

RESUMO - MODELAGEM DE MATERIAIS

INSTABILIDADE ESTRUTURAL EM COMPÓSITOS C-BN/H-BN: UM ESTUDO DA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE SOBRE A DEPENDÊNCIA DA PROPORÇÃO DE FASE

Pedro Altero Parra (pedro.parra@unesp.br)

Eliezer Fernando De Oliveira (eliezer.oliveira@unesp.br)

Este trabalho investiga a estrutura eletrônica e as propriedades magnéticas de compósitos de nitreto de boro cúbico (c-BN) e hexagonal (h-BN), focando no impacto da proporção de fase e espessura da camada de c-BN na estabilidade estrutural e na ordem magnética. O estudo visa modular o magnetismo através do controle da heteroestrutura. A pesquisa utilizou a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) via Quantum ESPRESSO, empregando o funcional GGA-PBE e pseudopotenciais PAW. Foram incluídas correções de Van der Waals (DFT-D3) para descrever as interações entre camadas de h-BN. Compósitos de 96 átomos foram submetidos à otimização de geometria com relaxamento apenas na direção z e cálculos spin-polarizados para verificar a estabilidade de estados Ferromagnéticos (FM) e Antiferromagnéticos (AFM). Os parâmetros incluíram energia de corte de 80 Ry e grade de pontos-k 6x6x1. A validação com estruturas puras mostrou concordância experimental: o c-BN manteve-se rígido (ligação B-N ≈ 1.571 Å) e o h-BN apresentou contração inter-camada (≈ 3.43 Å)

devido ao DFT-D3. A análise dos compósitos revelou um limite de estabilidade para a fase c-BN. O compósito 20% c-BN (2 camadas) sofreu transição de fase completa para h-BN, resultando em um estado final Não-Magnético (NM), instabilidade confirmada por testes em slab puro. O caso 40% c-BN (4 camadas) mostrou-se um limiar de instabilidade. Acima desse limite, os compósitos mantiveram a fase c-BN e exibiram magnetismo dependente da proporção: 60% c-BN convergiu para AFM, enquanto 50% e 80% c-BN convergiram para FM. Conclui-se preliminarmente que existe uma espessura mínima (2-4 camadas) para a estabilidade do c-BN e que a proporção de fase é viável para modular o ordenamento magnético. Os próximos passos incluem finalizar cálculos de convergência (caso 40/60) e analisar a estrutura de bandas e DOS.

Palavras-chave: nitreto de boro; compósitos c-bn/h-bn; teoria do funcional da densidade; propriedades magnéticas; transição de fase; estabilidade estrutural.