Adriani Barbosa - Análise de incertezas na determinação dos parâmetros de Stokes.
- 08/10 - Ivan de Oliveira - Registro holográfico em cristais fotorrefrativos;

- 22/10 - Evaldo Corat - Nanotubos de carbono (NTCs); 12
- 23/10 - John Lehman (National Institute of Standards and Technology) - A nova geração de radiômetros utilizando nanotubos;
- 29/10 - Franciele Carlesso - Medidas de refletância de materiais absorvedores (NTCs e Black Ni-P);
- 12/11 - Ana Maria do Espírito Santo - Crescimento de cristais a partir da fusão especialmente sobre a técnica de Micro-Pulling-Down;
- 19/11 - Erica Antunes - Nanotubos de carbono e os resultados encontrados;
- 17/12 - Luma Trindade - Propriedades fotorrefrativas do Niobato de lítio;
- 21/01 - Matheus Verzani - Nanotubos de carbono como materiais absorvedores;
- 04/02 - Evaldo Corat - Física moderna;
- 05/02 - Felipe Tavares - Filtros holográficos.

6. Conclusão

Apesar das restrições causadas pela pandemia, foi possível realizar um estudo bibliográfico e uma análise computacional preliminar do NL. Para a análise computacional diferentes dificuldades precisaram ser superadas como o entendimento de códigos complexos, necessidade de capacidade de processamento para realizar as simulações e o grande número de configurações necessárias antes de se realizar as simulações. A análise via programação é uma ferramenta de extrema utilidade em termos de sustentabilidade ambiental e econômica devido à oportunidade de reduzir consideravelmente a quantidade de material gasto em análises laboratoriais.

Como sugestão de trabalho futuro as análises devem ser continuadas para contribuir no desenvolvimento de instrumentos para a missão GSST. Além disso, a combinação da simulação e crescimento em laboratório tornam o trabalho mais dinâmico e otimizado.

7. Referências

- ALIBART, O. et al. Quantum photonics at telecom wavelengths based on lithium niobate waveguides. *Journal of Optics (United Kingdom)*, v. 18, n. 10, 2016.
- BYLASKA, E. J. Plane-Wave DFT Methods for Chemistry. *Annual Reports in Computational Chemistry*, v. 13, p. 185–228, 2017.
- DANIELYAN, A. Photorefractive and electro-optic properties of metal ion doped lithium niobate crystals. 2020. 219 f. Université de Lorraine, 2020.
- FRIEDRICH, J. *Methods for Bulk Growth of Inorganic Crystals: Crystal Growth*. [S.l.]: Elsevier Ltd., 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.01010-9>>.
- OCTAVIANO, E. S. *Crescimento e Caracterização de Monocristais de LiNbO₃ e suas Soluções Sólidas Óxidas*. 1987. 86 f. UNIVERSIDADE DE SAO PAULO INSTITUTO, 1987.
- OSWALDO, S. et al. Lithium Niobate Single Crystals and Powders Reviewed — Part I. p. 1–32, 2020.
- PALATNIKOV, M. N. et al. Dielectric properties of lithium niobate single crystals doped with gadolinium. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, v. 49, n. 1, 2013.
- SAID, S. M.; SABRI, M. F. M.; SALLEH, F. *Ferroelectrics and Their Applications*. Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. [S.l.]: Elsevier, 2017. . Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128035818041436>>.
- SILVA, A. R. Teoria do funcional da densidade exata para o modelo de hubbard de dois sítios. 2009. UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO, 2009.
- VIEIRA, L. E. et al. Brazilian experimental solar telescope - Galileo Solar Space Telescope. 58 slides. São José dos Campos: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 2016. 58 slides
- VOLK, T.; WÖHLECKE, M. *Lithium Niobate: Defects, Photorefraction and Ferroelectric Switching*. 2008, [S.l.: s.n.], 2008.
- WEIS, R. S.; GAYLORD, T. K. *Lithium Niobate: Summary of Physical Properties and Crystal Structure*. *Applied Physics A*, v. 37, p. 191–203, 1985.
- YOSHIKAWA, A.; CHANI, V. Growth of Optical Crystals by the Micro-Pulling-Down Method. *MRS Bulletin*, v. 34, n. April, 2009.