

247

ESTRUTURA DE BANDAS DOS NITRETOS B₄N E FE₃BN E DETERMINAÇÃO TEÓRICA DO MÓDULO DE BULK. *Rodrigo Freitas Krejci, Antonio Vanderlei dos Santos (orient.) (URI).*

Neste trabalho, estudamos as estruturas de bandas dos nitretos de Boro, em duas estequiometrias diferentes Fe₃BN e B₄N, para resolvermos a estrutura de bandas dos compostos, utilizamos o Método Linear de Orbitais Muffin-Tin (LMTO) com o método de aproximação das esferas (ASA). Este trabalho tem por objetivo entender as propriedades físicas do estado fundamental, através do cálculo de estrutura de bandas, para prevermos a construção de novas ligas. A estrutura cristalina dos nitretos foi considerada como um cubo simples com cinco átomos na célula unitária. Iniciamos nosso estudo mostrando a estrutura eletrônica e magnética do Fe₃BN e B₄N com o cálculo da energia total para vários parâmetros de rede, obtendo-se a curva da energia total de formação em função do parâmetro de rede. Para o Fe₃BN, obtivemos um parâmetro de rede de 6,9755 u.a., -7725,9494 Ry de energia total no equilíbrio e um módulo de Bulk de 239,82 GPa. Para o B₄N podemos observar que seu parâmetro de rede no equilíbrio é de 6,8589 u.a., sua energia de formação é de -303,9552 Ry e o módulo de Bulk é de 105,48 GPa. Com base nos resultados obtidos através do cálculo da estrutura de bandas do composto Fe₃BN e B₄N, podemos constatar a mínima energia de formação, seu parâmetro de rede de equilíbrio e notamos que houve uma expansão da rede do nitreto de boro B₄N bem como um aumento significativo no módulo de Bulk. Com estes cálculos esperamos que num futuro muito próximo, estes sejam de grande utilidade, para que experimentais, baseados nos mesmos, possam obter novos e melhores nitretos. (Fapergs).