

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Asignatura	Modelado computacional de semiconductores y procesos tecnológicos		
Materia			
Módulo	Módulo de especialización en "Física de Materiales"		
Titulación	Máster en Física		
Plan	617	Código	54414
Periodo de impartición	2º cuatrimestre	Tipo/Carácter	Optativa
Nivel/Ciclo	Máster	Curso	1º
Créditos ECTS	3 ECTS		
Lengua en que se imparte	Español		
Profesor/es responsable/s	Luis Alberto Marqués Cuesta María Aboy Cebrián Iván Santos Tejido		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	Luis Alberto Marqués Cuesta: imarques@ele.uva.es María Aboy Cebrián: marabo@tel.uva.es Iván Santos Tejido: ivasan@tel.uva.es		
Departamento	Dpto. de Electricidad y Electrónica		

1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

La asignatura de “*Modelado computacional de semiconductores y procesos tecnológicos*” es una asignatura optativa del módulo de especialización en Física de Materiales del Máster en Física de la Universidad de Valladolid.

Las asignaturas de este módulo están orientadas a profundizar en la caracterización a niveles eléctrico, óptico y mecánico de los materiales, así como la profundización en diversos dispositivos electrónicos, nanomateriales, biomateriales y materiales celulares y porosos selectivos.

La asignatura de “*Modelado computacional de semiconductores y procesos tecnológicos*” pretende proporcionar a los alumnos una visión global de métodos computacionales existentes para estudiar, caracterizar y modelar tanto materiales semiconductores a nivel atómico como los procesos tecnológicos utilizados para fabricar las uniones PN de los dispositivos electrónicos. Para ello se mostrarán estrategias de simulación multi-escala que permiten conectar los fenómenos que ocurren a nivel atómico (como por ejemplo la difusión de dopantes) con las características macroscópicas de las uniones fabricadas.

1.2 Relación con otras materias

La asignatura de “*Modelado computacional de semiconductores y procesos tecnológicos*” está estrechamente relacionada con dos temáticas presentes en el módulo de Física de Materiales.

Por un lado, está dentro del grupo de asignaturas que abordan el estudio de los **materiales semiconductores**. Los materiales semiconductores han revolucionado la tecnología desde que se fabricó el primer transistor y el primer LED, y son la base de un gran número de aplicaciones. Las otras dos asignaturas del módulo de Física de Materiales dedicadas al estudio de los materiales semiconductores son:

- Materiales semiconductores para optoelectrónica y circuitos integrados.
- Técnicas experimentales de caracterización de semiconductores y aislantes.

Este grupo de asignaturas abordan el estudio de las propiedades y procesado de semiconductores, y de los dispositivos que se fabrican con estos materiales, ofreciendo al alumno contenidos con un alto interés científico-técnico.

Por otro lado, está englobada en el grupo de asignaturas relacionadas con el **modelado computacional de materiales**. El aumento de prestaciones de los recursos computacionales existentes ha permitido trasladar muchas de las pruebas experimentales al ámbito de la simulación por ordenador, además de permitir estudiar fenómenos y procesos que serían muy complicados de estudiar y analizar experimentalmente. Las otras tres asignaturas del módulo de Física de Materiales dedicadas al modelado computacional de materiales son:

- Computación en Física (asignatura obligatoria del módulo común)
- Simulaciones cuánticas de nanomateriales.
- Propiedades y modelado computacional de metamateriales.

Este grupo de asignaturas ofrecen metodologías y herramientas avanzadas para el estudio computacional de materiales, fenómenos físicos y procesos.



1.3 Prerrequisitos

No existen prerrequisitos para cursar la presente asignatura. No obstante, por lo expuesto en el apartado anterior es altamente recomendable haber cursado o estar cursando las siguientes asignaturas con temáticas relacionadas:

- Materiales semiconductores para optoelectrónica y circuitos integrados.
- Técnicas experimentales de caracterización de semiconductores y aislantes.
- Computación en Física.
- Simulaciones cuánticas de nanomateriales.
- Propiedades y modelado computacional de metamateriales.





2. Competencias

2.1 Generales

- G1. Capacidad de aplicación de conocimientos adquiridos.
- G2. Capacidad crítica, de análisis y síntesis.
- G3. Capacidad de comunicación.
- G4. Capacidad de aprendizaje autónomo.
- G5. Capacidad de trabajo en equipo

2.2 Específicas

- C1. Comprensión de las bases científicas de la computación.
- C4. Capacidad para extraer información relevante de grandes conjuntos de datos experimentales utilizando tratamientos estadísticos adecuados.
- C5. Capacidad para establecer algoritmos para abordar problemas con soluciones múltiples.
- C6. Capacidad para optimizar recursos.
- C8. Conocimiento de los fundamentos físicos avanzados en los diferentes estados de la materia.
- C10. Conocimiento de las bases teóricas de estudio de la Física.
- C11. Conocimiento de los sistemas físicos en la frontera del conocimiento.

Otras competencias específicas adquiridas por los alumnos que siguen el módulo de especialización en "Física de Materiales":

- Conocimiento de nuevos materiales basados en tecnología.
- Comprensión de las propiedades físicas conducentes a la caracterización de materiales.
- Interpretación de las técnicas de computación específicas en la modelización de estructuras de materiales.
- Capacidad para poder participar en actividades científicas internacionales y en la toma de decisiones científicas a nivel internacional.



3. Objetivos

Al finalizar la asignatura el alumno deberá ser capaz de:

- Entender los rangos de aplicación de las simulaciones atómicas para el estudio de materiales y procesos tecnológicos.
- Elegir la técnica de simulación más adecuada dependiendo del proceso físico que quiera estudiar.
- Simular, modelar y analizar los procesos de difusión e interacción de defectos.
- Simular, modelar y analizar los procesos de generación de daño por irradiación.
- Realizar una caracterización de defectos en semiconductores utilizando diferentes técnicas de simulación.





4. Contenidos y/o bloques temáticos

Bloque 1: Contenidos teóricos

Carga de trabajo en créditos ECTS: 0.32

a. Contextualización y justificación

En este bloque se presenta la necesidad del uso de las simulaciones atomísticas para el estudio de los materiales semiconductores y los procesos que ocurren en ellos a nivel atómico, y las diferentes técnicas de simulación que pueden utilizarse para tal fin.

b. Objetivos de aprendizaje

- Entender los rangos de aplicación de las simulaciones atomísticas para el estudio de materiales y procesos tecnológicos.
- Elegir la técnica de simulación más adecuada dependiendo del proceso físico que se quiera estudiar.

c. Contenidos

- Simulaciones atomísticas para el estudio de materiales semiconductores y procesos tecnológicos.

d. Métodos docentes

Se empleará:

- Clase magistral participativa.
- Realización de un trabajo.
- Exposición oral.

Para más detalles consultar el apartado 6 del presente documento.

e. Plan de trabajo

Este bloque se desarrollará presencialmente durante las 8 primeras horas de la asignatura.

f. Evaluación

Ver apartado 8 del presente documento.

g. Material docente

Véase el apartado 5 del presente documento.

h. Recursos necesarios

Véase el apartado 5 del presente documento.



i. Temporalización

Este bloque se desarrollará presencialmente durante las 8 primeras horas de la asignatura.

Bloque 2: Prácticas de ordenador

Carga de trabajo en créditos ECTS: 2.68

a. Contextualización y justificación

En este bloque se realizan prácticas de ordenador para aplicar los conceptos desarrollados en el bloque 1.

b. Objetivos de aprendizaje

- Simular, modelar y analizar los procesos de difusión e interacción de defectos.
- Simular, modelar y analizar los procesos de generación de dañado por irradiación.
- Realizar una caracterización de defectos en semiconductores utilizando diferentes técnicas de simulación.

c. Contenidos

- Caracterización de defectos en semiconductores
- Simulación de la difusión atómica.
- Simulación de la implantación iónica.

d. Métodos docentes

Se empleará:

- Clase magistral participativa de los fundamentos de los programas de simulación utilizados.
- Prácticas de ordenadores.
- Realización de informes de prácticas.

Para más detalles consultar el apartado 6 del presente documento.

e. Plan de trabajo

Este bloque se desarrollará presencialmente durante las 20 últimas horas de la asignatura.

f. Evaluación

Ver apartado 8 del presente documento.

g Material docente

Véase el apartado 5 del presente documento.



h. Recursos necesarios

Véase el apartado 5 del presente documento.

i. Temporalización

Este bloque se desarrollará presencialmente durante las 20 últimas horas de la asignatura.

5. Bibliografía, Material complementario y Recursos necesarios

a. Bibliografía

La mayoría de los recursos bibliográficos que se recomiendan consisten en artículos científicos que los alumnos pueden descargar desde una dirección IP de la Universidad de Valladolid. Los principales artículos científicos se proporcionarán a los alumnos en formato electrónico para su consulta.

b. Material complementario y Recursos necesarios

El material docente que se vaya a utilizar en las clases de aula (transparencias de los temas y lecturas complementarias) y en las prácticas de ordenadores (enunciados de prácticas y lecturas complementarias) estará disponible con suficiente antelación a través del Campus Virtual de la UVa (<http://campusvirtual.uva.es/>). El Campus Virtual también se utilizará para centralizar todos avisos que se realicen durante el desarrollo de la asignatura.

6. Métodos docentes y principios metodológicos

En la asignatura se emplearán los siguientes métodos docentes:

- **Clase magistral participativa**

Las sesiones de aula se desarrollarán a través de lecciones magistrales participativas para presentar a los alumnos de manera ordenada y sistemática los contenidos teóricos de la asignatura.

Consistirán en clases participativas que se desarrollarán en el aula mediante transparencias. En las transparencias aparecerán de forma esquemática los conceptos utilizados para la exposición teórica: desarrollos teóricos, esquemas de simulaciones, configuraciones atómicas de defectos y estructuras, gráficas con resultados experimentales y simulados, etc. así como las principales definiciones y conclusiones.

El material que se use estará disponible a los alumnos con suficiente antelación en el campus virtual de la Universidad de Valladolid (<http://campusvirtual.uva.es/>). Con este material se pretende que el alumno disponga de una guía esquemática de los conceptos desarrollados en los temas de la asignatura que les permitan seguir más fácilmente la exposición teórica y prestar mayor atención a los comentarios, discusiones y aclaraciones que puedan tener lugar durante ella.

- **Prácticas de ordenador**

En las prácticas de ordenadores los alumnos tendrán que realizar diferentes simulaciones para asimilar los contenidos de la asignatura. Las prácticas se realizarán en los servidores multiprocesador del grupo "Multiscale Materials Modeling" del GIR de Electrónica de la Universidad de Valladolid (<http://www.ele.uva.es/~mmm>). Para ello se podrán utilizar tanto códigos de simulación desarrollados por los miembros del grupo (basados en la técnica de *Kinetic Monte Carlo* (KMC)), como los códigos de simulación paralelos LAMMPS (código de dinámica molecular desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandía de EE.UU) y VASP (código de simulación de primeros principios desarrollado en la Universidad Técnica de Viena, Austria).

Además, los alumnos deberán realizar un trabajo que tendrán que exponer oralmente e informes de los resultados obtenidos en las prácticas.

- **Trabajo y exposición oral**

El trabajo se centrará en una de las técnicas de simulación cuyo estudio se aborda en la asignatura (Ab-initio, Tight-binding, BCA, MD y KMC). El trabajo se presentará mediante una exposición oral donde se tratarán los siguientes aspectos sobre la técnica que corresponda:

- En qué consiste.
- Elementos de que consta.
- Tipo de procesos que permite simular y ejemplos en semiconductores.
- Escalas espaciales y temporales accesibles.
- Ventajas e inconvenientes.

La presentación oral tendrá el mismo formato que las que se realizan en los congresos científicos: será de tiempo limitado (unos 10-15 minutos) y se realizarán preguntas al finalizar. De esta manera se pretende que el alumno se familiarice con este tipo de presentaciones, puesto que la comunicación oral de los resultados obtenidos en congresos científicos es una de las actividades necesarias de la ciencia.



- **Elaboración de informes de prácticas**

Los informes de prácticas tienen como función que el alumno refleje de forma rigurosa el trabajo realizado en las prácticas de laboratorio y comente de forma crítica los resultados obtenidos. Además, permitirá al alumno aproximarse a la redacción de artículos científicos en los que ha de exponerse de forma concisa el trabajo realizado, referenciando de manera adecuada otros trabajos que complementen y/o afiancen los resultados presentados.

Tutorías

Al margen del horario lectivo, el alumno podrá disponer de 6 horas semanales para tutorías voluntarias individualizadas. Estas tutorías están destinadas a que el profesor resuelva las posibles dudas que tengan los alumnos, a orientarlos bibliográficamente y a asesorarles en las tareas que tengan que realizar.

El horario de las tutorías se comunicará en la presentación de la asignatura. Las tutorías se podrán solicitar en persona aprovechando las sesiones de aula, o a través del correo electrónico a la dirección de email de los profesores indicada al comienzo de este documento.



7. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES o PRESENCIALES A DISTANCIA ⁽¹⁾	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Sesiones de aula	8	Análisis de simulaciones	32
Prácticas de ordenadores	20	Realización de los informes de prácticas	10
		Preparación de la exposición oral	5
Total presencial	28	Total no presencial	47
TOTAL presencial + no presencial			75

8. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Trabajo y exposición oral	40%	
Informes de prácticas de ordenadores	60%	La nota de los informes de prácticas será la media aritmética de las notas obtenidas en los informes entregados.

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:**

Se utilizarán los siguientes criterios de calificación:

- **Trabajo y exposición oral:** se valorarán los siguientes aspectos:
 - la capacidad de síntesis de la información y el grado de comprensión de la técnica analizada.
 - la organización y claridad de la presentación.
 - las respuestas a las preguntas que se hagan.
 - la adecuación al tiempo disponible.
- **Informes de prácticas:** los aspectos principales que se valorarán serán la organización de los informes, la claridad y concisión del texto, la calidad de los resultados obtenidos en las simulaciones, y las conclusiones derivadas de los resultados obtenidos.

Es condición necesaria para aprobar la asignatura en convocatoria ordinaria entregar todos los informes y realizar la exposición oral, y obtener una calificación final de al menos 5.0 sobre 10.0.

Aquellos alumnos que no presenten el trabajo o no entreguen todos los informes, recibirán una nota final de 3.0 sobre 10.0 (independientemente de la nota obtenida en los informes entregados o en la exposición oral realizada), lo que implicará no superar la asignatura en la convocatoria ordinaria.

Los alumnos que no presenten el trabajo ni entreguen ningún informe una nota de 0.0 sobre 10.0.

- **Convocatoria extraordinaria:**

Aquellos alumnos que no superen la asignatura en convocatoria ordinaria habiendo presentado el trabajo y entregado los informes de prácticas, podrán en convocatoria extraordinaria mejorar la nota en aquellos procedimientos que considere oportunos: mejorar los informes de prácticas y/o la presentación del trabajo.



Aquellos alumnos que para la convocatoria ordinaria no hayan presentado el trabajo o no hayan entregado todos los informes, tendrán que realizar un examen teórico escrito que consistirá en una serie de cuestiones a desarrollar sobre los contenidos explicados en la asignatura. En este caso, la nota del examen supondrá el 100% de la calificación de la asignatura en la convocatoria extraordinaria.

Es condición necesaria para aprobar la asignatura en convocatoria ordinaria obtener una calificación final de 5.0 sobre 10.0.

No se mantendrá la nota de ningún procedimiento si el alumno vuelve a cursar la asignatura en cursos siguientes.

9. Consideraciones finales

El material docente que se vaya a utilizar en las clases de aula y en las prácticas de ordenadores estará disponible con suficiente antelación a través del Campus Virtual de la UVa (<http://campusvirtual.uva.es/>). También se pondrán a disposición del alumno artículos científicos y todo tipo de material que sea de interés para la asignatura.