

CURSO PRECONGRESO SIBAE 2022

PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE SEMICONDUCTORES POR MODELADO COMPUTACIONAL "AB-INITIO"

Instructor: Dr. Raciél Jaimes López.

Institución: ESQIE-IPN (Estancia Posdoctoral)

Duración: 4 horas

Objetivo:

Aplicar de manera práctica las metodologías utilizadas actualmente para estimar banda prohibida, estados trampa, defectos superficiales, absorción de radiación sensibilizada por colorantes, en semiconductores representativos (el TiO_2 y el silicio) empleando un código de uso libre (Quantum Espresso), adquiriendo las nociones básicas del modelado de sólidos.

Dirigido a:

Profesionales, Investigadores, Académicos y Estudiantes que deseen obtener una visión global de las posibilidades y limitaciones de los procedimientos de modelado computacional a primeros principios, en sólidos y superficies semiconductoras cristalinas.

CONTENIDO:

1. Introducción

- 1.1 Características de los semiconductores
- 1.2 Introducción a los sólidos cristalinos
- 1.3 Introducción a la teoría de funcionales de la densidad

2. Aplicación de los códigos computacionales a la resolución de la estructura electrónica

- 2.1 Códigos de resolución de estructura electrónica
- 2.2 Instalación de paquetería
- 2.3 Modelado del seno (bulto) del silicio
- 2.4 Estructura de bandas y densidad de estados del silicio
- 2.5 Modelado del seno del TiO_2 (fase anatasa o rutilo)
- 2.6 Estructura de bandas y densidad de estados TiO_2

- 2.7 Defectos cristalinos y estados trampa en el silicio
- 2.8 Defectos cristalinos y estados trampa en el TiO₂
- 2.9 Modelado de una superficie de silicio
- 2.10 Modelado de una cara y fase cristalina del TiO₂
- 2.11 Modelado periódico de una especie química en fase gas
- 2.12 Energía de adsorción de una especie química en silicio
- 2.13 Energía de adsorción de una especie química en una cara y fase cristalina del TiO₂
- 2.14 Densidad de estados y alineación del nivel de Fermi con estados HOMO-LUMO de moléculas adsorbidas en la superficie del silicio
- 2.15 Densidad de estados y alineación del nivel de Fermi con estados HOMO-LUMO de moléculas adsorbidas en la superficie del TiO₂