

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"

FACULDADE DE CIÊNCIAS - CAMPUS BAURU

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E METEOROLOGIA

BACHARELADO EM FÍSICA DE MATERIAIS

MARIA ISABEL DE OLIVEIRA PAVANELI AGOSTINI

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES INTERFACIAIS E TÉRMICAS DE
HETEROESTRUTURAS BASEADAS EM NITRETO DE BORO
HEXAGONAL E DIAMANTE**

BAURU

2025

MARIA ISABEL DE OLIVEIRA PAVANELI AGOSTINI

**ESTUDO DAS PROPRIEDADES INTERFACIAIS E TÉRMICAS DE
HETEROESTRUTURAS BASEADAS EM NITRETO DE BORO
HEXAGONAL E DIAMANTE**

Trabalho de Conclusão de Curso do Curso
Bacharelado em Física de Materiais da Univer-
sidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita
Filho”, Faculdade de Ciências, Campus Bauru.
Orientador: Prof. Dr. Eliezer Fernando de
Oliveira

BAURU
2025

A275e

Agostini, Maria Isabel de Oliveira Pavaneli

Estudo das propriedades interfaciais e térmicas de heteroestruturas baseadas em nitreto de boro hexagonal e diamante / Maria Isabel de Oliveira Pavaneli Agostini. -- Bauru, 2025

31 p. : tabs., fotos

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Física) -
Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências,
Bauru

Orientador: Eliezer Fernando de Oliveira

1. Física. 2. Ciência dos materiais. 3. Dinâmica Molecular. 4.
Diamante. 5. Nitreto de boro. I. Título.

Para minha mãe. Obrigado.

Agradecimentos

Agradeço a minha família, pelo amor, carinho, e compreensão, pela dedicação com a minha educação, por me tolerar nas piores horas e pelos abraços. Ao meu pai por toda a inspiração e paciência. A minha mãe pelo cuidado e encorajamento. A minha irmã, por me fazer rir sempre e me apoiar ainda mais.

Aos meus amigos, por toda a colaboração e companhia nos últimos quatro anos, mesmo com trabalhos e provas, sempre dispostos a me ajudar com conselhos, experiências e discussões.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Eliezer Fernando de Oliveira, por toda a ajuda com o projeto, desde a ideia inicial até o fim. Aos docentes do curso, por fundamentarem o meu aprendizado. A UNESP, por criar um ambiente tão importante para compartilhamento de conhecimento.

"Muito a aprender você ainda tem."
(Mestre Yoda)

Resumo

O presente trabalho tem como objetivo observar as propriedades da interface formada por diamante e nitreto de boro hexagonal (h-BN), visando aprimorar as interações entre os dois materiais, em especial para usos em dispositivos eletrônicos, como, por exemplo, transistores de efeito de campo (FETs). As simulações foram realizadas utilizando um campo de força reaxFF para analisar heteroestruturas contendo diamante orientado em três direções (100), (110), e (111), considerando superfícies reconstruídas e hidrogenadas. As simulações ajudaram a observar uma redução de distância interfacial e aumento de interação eletrostática entre o diamante e o h-BN em estruturas contendo superfície hidrogenada, sugerindo maior estabilidade e eficiência no uso destas superfícies na produção de FETs.

Palavras-chave: Dinâmica molecular, Diamante, Nitreto de boro hexagonal.

Abstract

The present work has the objective of observing the properties of an interface formed by diamond and hexagonal boron nitride (h-BN), with the goal of bettering the interactions between both materials, specially for usage in electronic devices, such as, for example, field effect transistors (FETs). The simulations were run utilizing a reaxFF force field to analyse heterostructures containing diamond oriented in three directions (100, 110, and 111), considering surfaces both reconstructed and hydrogenated. The simulations highlighted a reduction in the interfacial distance and an increase in electrostatic interaction between both materials in structures made up of hydrogenated surfaces, suggesting better stability and efficiency in their uses in the production of FETs

Keywords: Molecular dynamics, Diamond, Hexagonal boron nitride.

Lista de figuras

Figura 1 – Estruturas utilizadas após simulações.	17
Figura 2 – Comparação dos gráficos de energia cinética para estruturas fixas e soltas.	19
Figura 3 – Energia potencial e carga para o diamante 100, com a estrutura solta.	20
Figura 4 – Gráficos de energia potencial e carga para a heteroestrutura solta composta pelo diamante 110.	21
Figura 5 – Montagem de gráficos de energia potencial e carga para todas as estruturas soltas contendo a superfície 111.	22
Figura 6 – Gráficos de carga e energia potencial para as estruturas fixas contendo diamante com superfície 100.	28
Figura 7 – Gráficos montados referentes às simulações com estruturas contendo D110 com as duas primeiras camadas fixas.	28
Figura 8 – Carga e energia potencial para as estruturas fixas contendo D111.	29

Lista de abreviaturas e siglas

D	Diamante
HD	Diamante hidrogenado
h-BN	Nitreto de boro hexagonal
D100	Diamante orientado na direção 100
D110	Diamante orientado na direção 110
D111	Diamante orientado na direção 111
D100/h-BN	Heteroestrutura contendo D100 e h-BN
HD100/h-BN	Heteroestrutura contendo HD100 e h-BN
D110/h-BN	Heteroestrutura contendo D110 e h-BN
HD110/h-BN	Heteroestrutura contendo HD110 e h-BN
1x1D111/h-BN	Heteroestrutura contendo D111 com reconstrução 1x1 e h-BN
2x1D111/h-BN	Heteroestrutura contendo D111 com reconstrução 2x1 e h-BN
HD111/h-BN	Heteroestrutura contendo HD111 e h-BN
Unesp	Universidade Estadual Paulista
LAMMPS	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
VMD	Visual Molecular Dynamics

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Transistores de Efeito de Campo (FETs)	12
1.2	Diamante	13
1.3	Nitreto de Boro Hexagonal	14
2	DESENVOLVIMENTO	16
2.1	Materiais e Métodos	16
2.2	Resultados e Discussão	18
2.2.1	Comparação entre simulações com camadas fixas e soltas	18
2.2.2	Orientação 100 da superfície do diamante (D100)	18
2.2.3	Orientações 110 e 111 do diamante (D110 e D111)	20
3	CONCLUSÃO	23
	REFERÊNCIAS	24
	APÊNDICES	27

1 Introdução

Nos últimos anos, avanços significativos têm sido alcançados na busca por materiais semicondutores capazes de operar sob condições extremas, como altas temperaturas, tensões elevadas, atmosferas corrosivas e ambientes com intensa radiação. Esse esforço decorre do crescimento contínuo de áreas tecnológicas que demandam dispositivos de alta robustez, incluindo eletrônica de potência, sistemas aeroespaciais, reatores nucleares, sensores de alta precisão e aplicações emergentes em dispositivos de radiofrequência de altíssimo desempenho. Nesse contexto, o diamante cristalino tem se destacado como um dos materiais mais promissores para a nova geração de transistores de efeito de campo (FETs), conforme reportado por (SASAMA et al., 2018)). Tal interesse decorre de um conjunto singular de propriedades físicas e eletrônicas: elevada mobilidade de portadores de carga, notável condutividade térmica, alta rigidez mecânica, ampla largura de banda proibida e tolerância superior a condições severas de operação (TORDJMAN, 2022).

Além disso, o avanço contínuo nas técnicas de síntese de diamante manufaturado, especialmente processos baseados em deposição química a partir da fase vapor (CVD), tem reduzido de forma expressiva o custo de produção e ampliado a disponibilidade de substratos de alta qualidade estrutural (KOIZUMI et al., 2018). Esse cenário abre caminho para aplicações antes economicamente inviáveis, tornando os FETs baseados em diamante candidatos naturais a substituir tecnologias convencionais baseadas em SiC, GaN ou GaO em segmentos específicos da eletrônica avançada.

Estruturalmente, um FET é constituído por três terminais principais, um source, um gate, e um drain, e seu funcionamento depende do controle do fluxo de portadores de carga por meio de um campo elétrico aplicado no gate. Em configurações tradicionais, o canal semicondutor se forma a partir de uma junção p-n ou de heteroestruturas cuidadosamente projetadas (YOUNG; FREEDMAN, 2004). No caso dos FETs de diamante, o desempenho final do dispositivo é fortemente influenciado pelas características da interface entre o diamante e o material utilizado como dielétrico de gate, uma vez que imperfeições interfaciais podem atuar como armadilhas de carga, dispersores eletrônicos ou pontos de vazamento sob altas tensões.

Entre os materiais investigados para compor o dielétrico de gate, destaca-se o nitreto de boro hexagonal (h-BN). Trata-se de um isolante elétrico de alta eficiência, quimicamente estável e capaz de suportar tensões elevadas, além de apresentar uma estrutura bidimensional lamelar com ligações covalentes fortes e ausência de ligações pendentes na superfície (TORDJMAN, 2022). Tais características tornam o h-BN uma escolha natural para integração com materiais semicondutores 2D e 3D. Contudo, apesar do potencial teórico da heteroestrutura diamante/h-BN (D/h-BN), os dispositivos reportados até o momento apresentam mobilidades de carga da

ordem de $200\text{--}300\text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ — valores consideravelmente inferiores à mobilidade intrínseca do diamante, que pode alcançar aproximadamente $4500\text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ (SASAMA et al., 2018).

A discrepância entre o desempenho teórico e experimental tem sido associada, em diversos estudos, à qualidade da interface D/h-BN. Defeitos estruturais, vacâncias, impurezas residuais, rugosidade atômica e descontinuidades cristalinas podem induzir dispersão eletrônica, afetar a densidade de estados na interface e promover a formação de canais indesejados de fuga de corrente sob campos elétricos intensos (SASAMA et al., 2022). Além disso, fenômenos mecânicos, como a incompatibilidade de parâmetros de rede, tensões interfaciais, ou adesão insuficiente entre as camadas, podem contribuir para instabilidades térmicas e degradação progressiva do dispositivo. Esses fatores, de forma combinada, limitam a mobilidade dos portadores e reduzem o desempenho global dos FETs de diamante.

Diante desse cenário, o presente trabalho tem como objetivo principal investigar, por meio de métodos teóricos de modelagem e simulação atomística, as propriedades estruturais de heteroestruturas formadas por diamante e h-BN. A partir de métodos de dinâmica molecular e análises de estabilidade energética, pretende-se compreender com profundidade a natureza física das interações na interface, considerando diferentes fatores que influenciam sua performance, tais como a presença de hidrogenação na superfície do diamante e variações de orientação cristalina do diamante.

Espera-se, com isso, gerar informações fundamentais para a otimização das propriedades mecânicas da heteroestrutura D/h-BN, contribuindo para a engenharia de interfaces mais estáveis e eficientes. Em última instância, almeja-se fornecer subsídios teóricos para o desenvolvimento de FETs de diamante de nova geração, mais robustos, energeticamente eficientes e adequados para aplicações em ambientes extremos, consolidando essa tecnologia como uma das mais promissoras na eletrônica avançada contemporânea.

1.1 Transistores de Efeito de Campo (FETs)

Os transistores de efeito de campo (FETs) constituem uma das classes fundamentais de dispositivos semicondutores utilizados na eletrônica moderna, desempenhando papel central no controle e modulação de correntes elétricas em circuitos analógicos e digitais. Diferentemente de dispositivos bipolares, o funcionamento dos FETs baseia-se na manipulação do fluxo de portadores majoritários por meio de um campo elétrico aplicado no terminal de gate, permitindo alta eficiência de comutação, reduzido consumo de energia e escalabilidade arquitetural. Ao longo das últimas décadas, avanços significativos no entendimento físico do transporte em nanoestruturas, bem como inovações em técnicas de deposição e litografia, possibilitaram o desenvolvimento de múltiplas configurações de FETs, cada uma otimizada para aplicações específicas (MIDDYA; BHATTACHARJEE; BANDYOPADHYAY, 2024).

Do ponto de vista estrutural, um FET clássico é formado por três regiões principais: o

source, responsável pela injeção de portadores; o drain, que coleta os portadores conduzidos pelo canal; e o gate, que regula eletricamente a densidade e o tipo de portadores presentes no canal semiconductor. O canal, por sua vez, pode ser induzido eletricamente, como nos MOSFETs tradicionais (CAVE; WILSON, 1977), ou pode resultar de heteroestruturas e técnicas de engenharia de bandas que permitem a formação de gases eletrônicos bidimensionais altamente móveis, a exemplo de HEMTs baseados em GaN/AlGaN (MENEHESSE; MENEHINI; ZANONI, 2014).

O mecanismo central responsável pela operação do FET é a modulação do potencial eletrostático no canal, que ajusta a largura e a densidade de portadores disponíveis para condução. Em regimes de baixa tensão de gate, o canal encontra-se depletado ou totalmente suprimido, caracterizando o estado “desligado”. À medida que a tensão no gate aumenta, o campo elétrico atrai ou repele portadores, formando um canal condutor cuja condutância cresce de forma aproximadamente exponencial até atingir saturação. Dessa forma, pequenas variações de tensão aplicadas ao gate resultam em mudanças significativas na corrente entre source e drain, fornecendo a base física para funções de amplificação.

A evolução tecnológica dos FETs tem sido marcada por esforços contínuos para melhorar parâmetros como mobilidade de portadores, tensão de ruptura, capacitância de gate, corrente de fuga, eficiência térmica e robustez sob condições extremas (KAWARADA, 2022). Materialmente, essas demandas conduziram a uma migração gradual do silício para semicondutores de banda larga, tais como SiC, GaN, AlN e GaO, que oferecem vantagens em aplicações de alta potência e alta frequência (LI et al., 2023). Contudo, mesmo esses materiais apresentam limitações, especialmente em ambientes de temperatura muito elevada, exposição à radiação ionizante ou ciclos mecânicos severos.

1.2 Diamante

O diamante é um material cristalino formado pela disposição regular de átomos de carbono, unidos por ligações covalentes fortes que conferem ao material características únicas e excepcionais. Em sua forma natural, o diamante é amplamente conhecido como uma pedra preciosa, mas suas propriedades físicas e eletrônicas fazem dele um material extremamente interessante para diversas aplicações tecnológicas, especialmente em dispositivos eletrônicos de alta potência.

O diamante é um isolante elétrico devido à sua ampla banda proibida, que é da ordem de 5,5 eV, o que impede a condução de eletricidade em condições normais. No entanto, quando dopado com certos elementos ou em sua forma hidrogenada, o diamante pode apresentar um comportamento semiconductor. Sua estrutura cristalina tetraédrica resulta em um arranjo altamente simétrico, no qual cada átomo de carbono está fortemente ligado a quatro outros átomos, formando uma rede tridimensional. Esse arranjo confere ao diamante uma série de

propriedades excepcionais, incluindo uma elevada mobilidade de portadores de carga, que pode alcançar valores da ordem de $4500 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$, muito superiores aos encontrados em outros semicondutores tradicionais, como o silício ou o carbeto de silício (SiC) (WORT; BALMER, 2008).

Além disso, o diamante apresenta uma condutividade térmica extremamente alta (aproximadamente $2000 \text{ W}/\text{m} \cdot \text{K}$), o que o torna ideal para aplicações em sistemas onde o desempenho térmico é um fator crucial, como em dispositivos eletrônicos de alta potência e em condições extremas de operação.

O diamante hidrogenado é uma variação do diamante em que átomos de hidrogênio estão ligados à superfície dos cristais de diamante. Essa modificação resulta em propriedades eletrônicas aprimoradas, como maior mobilidade de portadores de carga e redução de defeitos superficiais. O processo de hidrogenação também pode melhorar a estabilidade da superfície e minimizar o aparecimento de centros de defeito que atuam como armadilhas para os portadores de carga.

Os avanços nas técnicas de síntese de diamante hidrogenado por deposição química a partir da fase vapor (CVD) têm permitido a produção de diamante em maior escala e com custos reduzidos. Esse progresso abre novas possibilidades para a fabricação de dispositivos eletrônicos mais eficientes e confiáveis, principalmente em ambientes extremos, como os encontrados em dispositivos aeroespaciais, nucleares e de alta potência (WORT; BALMER, 2008).

Graças às suas propriedades excepcionais, o diamante tem se mostrado uma alternativa promissora a outros materiais semicondutores em dispositivos de eletrônica de potência, como transistores de alta tensão, diodos de alta eficiência e circuitos de comutação rápida. O diamante também é altamente competitivo em dispositivos de radiofrequência, onde a alta mobilidade de portadores de carga e a excelente dissipação de calor são essenciais para garantir desempenho eficiente e confiável.

Em particular, os transistores de efeito de campo (FETs) baseados em diamante têm atraído crescente interesse, especialmente para aplicações em que as condições operacionais exigem dispositivos que possam operar em temperaturas elevadas e sob tensões muito altas sem sofrer degradação. Além disso, devido à sua grande rigidez mecânica, o diamante pode ser integrado a sistemas eletrônicos em condições de alta vibração e impacto, o que é vantajoso em aplicações aeroespaciais e militares.

1.3 Nitreto de Boro Hexagonal

O nitreto de boro hexagonal (h-BN) é um material cerâmico com uma estrutura cristalina bidimensional, semelhante ao grafeno, composto por átomos de boro e nitrogênio dispostos de maneira alternada em uma rede hexagonal. Embora o h-BN tenha sido tradicionalmente utilizado

como isolante térmico e elétrico, suas propriedades únicas o tornam altamente promissor para uma gama de aplicações tecnológicas avançadas, particularmente na eletrônica de potência e na fabricação de dispositivos semicondutores de alta performance ([SHTANSKY et al., 2022](#)).

A estrutura do h-BN é composta por camadas de átomos dispostas em uma rede hexagonal, com interações fracas de forças de van der Waals entre as camadas adjacentes. Isso confere ao material uma estrutura bidimensional, similar à do grafeno, mas com características eletrônicas muito distintas. O h-BN é um isolante elétrico, com uma largura de banda proibida de aproximadamente 5,9 eV, o que o torna adequado para atuar como dielétrico em dispositivos de alta voltagem e em sistemas de comutação rápida ([ROY et al., 2021](#)).

Em comparação com outros materiais isolantes, o h-BN exibe uma extrema estabilidade térmica e uma alta resistência a radiação, tornando-o ideal para ambientes que envolvem altas temperaturas ou exposição a radiação intensa, como em aplicações aeroespaciais, nucleares e em dispositivos de radiofrequência.

O h-BN também é amplamente reconhecido por suas excelentes propriedades térmicas. Sua alta condutividade térmica (superior à do silício) permite que ele desempenhe um papel crucial na dissipação de calor em dispositivos eletrônicos avançados. Além disso, a sua resistência mecânica é considerável, o que o torna resistente ao desgaste e a condições de operação adversas ([WANG; MA; SUN, 2017](#)).

Devido à sua alta estabilidade química e resistência à oxidação, o h-BN é frequentemente utilizado em sistemas onde a proteção contra degradação ambiental é necessária, como em dispositivos eletrônicos para aplicações em altas temperaturas ou em ambientes agressivos.

No contexto dos FETs, o h-BN tem sido utilizado como material dielétrico devido à sua alta resistência à ruptura dielétrica e ao fato de ser quimicamente estável em contato com o diamante. Sua aplicação como material de gate em dispositivos semicondutores, como no caso dos FETs baseados em diamante, tem mostrado vantagens em termos de isolamento elétrico e suporte a altas tensões. No entanto, a interação entre o h-BN e o diamante na interface D/h-BN ainda é um tema de estudo, pois a mobilidade dos portadores de carga, embora promissora, ainda não atingiu os níveis ideais, devido a fatores como defeitos estruturais e dificuldades na formação de uma interface ideal ([SASAMA et al., 2020](#)).

A tecnologia de dispositivos 2D também se beneficia das propriedades do h-BN. Sua aplicação em transistores de efeito de campo bidimensionais (FETs 2D) está sendo amplamente explorada, visto que o h-BN pode atuar como um excelente isolante em sistemas de camadas finas. Além disso, o h-BN possui uma banda proibida larga, o que o torna ideal para dispositivos de comutação e circuitos integrados em plataformas de nanoeletrônica.

2 Desenvolvimento

2.1 Materiais e Métodos

A pesquisa foi realizada através de simulações de dinâmica molecular, com o objetivo de investigar diversas estruturas contendo a interface D/h-BN. Assim, o método escolhido foi o método reaxFF, que é um método clássico que consiste em um campo de força reativo que considera distância e energia das ligações para calcular e computar cada ligação entre os átomos, desenvolvido pelo Prof. Adri van Duin e colegas (DUIN et al., 2001). O campo também considera potenciais de Coulumb e de van der Waals, para interações de átomos não ligados, facilitando a realização de simulações com muitos átomos sem o custo de realizar cálculos com mecânica quântica (SENFLE et al., 2016). Em cada uma das simulações realizadas, o campo utilizado foi desenvolvido por Pai et al, (PAI; YEO; HAN, 2016). A escolha do campo foi realizada devido a problemas observados durante simulações iniciais utilizando outros campos, como estruturas apresentando movimento reduzido e travado.

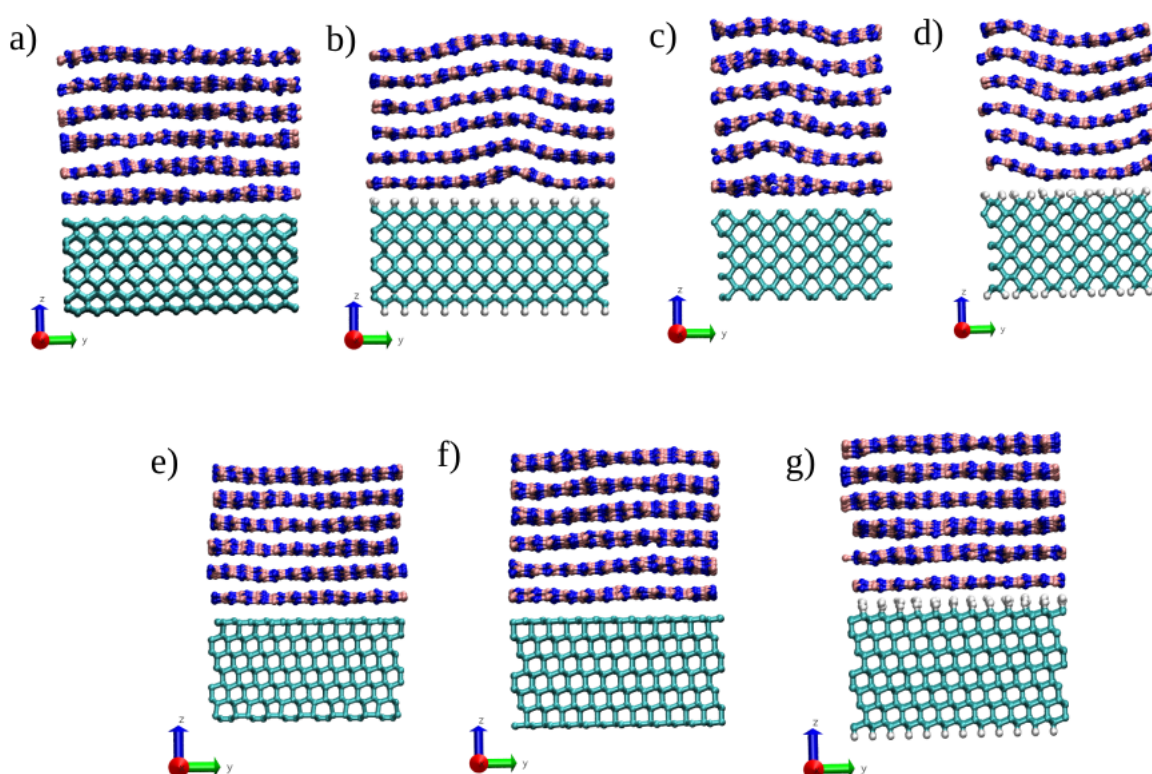
Para cada uma das simulações realizadas, foi empregado um ensemble NVT (Número de partículas, volume e temperatura constantes), utilizando um intervalo de tempo (step) de 0,1 fs e condições de contorno periódicas nas direções x e y. A cada simulação, a estrutura passou por um processo de rampa térmica, cujo objetivo foi aquecer o sistema até atingir a temperatura de 300 K. Após esse aquecimento inicial, a estrutura foi monitorada de maneira contínua até atingir um estado estável, o que foi avaliado por meio da análise da variação da energia potencial do sistema com cada passo de simulação.

O software utilizado para a realização das simulações foi o *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) (THOMPSON et al., 2022), amplamente utilizado para simulações de sistemas atômicos e moleculares. A viabilidade desta pesquisa foi possibilitada pelos recursos computacionais fornecidos pelo Núcleo de Computação Científica (NCC/GridUNESP), da Universidade Estadual Paulista (UNESP), que disponibilizou a infraestrutura necessária para o processamento das simulações em larga escala. Todas as estruturas mencionadas foram desenvolvidas com o auxílio do software *Visual Molecular Dynamics* (VMD) (HUMPHREY; DALKE; SCHULTEN, 1996), que é utilizado para a visualização e análise de simulações moleculares.

As simulações referem-se a três diferentes heteroestruturas, cada uma composta por diamante e nitreto de boro hexagonal (h-BN), com o diamante orientado de diferentes formas. Foram consideradas duas heteroestruturas com a superfície do diamante orientada na direção 100: uma delas com as terminações dos átomos de carbono passivadas com hidrogênio (denominada HD100/h-BN) e outra com as ligações carbono-carbono reconstruídas

de acordo com a configuração usual (denominada D100/h-BN). A primeira configuração (HD100/h-BN) contém um total de 4320 átomos, enquanto a segunda (D100/h-BN) possui 4032 átomos. Também foram simuladas duas heteroestruturas com a superfície do diamante orientada na direção 110: uma hidrogenada (HD110/h-BN, com 2016 átomos) e outra com as ligações reconstruídas (D110/h-BN, com 1824 átomos). Além disso, foram investigadas três heteroestruturas com a superfície do diamante orientada na direção 111, sendo uma hidrogenada (HD111/h-BN, com 3360 átomos) e duas configuradas com diferentes tipos de reconstrução nas ligações, denominadas 1x1D111/h-BN (com 3120 átomos) e 2x1D111/h-BN (também com 3120 átomos). As configurações das heteroestruturas estão ilustradas na Figura 1.

Figura 1 – Estruturas utilizadas após simulações.



Acima estão as estruturas utilizadas após a realização das simulações. As estruturas, da esquerda para a direita, de cima para baixo, são a) D100/h-BN, b) HD100/h-BN, c) D110/h-BN, d) HD110/h-BN, e) 2x1D111/h-BN, f) 1x1D111/h-BN, e g) HD111/h-BN. Em cada estrutura, os átomos de carbono são representados em ciano, os átomos de hidrogênio são brancos, os átomos azuis são boro, e os átomos rosados são nitrogênio. Fonte: Elaborada pelo autor com o software Tachyon (STONE, 1998).

Para fins de comparação, todas as simulações foram conduzidas de duas maneiras: uma com todos os átomos livres e outra com as camadas inferiores mantidas fixas, permitindo avaliar possíveis diferenças significativas entre os dois métodos.

Após a termalização das estruturas, utilizou-se um programa em Python para identificar

e selecionar os steps nos quais o sistema apresentava estabilidade. Em seguida, um código em Fortran foi empregado para calcular valores médios de posição, carga, energia potencial e energia cinética para cada átomo. Além disso, cada estrutura foi segmentada em *chunks*, compostos por átomos, de modo que cada chunk correspondesse a uma camada atômica, variando com a coordenada *z*. Para cada um deles, foram obtidas as médias dos mesmos parâmetros considerados para os átomos individuais, tornando possível avaliar com maior precisão a maneira como diferentes variáveis se comportam em diferentes pontos da estrutura.

A partir dos dados extraídos dos chunks, foram construídos gráficos utilizando o software Origin ([OriginLab Corporation, 2024](#)), de modo a analisar a energia potencial, energia cinética e carga média por átomo em função da coordenada *z* em cada estrutura, analisando como as partes se relacionam entre si.

2.2 Resultados e Discussão

2.2.1 Comparação entre simulações com camadas fixas e soltas

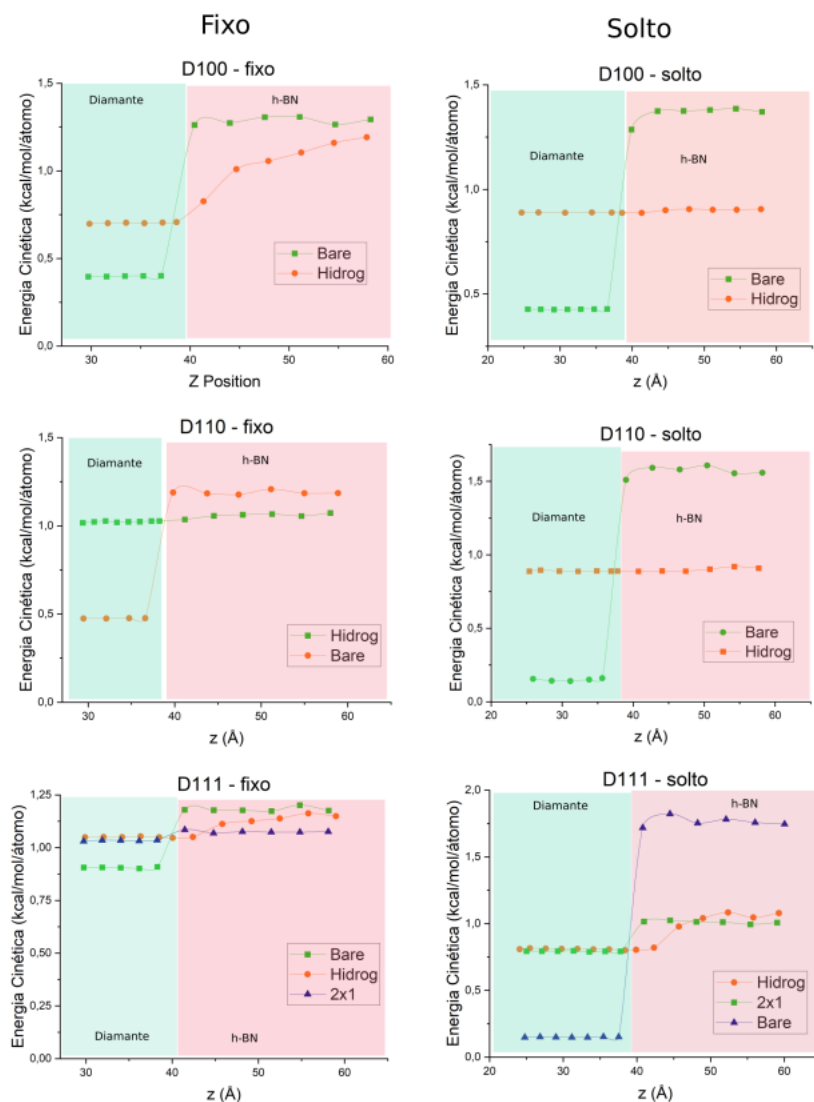
Antes de realizar a análise detalhada dos resultados, foi realizada uma comparação preliminar entre as simulações considerando a fixação das camadas inferiores das estruturas e aquelas em que todas as camadas estavam livres para movimentação. Observou-se que, para os gráficos de energia potencial e carga elétrica média por átomo, não houve grandes discrepâncias entre as duas abordagens. Entretanto, diferenças significativas foram observadas nos gráficos de energia cinética, atribuídas à mobilidade alterada da estrutura ao imobilizar os átomos. Essa diferença é apresentada na Figura 2, onde a superfície verde representa as camadas de diamante e a superfície avermelhada as camadas de h-BN. De maneira geral, estruturas contendo hidrogênio apresentaram menor variação na energia cinética entre HD e h-BN, enquanto estruturas sem hidrogênio mostraram diferenças mais significativas, especialmente quando soltas.

Durante a realização das simulações também foi percebida uma redução no número de passos necessários para que a estrutura se estabilizasse após o término da rampa térmica. Devido a essas observações, em um momento futuro, devido ao menor custo computacional, e semelhança entre resultados obtidos, as simulações poderiam ser realizadas apenas com as estruturas fixas. O restante do presente trabalho apresentará os dados referentes às simulações realizadas com as estruturas soltas, sendo a análise válida para ambos os conjuntos de dados, e os gráficos referentes às simulações fixas podem ser encontrados no Apêndice A.

2.2.2 Orientação 100 da superfície do diamante (D100)

Para a orientação 100 da superfície do diamante, os gráficos de energia potencial e carga elétrica divididos por chunks, montados a partir das simulações com a estrutura

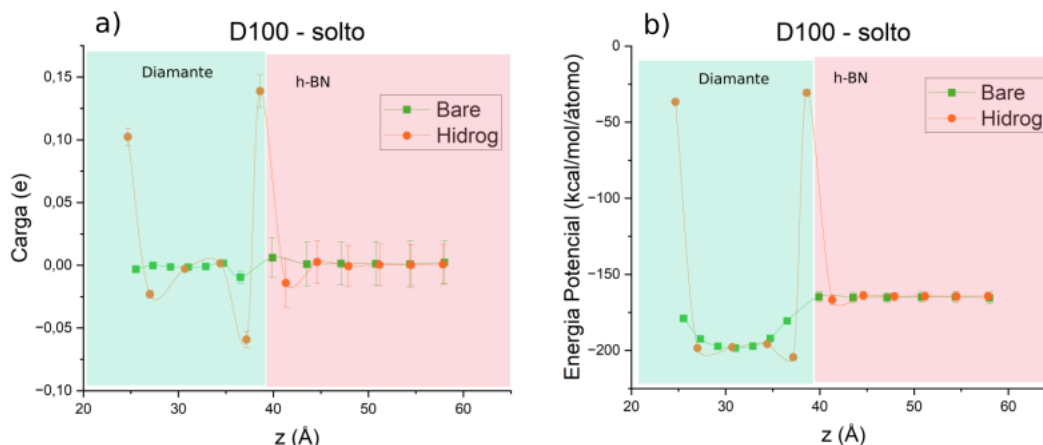
Figura 2 – Comparação dos gráficos de energia cinética para estruturas fixas e soltas.



Gráficos de energia cinética para todas as 3 orientações do diamante analisadas. À esquerda se encontram as estruturas que foram simuladas com as camadas inferiores fixas, e à direita as que foram simuladas soltas. As estruturas, de baixo para cima são D100, D110, e D111, respectivamente. Para cada gráfico as regiões esverdeadas e avermelhadas correspondem, respectivamente, às regiões contendo diamante e hBN, com os pontos laranjas representando estruturas hidrogenadas, quadrados verdes representando superfícies reconstruídas, e, no caso da estrutura D111, triângulos azuis representando a estrutura com a reconstrução 2x1. Fonte: Elaborada pelo autor.

completamente solta, são apresentados na Figura 3. Observa-se que a diferença de energia potencial presente na interface da estrutura hydrogenada (HD) é significativamente maior do que para a estrutura sem hidrogênio (D), aproximadamente 150 kcal/mol/átomo comparado a menos de 25 kcal/mol/átomo.

Figura 3 – Energia potencial e carga para o diamante 100, com a estrutura solta.



A figura apresenta os gráficos de a) carga e b) energia potencial para a estrutura contendo o diamante com a terminação 100, em que a parte do gráfico com o fundo esverdeado representa o diamante, enquanto a parte avermelhada representa o hBN. Os quadrados verdes e pontos laranjas representam a estrutura sem e com a camada de hidrogênio na superfície, respectivamente. Fonte: Elaborada pelo autor.

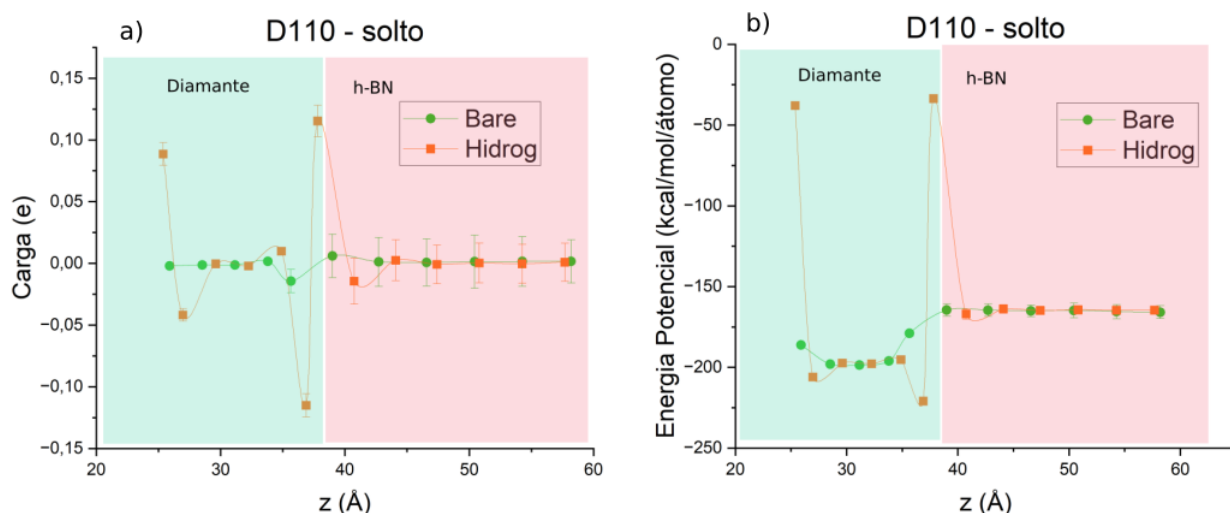
A medição da distância interfacial mostra que a aproximação entre HD e h-BN é maior do que para D, sendo aproximadamente 2,7 Å para HD e 3,4 Å para D. Essa maior aproximação é corroborada pelo gráfico de carga, que indica uma maior interação eletrostática entre a camada de hidrogênio do diamante e a primeira camada de h-BN. A camada de hidrogênio apresenta carga média de +0,13 e, enquanto a camada de h-BN mantém carga média de -0,02 e, formando um dipolo elétrico orientado do h-BN em direção ao diamante. Esta interação eletrostática mais intensa explica a redução da distância interfacial e sugere uma interface mais estável para a estrutura hydrogenada. Em contraste, a superfície de diamante não hydrogenada apresenta variação de cargas muito menor, com apenas uma leve variação de carga na interface, menor que 0,05 e, resultando assim em interações eletrostáticas mais fracas e, consequentemente, maior distância interfacial.

2.2.3 Orientações 110 e 111 do diamante (D110 e D111)

Para a orientação 110, os gráficos de energia potencial e carga apresentados na Figura 4 mostram comportamentos semelhantes aos observados para D100. A distância interfacial é de 2,9 Å para HD e 3,3 Å para D, mantendo a tendência de maior aproximação na presença de hidrogênio. Já para a orientação 111, considerando as terminações 2×1 e 1×1, os valores de distância interfacial são de 2,4 Å para HD, 3,1 Å para D com terminação 2×1 e 3,2 Å para D

com reconstrução 1×1 . Os gráficos de energia potencial, apresentados na Figura 5, mostram picos de aproximadamente -25 kcal/mol/átomo para as estruturas hidrogenadas, consistentes em todas as interfaces analisadas.

Figura 4 – Gráficos de energia potencial e carga para a heteroestrutura solta composta pelo diamante 110.

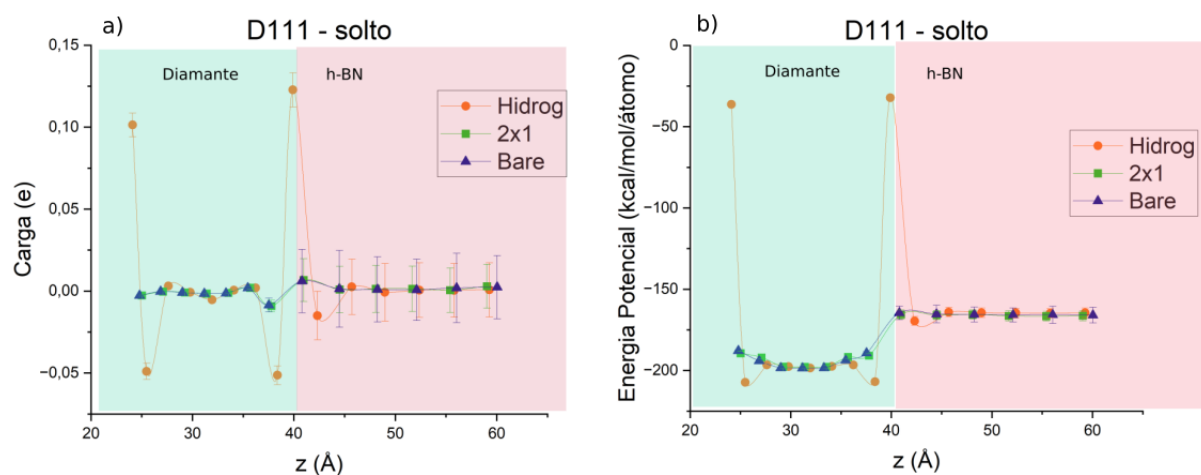


Conjunto de gráficos contendo dados referentes à a) carga e b) energia potencial originados a partir das simulações realizadas com a estrutura solta contendo diamante com superfície 110 e h-BN. Em cada gráfico, a região esverdeada mostra a seção dos chunks contendo o diamante, enquanto a seção avermelhada mostra a seção do h-BN. Em ambas as imagens, os pontos demarcados por círculos verdes representam os valores encontrados na estrutura com a superfície do diamante reconstruída, enquanto os quadrados laranjas mostram a superfície hidrogenada. Fonte: Elaborada pelo autor.

Realizando a análise das cargas para as estruturas D110/h-BN e HD110/h-BN revela que a camada de hidrogênio novamente apresenta carga positiva, enquanto o h-BN adjacente mantém carga negativa. Isso gera um dipolo elétrico orientado em direção ao diamante, favorecendo a atração Coulombiana entre as superfícies. Embora a magnitude do dipolo seja ligeiramente menor que na superfície 100, a presença do hidrogênio continua a fortalecer a interface em comparação à estrutura sem hidrogênio.

Paralelamente, a análise de cargas da estrutura 111 evidencia que a camada de hidrogênio apresenta maior eletropositividade para a orientação 111 do que para as superfícies 100 e 110, reforçando o dipolo orientado do h-BN em direção ao diamante. Essa estrutura também apresenta a menor distância interfacial medida, indicando que a geometria da superfície 111 permite uma redistribuição de carga mais eficiente e maximiza a atração eletrostática. Como resultado, a superfície 111 apresenta a interface mais estável, combinando proximidade física com forte interação de natureza eletrostática.

Figura 5 – Montagem de gráficos de energia potencial e carga para todas as estruturas soltas contendo a superfície 111.



Gráficos produzidos referentes à a) carga e b) energia potencial, considerando os dados obtidos pelas simulações referentes à heteroestruturas contendo diamante orientado na direção 111. Neles a estrutura hydrogenada está representada por círculos laranjas, e as reconstruções 1x1 e 2x1 estão representadas, respectivamente, por triângulos azuis e quadrados verdes. Fonte: Elaborada pelo autor.

3 Conclusão

Os resultados das simulações de dinâmica molecular demonstram que a hidrogenação da superfície do diamante é o fator que mais influencia a estabilidade da interface D/h-BN. Conforme sintetizado no Quadro 1, todas as heteroestruturas hidrogenadas apresentaram menores distâncias interfaciais (2,4–2,9 Å) em comparação às suas versões não hidrogenadas (3,1–3,4 Å), além de maior redistribuição de carga, caracterizada por superfícies de diamante eletropositivas (+0,12–0,13 e) e primeiras camadas de h-BN eletronegativas (–0,02 a –0,03 e). Essa polarização gera um dipolo que fortalece a interação eletrostática, refletindo-se em variações de energia potencial mais intensas, especialmente nas orientações 100 e 110, onde os valores atingem 150 kcal/mol/átomo.

Quadro 1 – Valores médios para cada estrutura após a realização das simulações.

Estrutura	Distância interfacial (Å)	Carga média na superfície do D (e)	Carga média do primeiro h-BN (e)	Variação de energia potencial na interface (kcal/mol/átomo)
D100/h-BN	3,4	0	0	25
HD100/h-BN	2,7	+0,13	-0,02	150
D110/h-BN	3,3	0	0	25
HD110/h-BN	2,9	+0,12	-0,02	150
2x1D111/h-BN	3,1	0	0	50
1x1D111/h-BN	3,2	0	0	50
HD111/h-BN	2,4	+0,13	-0,03	50

Fonte: Elaborado pelo autor.

Entre todas as configurações avaliadas, a orientação 111 hidrogenada apresentou a interface mais favorável, combinando a menor distância interfacial (2,4 Å) com a maior diferença de carga entre as camadas. Já as superfícies não hidrogenadas exibiram interações mais fracas, com cargas praticamente nulas e energias potenciais reduzidas.

A comparação entre simulações com camadas fixas e soltas mostrou pouca diferença nos parâmetros principais, indicando que métodos com camadas fixas podem ser utilizados em trabalhos futuros com menor custo computacional.

De modo geral, os dados consolidam que a hidrogenação melhora significativamente o acoplamento interfacial e a estabilidade da heteroestrutura D/h-BN, oferecendo subsídios importantes para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos de alta potência, em especial FETs baseados em diamante.

Referências

CAVE, K. J. S.; WILSON, B. L. H. Field effect transistors. *Science Progress (1933-)*, Temporary Publisher, v. 64, n. 255, p. 323–339, 1977. ISSN 00368504, 20477163. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/43420422>>.

DUIN, A. C. T. van; DASGUPTA, S.; LORANT, F.; GODDARD, W. A. Reaxff: a reactive force field for hydrocarbons. *The Journal of Physical Chemistry A*, v. 105, n. 41, p. 9396–9409, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/jp004368u>>.

HUMPHREY, W.; DALKE, A.; SCHULTEN, K. VMD – Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, v. 14, p. 33–38, 1996.

KAWARADA, H. Diamond p-fets using two-dimensional hole gas for high frequency and high voltage complementary circuits. *Journal of Physics D: Applied Physics*, IOP Publishing, v. 56, n. 5, p. 053001, dec 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1361-6463/aca61c>>.

KOIZUMI, S.; UMEZAWA, H.; PERNOT, J.; SUZUKI, M. *Power Electronics Device Applications of Diamond Semiconductors*. Elsevier Science, 2018. (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials). ISBN 9780081021835. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=WKigswEACAAJ>>.

LI, B.; ZHANG, X.; ZHANG, L.; MA, Y.; TANG, W.; CHEN, T.; HU, Y.; ZHOU, X.; BIAN, C.; ZENG, C.; JU, T.; ZENG, Z.; ZHANG, B. A comprehensive review of recent progress on enhancement-mode -ga2o3 fets: Growth, devices and properties. *Journal of Semiconductors*, Chinese Institute of Electronics, v. 44, n. 6, p. 061801, jun 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/1674-4926/44/6/061801>>.

MENEGHESSO, G.; MENEGHINI, M.; ZANONI, E. Breakdown mechanisms in algan/gan hemts: An overview. *Japanese Journal of Applied Physics*, The Japan Society of Applied Physics, v. 53, n. 10, p. 100211, sep 2014. Disponível em: <<https://doi.org/10.7567/JJAP.53.100211>>.

MIDDYA, S.; BHATTACHARJEE, M.; BANDYOPADHYAY, D. A review on use of nanomaterials in fets for sensing applications. In: _____. *Nanotechnology in Miniaturization: An Emerging Trend to Fabricate Future Devices*. Cham: Springer Nature Switzerland, 2024. p. 89–111.

OriginLab Corporation. *Origin(Pro), Version 2024b*. Northampton, MA, USA: [s.n.], 2024. Software, accessed on [date you accessed the software or website]. Disponível em: <<https://www.originlab.com>>.

PAI, S. J.; YEO, B. C.; HAN, S. S. Development of the reaxffcbn reactive force field for the improved design of liquid cbn hydrogen storage materials. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, The Royal Society of Chemistry, v. 18, p. 1818–1827, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP05486A>>.

ROY, S.; ZHANG, X.; PUTHIRATH, A. B.; MEIYAZHAGAN, A.; BHATTACHARYYA, S.; RAHMAN, M. M.; BABU, G.; SUSARLA, S.; SAJU, S. K.; TRAN, M. K.; SASSI, L. M.; SAADI, M. A. S. R.; LAI, J.; SAHIN, O.; SAJADI, S. M.; DHARMARAJAN, B.; SALPEKAR, D.; CHAKINGAL, N.; BABURAJ, A.; SHUAI, X.; ADUMBUMKULATH, A.;

MILLER, K. A.; GAYLE, J. M.; AJNSZTAJN, A.; PRASANKUMAR, T.; HARIKRISHNAN, V. V. J.; OJHA, V.; KANNAN, H.; KHATER, A. Z.; ZHU, Z.; IYENGAR, S. A.; AUTRETO, P. A. d. S.; OLIVEIRA, E. F.; GAO, G.; BIRDWELL, A. G.; NEUPANE, M. R.; IVANOV, T. G.; TAHA-TIJERINA, J.; YADAV, R. M.; AREPALLI, S.; VAJTAI, R.; AJAYAN, P. M. Structure, properties and applications of two-dimensional hexagonal boron nitride. *Advanced Materials*, v. 33, n. 44, p. 2101589, 2021. Disponível em: <<https://advanced.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adma.202101589>>.

SASAMA, Y.; KAGEURA, T.; IMURA, M.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; UCHIHASHI, T.; TAKAHIDE, Y. High-mobility p-channel wide-bandgap transistors based on hydrogen-terminated diamond/hexagonal boron nitride heterostructures. *Nature Electronics*, v. 5, n. 1, p. 37–44, Jan 2022. ISSN 2520-1131. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41928-021-00689-4>>.

SASAMA, Y.; KAGEURA, T.; KOMATSU, K.; MORIYAMA, S.; INOUE, J.-i.; IMURA, M.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; UCHIHASHI, T.; TAKAHIDE, Y. Charge-carrier mobility in hydrogen-terminated diamond field-effect transistors. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 127, n. 18, maio 2020. ISSN 1089-7550. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/5.0001868>>.

SASAMA, Y.; KOMATSU, K.; MORIYAMA, S.; IMURA, M.; TERAJI, T.; WATANABE, K.; TANIGUCHI, T.; UCHIHASHI, T.; TAKAHIDE, Y. High-mobility diamond field effect transistor with a monocrystalline h-bn gate dielectric. *APL Materials*, v. 6, n. 11, p. 111105, 11 2018. ISSN 2166-532X. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5055812>>.

SENFTE, T. P.; HONG, S.; ISLAM, M. M.; KYLASA, S. B.; ZHENG, Y.; SHIN, Y. K.; JUNKERMEIER, C.; ENGEL-HERBERT, R.; JANIK, M. J.; AKTULGA, H. M.; VERSTRAELEN, T.; GRAMA, A.; DUIN, A. C. T. van. The reaxff reactive force-field: development, applications and future directions. *npj Computational Materials*, v. 2, n. 1, p. 15011, Mar 2016. ISSN 2057-3960. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2015.11>>.

SHTANSKY, D. V.; MATVEEV, A. T.; PERMYAKOVA, E. S.; LEYBO, D. V.; KONOPATSKY, A. S.; SOROKIN, P. B. Recent progress in fabrication and application of bn nanostructures and bn-based nanohybrids. *Nanomaterials*, v. 12, n. 16, 2022. ISSN 2079-4991. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2079-4991/12/16/2810>>.

STONE, J. An Efficient Library for Parallel Ray Tracing and Animation. Dissertação (Mestrado) — Computer Science Department, University of Missouri-Rolla, April 1998.

THOMPSON, A. P.; AKTULGA, H. M.; BERGER, R.; BOLINTINEANU, D. S.; BROWN, W. M.; CROZIER, P. S.; VELD, P. J. in 't; KOHLMAYER, A.; MOORE, S. G.; NGUYEN, T. D.; SHAN, R.; STEVENS, M. J.; TRANCHIDA, J.; TROTT, C.; PLIMPTON, S. J. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Comp. Phys. Comm.*, v. 271, p. 108171, 2022.

TORDJMAN, M. Diamond electronics with high carrier mobilities. *Nature Electronics*, v. 5, n. 1, p. 21–22, Jan 2022. ISSN 2520-1131. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41928-021-00707-5>>.

WANG, J.; MA, F.; SUN, M. Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications. *RSC Adv.*, The Royal Society of Chemistry, v. 7, p. 16801–16822, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/C7RA00260B>>.

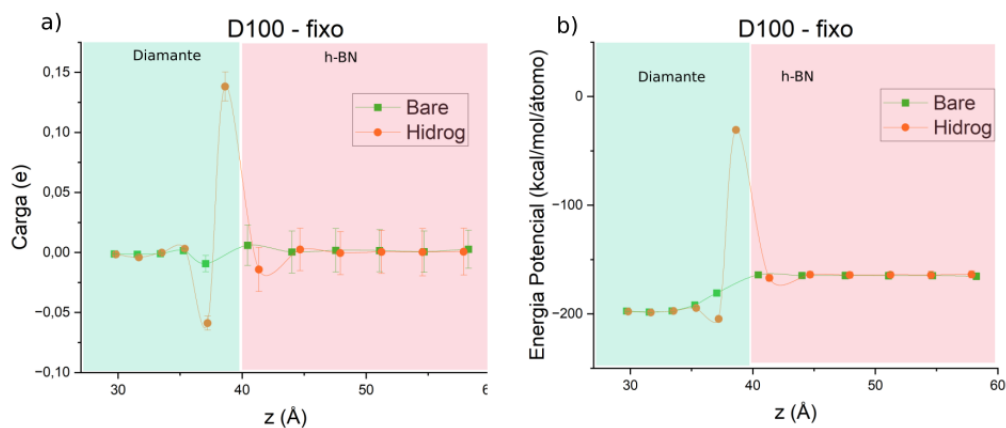
WORT, C. J.; BALMER, R. S. Diamond as an electronic material. *Materials Today*, v. 11, n. 1, p. 22–28, 2008. ISSN 1369-7021. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702107703498>>.

YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. *Sears e Zemansky Física IV: Ótica e Física Moderna*. 10ª. ed. São Paulo: Pearson Addison Wesley, 2004.

Apêndices

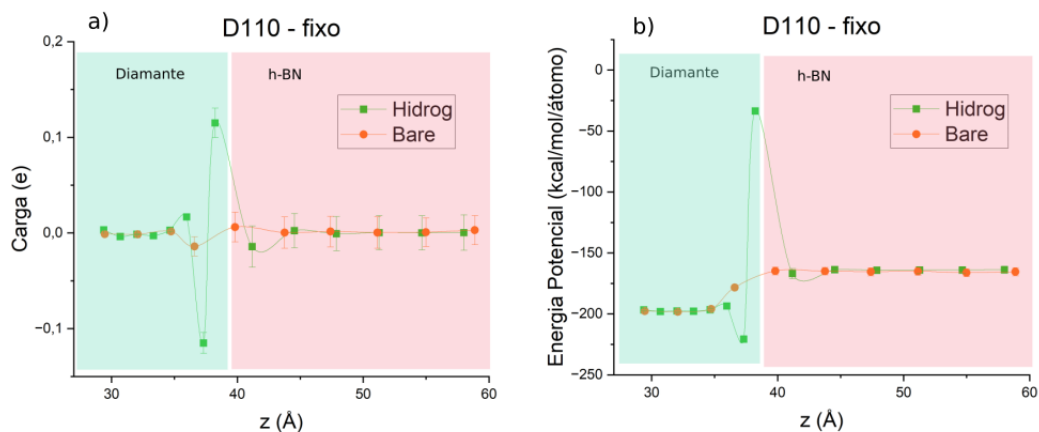
APÊNDICE A - Gráficos referentes às simulações realizadas com as primeiras camadas da estrutura fixas.

Figura 6 – Gráficos de carga e energia potencial para as estruturas fixas contendo diamante com superfície 100.



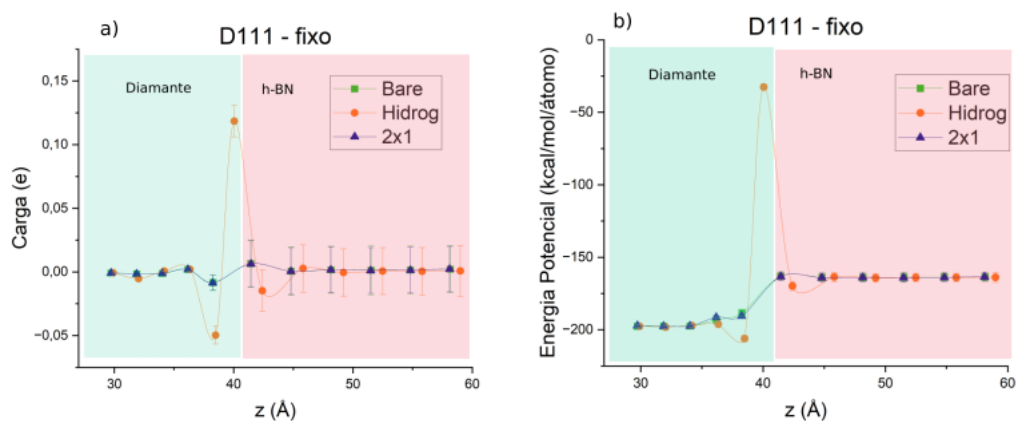
a) carga e b) energia potencial para estruturas D100/h-BN e HD100/h-BN com as camadas inferiores fixas, em que os quadrados verdes são referentes à HD e os pontos laranjas são referentes à D, com a região esverdeada sendo a parte da estrutura contendo diamante e a parte avermelhada contendo o h-BN. Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 7 – Gráficos montados referentes às simulações com estruturas contendo D110 com as duas primeiras camadas fixas.



Gráficos contendo a) carga e b) energia potencial para as heteroestruturas que utilizam o diamante na direção 110. As regiões esverdeadas e avermelhadas apresentam, respectivamente, o diamante e o h-BN, enquanto os pontos verdes e quadrados laranjas apresentam, respectivamente, as estruturas hidrogenadas e reconstruídas. Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 8 – Carga e energia potencial para as estruturas fixas contendo D111.



Gráficos montados a partir das estruturas contendo D111, referentes à a) carga e b) energia potencial. Cada gráfico apresenta uma região esverdeada representando o diamante e uma região avermelhada representando o h-BN, com as estruturas 1x1, 2x1 e hidrogenadas sendo representadas, respectivamente, por quadrados verdes, triângulos azuis e pontos laranjas. Fonte: Elaborada pelo autor.