

## Biblioteca Digital do ITA

### Teses, Dissertações e Trabalho de Graduação

Acesso livre

<http://www.bdita.bibl.ita.br/>

### Orientações de uso e pesquisa (BDITA)

#### Teses / Dissertações

Base de Teses de Doutorado, Dissertações de Mestrado Acadêmico e de Mestrado Profissional, com textos na íntegra, publicados a partir de **1984**.

#### Trabalhos de Graduação

Trabalhos de Graduação (TGs) com textos na íntegra, publicados a partir de **1952**.

- **Opção 1- Pesquisa pelo Menu:** Realize a pesquisa utilizando os itens do menu ([Título](#), [Autores](#), [Programas](#) (Tese/Dissertação), [Curso](#) (TG), [Orientadores](#) e [Coorientadores](#)) e ou filtro ([Ano de Publicação](#) e [Curso](#)).
- No resultado da pesquisa, selecione o título ou o autor do registro encontrado, para acessar a referência ou texto completo.

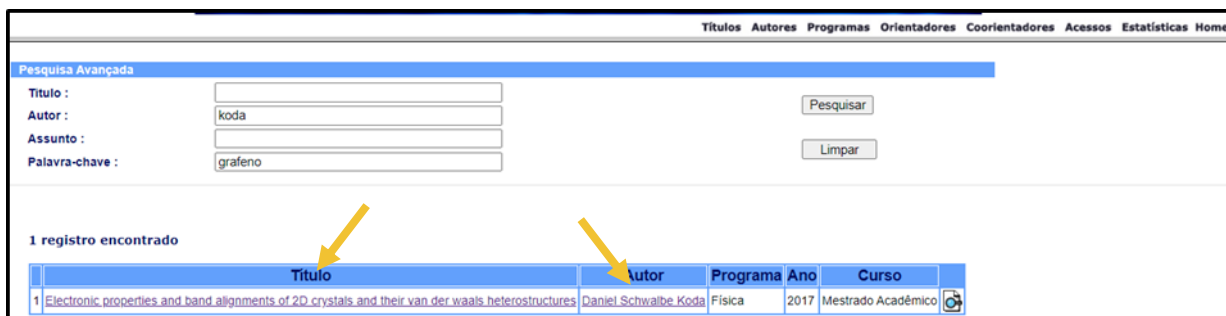


The screenshot shows the 'Consulta de Programas' menu with the following data:

Programa	T/D	Área de Concentração	T/D
1 Ciências (*)	4	Engenharia Aeronáutica (*)	1
		Matemática Aplicada (*)	3
2 Ciências e Tecnologias Especiais	337	Física e Matemática Aplicadas	60
		Gestão Tecnológica	33
		Propulsão Espacial e Hiperfônica	52
		Química dos Materiais	76
		Sensores e Atuadores Especiais	52
		Sistemas Especiais, Ensaios e Lançamentos	64
3 Engenharia Aeronáutica e Mecânica	2740	Aerodinâmica, Propulsão e Energia (*)	339
		Dinâmica de Sistemas Aeroespaciais e Mecatrônica (*)	8
		Dinâmica de Sistemas e Mecatrônica (*)	1
		Engenharia Aeroespacial (*)	71
		Engenharia Aeronáutica	857

Annotations in the image: 'Menu' points to the top navigation bar; 'Filtro' points to the search filters on the left; 'Pesquisa Avançada' points to the 'Pesquisa Avançada' button at the bottom.

- **Opção 2- Pesquisa Avançada:** Selecione o item "Pesquisa Avançada" para realizar a busca nos campos ([Título](#), [Autor](#), [Assunto](#) ou [Palavra-Chave](#)).
- No resultado da pesquisa, selecione o **título** ou o **autor** do registro encontrado, para acessar a referência ou o texto completo.



The screenshot shows the 'Pesquisa Avançada' search form with the following fields:

- Título:
- Autor:
- Assunto:
- Palavra-chave:

Below the form, it shows '1 registro encontrado' with the following table:

	Título	Autor	Programa	Ano	Curso
1	Electronic properties and band alignments of 2D crystals and their van der waals heterostructures	Daniel Schwalbe Koda	Física	2017	Mestrado Acadêmico

Annotations in the image: Yellow arrows point to the 'Título' and 'Autor' columns in the results table.

## Texto Completo

- Na tela de “Referência Completa” do trabalho selecionado, clique em [Visualizar] e caso já esteja cadastrado na BDITA, insira o e-mail e a senha, para o download do texto completo (pdf).

Referência Completa	
Título:	Electronic properties and band alignments of 2D crystals and their van der Waals heterostructures
Autor:	Dimitri Sbricrache Kosta
Programa:	Física
Área de Concentração:	Física Atômica e Molecular
Orientador:	Lara Kishi Teles
Ano de Publicação:	2017
Curso:	Mestrado Acadêmico
Assuntos:	Gráficos Semicondutores Teorias hidrodinâmicas Teoria de densidade funcional Heteroestruturas de van der Waals Física
Resumo:	The scientific advance of two-dimensional (2D) crystals such as graphene and its analogues has developed a new paradigm in solid state physics. By combining their properties in van der Waals heterostructures, not only technological applications are possible, but also the study of physical phenomena in 2D interfaces. Unique properties arise in these stackings by rotation, pressure, hybridization and deformations. Accompanying the growing experiments of these systems, this masters dissertation is theoretically based to model and calculate the contact of 2D materials in vertical heterostructures by employing quantum mechanics and density functional theory. First of all, a method was developed to produce and perform simulations of 2D stacks, taking into account computational cost and the creation of realistic systems. The technique, named “noncollinear lattice method”, is in agreement with other theoretical and experimental data. It has been applied to a database of 10 2D crystals, more than 700 two-computational cost combinations are found. The application of the method presents a series of interesting systems for ab initio simulations. The first examples are systems with HfS <sub>2</sub> , ZrS <sub>2</sub> and MoS <sub>2</sub> , whose stabilities and electronic properties in the intercalated contact are studied. Then, similar results are applied to SiN <sub>2</sub> MoS <sub>2</sub> heterostructures and their effects on the heterostructure electronic properties are analyzed. Interfaces with phosphorene, MoS <sub>2</sub> and SiSe <sub>2</sub> are also investigated. Effects of van der Waals interaction on structural and electronic properties of the bilayers are significant, opening the phosphorene gap and leading to hybridizations between layers. Band alignments and gaps are modulated by contact, external pressure and electric field. Finally, the validity of the Anderson rule is questioned by a comprehensive analysis of the bilayer systems. Cases in which this rule fails are analyzed, and a theory is proposed to explain these discrepancies. This work is important in the investigation of band alignments and physical phenomena in 2D interfaces with applications to electronic and optoelectronic devices.
Data de Defesa:	19-12-2017
Texto na íntegra:	<a href="#">[Visualizar]</a>

## Registro para acesso ao Trabalho Acadêmico

- Para o primeiro acesso é necessário se registrar.
- Para isto, selecione “Se você ainda não se registrou, clique aqui”.

Por favor, identifique-se para continuar o download

E-mail:

Senha:  (case sensitive)

[Esqueceu sua senha ?](#)

[Se você ainda não se registrou, clique aqui](#)

- No campo “Instituição/Empresa”, localize e selecione a empresa a qual esteja vinculado e em seguida preencha todos os outros campos: nome, senha, confirme a senha e e-mail (institucional ou particular).

Por favor, informe os seguintes dados :

Instituição/Empresa:

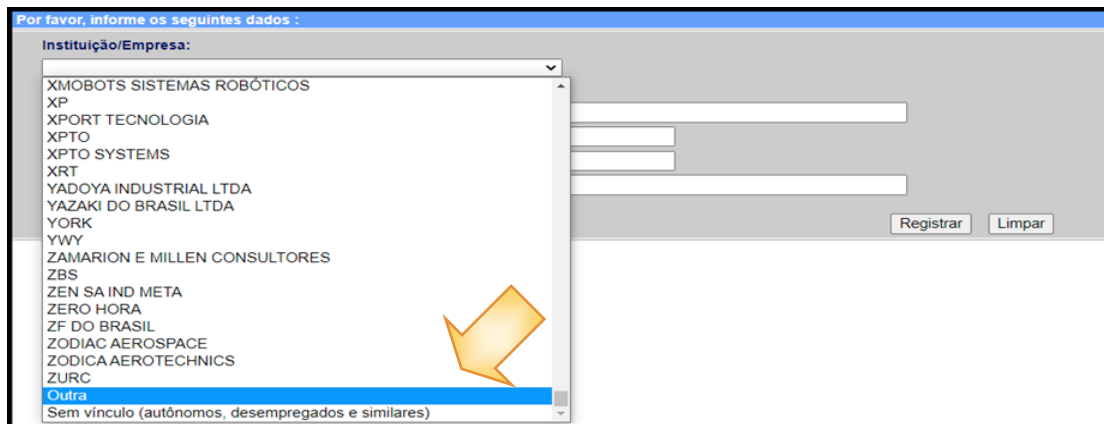
Nome:

Senha:

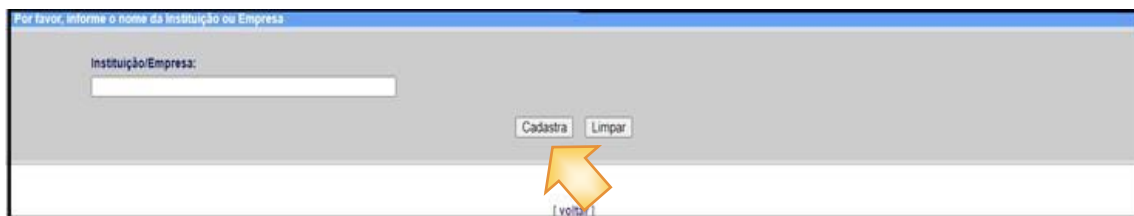
Confirme a senha:

E-mail:

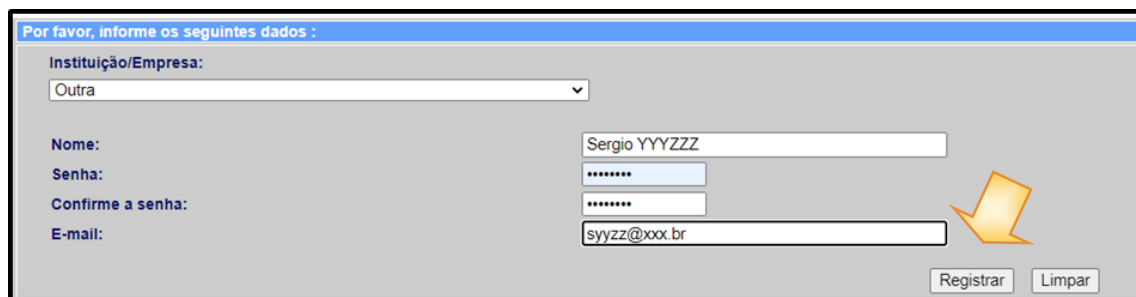
- Caso a sua Instituição não esteja listada, abra a lista de “Instituição/Empresa” e selecione o item “Outra” localizado no final da lista.



- Uma nova tela se abrirá para que seja cadastrado o nome da Instituição/Empresa.



- Em seguida retorne e finalize o cadastro, preenchendo todos os campos em branco, e em seguida selecione “Registrar”.



- Após efetuado o cadastro, o usuário estará habilitado para acessar e realizar o download do texto completo.

