

SANTA FE, 1º de julio de 2026.

VISTO las presentes actuaciones vinculadas con la propuesta de Curso de Posgrado “Correlación electrónica en sistemas átomo-superficie”, para las carreras de Doctorado y Maestría en Física, bajo la dirección del Dr. Marcelo Ariel ROMERO, y

CONSIDERANDO:

Que la propuesta se encuadra en el artículo 2º de la Reglamentación vigente de Cursos de la FBCB, aprobada por Resolución CD 1166/19;

Que los Comités Académicos de las mencionadas carreras procedieron a analizar la propuesta y sugieren otorgar seis UCAs;

Que se ha expedido favorablemente la Secretaría de Posgrado, y

TENIENDO EN CUENTA el dictamen de la Comisión de Interpretación y Reglamentos y de la Comisión de Ciencia y Técnica y de Extensión, aprobados en sesión ordinaria del día de la fecha,

EL CONSEJO DIRECTIVO
DE LA FACULTAD DE BIOQUÍMICA Y CIENCIAS BIOLÓGICAS
RESUELVE:

ARTÍCULO 1º.- Aprobar el Curso de Posgrado “Correlación electrónica en sistemas átomo-superficie”, para las carreras de Doctorado y Maestría en Física, bajo la dirección del Dr. Marcelo Ariel ROMERO, y otorgar seis UCAs, que como anexo forma parte de la presente.

ARTÍCULO 2º.- Inscribase, comuníquese por Secretaría Administrativa, hágase saber por correo electrónico a Dirección de Comunicación Institucional. Cumplido, pase a la Secretaría de Posgrado para notificación al interesado y demás efectos que correspondan.

RESOLUCIÓN CD N°: 625

Planificación Curso de Posgrado “Correlación electrónica en sistemas átomo-superficie”

- 1) **Denominación:** Curso de Posgrado – Maestría y Doctorado.
- 2) **Nombre:** Correlación electrónica en sistemas átomo-superficie.
- 3) **Director:** Dr. Marcelo A. Romero.
- 4) **Coordinador:** No es necesario.
- 5) **Docente Colaborador:** Dra. Sandra Carolina Gómez Carrillo.
- 6) **Objetivos:** Proveer al alumno de conceptos y formalismos fundamentales para el estudio mecano cuántico de la correlación electrónica en la interacción de átomos con superficies. Para esto se espera que al finalizar el curso el alumno haya logrado:
 - (i) Comprender los procesos y fenómenos físicos asociados a los distintos tipos de correlación electrónica que surgen en la interacción entre átomos y superficies sólidas.
 - (ii) Adquirir dominio de los diferentes tratamientos teóricos de la correlación electrónica en el átomo interactuante, incluyendo aproximaciones de campo medio (Hartree-Fock), correlación finita e infinita (U-finito / U-infinito), y modelos de canal independiente o multicanal.
 - (iii) Desarrollar modelos interpretativos del comportamiento de los sistemas átomo-superficie, analizando su validez en función del grado de alejamiento respecto de situaciones ideales.
 - (iv) Aplicar el formalismo de funciones de Green (para procesos en y fuera del equilibrio) para modelar la interacción átomo-superficie, comprendiendo cómo la matriz densidad y las distintas aproximaciones a la correlación electrónica condicionan la dinámica y las propiedades electrónicas del sistema.
- 7) **Perfil de los alumnos a quienes está orientado:** Esta orientado a graduados provenientes de carreras diversas como Licenciatura en Físicas, Licenciatura en Química, Biotecnología, Materiales, Ingenierías y Profesorados Universitarios en Física/Matemática/Química o afines, que persigan una formación más avanzada en Física. Particularmente para estudiantes del Doctorado o Maestría en Física (no excluyente).
- 8) **Requisitos de formación previa de los inscriptos:** Haber cursado y aprobado (o materias equivalentes a) mecánica cuántica I, métodos matemáticos de la física y programación básica en cualquier lenguaje.
- 9) **Fecha tentativa de inicio:** Segundo cuatrimestre de 2026
- 10) **Carga horaria total y distribución horaria de las actividades:** 90 (noventa) horas totales, distribuidos en 6 (seis) horas semanales. Las 6 horas semanales se distribuirán en 3 horas de teoría y 3 horas de practica en la mayoría de los temas (habrá algunos temas que requerirán más horas de teoría que de practica y viceversa).
- 11) **Número de vacantes:** No hay límite.
- 12) **Requerimientos de admisión:** Se solicitará CV para verificar que cumplen con los requisitos de formación previa.

13) Programa analítico y cronograma tentativo:

Programa Analítico:

Tema 1: Funciones de Green. Definición. Funciones de Green en ecuaciones diferenciales parciales. Ejemplos. Método del desarrollo en autofunciones. Delta de Dirac y su relación con la Función de Green. Condiciones de salto. Forma de la Función de Green

Tema 2: Breve repaso de conceptos básicos de mecánica cuántica. Cuantificación del oscilador armónico simple. Primera cuantificación, sistemas de muchas partículas. Simetría de permutaciones e indistinguibilidad. Base de estados de una partícula. Determinante de Slater. Segunda cuantificación para fermiones. Operadores de destrucción y creación. Operadores de uno y dos electrones. Algunos Hamiltonianos especiales. Cambio de base en segunda cuantificación. Operadores de campo y su transformada de Fourier.

Tema 3: Funciones de Green para sistemas en equilibrio. Esquemas de representación temporal. Representación de Schrödinger y Heisenberg. Función de Green de electrones no interactuantes. Funciones de Green retardada y avanzada de una sola partícula. Aplicación a Hamiltonianos tight-binding. Funciones de Green dependientes del tiempo. Representación de Lehmann. Relación con los observables. Método de ecuaciones de movimiento.

Tema 4: Funciones de Green: Tratamientos perturbativos. Representación de interacción. Operador de evolución temporal. Expansión perturbativa de la función de Green causal. Teorema de Wick. Autoenergía y ecuación de Dyson.

Tema 5: Formalismo de funciones de Green fuera del Equilibrio. Formalismo de Keldysh. Relaciones entre las funciones Green-Keldysh. La representación triangular. Ecuación de Dyson para Funciones de Green fuera del equilibrio. Funciones de Green necesarias para los distintos procesos (en y fuera del equilibrio).

Tema 6: Síntesis de Física del Estado Sólido. Red de Bravais y vectores primitivos. Celda unitaria, celda primitiva y celda de Wigner-Seitz. Sistemas cristalinos y 14 redes de Bravais. Índices de Miller. Red recíproca y zona de Brillouin. Aproximaciones del Hamiltoniano del sólido. Teoría del funcional de la densidad (DFT). Teoremas de Hohenberg-Kohn. Método de Kohn-Sham. Aproximación de densidad local (LDA). Modelo de electrones libres. Teorema de Bloch y teoría de bandas. Densidad de estados. Energía de Fermi y superficie de Fermi. Relación entre densidad de estados y densidad de carga. Matriz densidad y densidad parcial de estados.

Tema 7: Interacción de átomos con superficies. Modelo de Anderson. Obtención del modelo de Anderson. Modelo de Anderson en el esquema de proyectores (configuraciones electrónicas). Teoría de campo medio. Modelo de Anderson en la aproximación Hartree-Fock. Modelo de Anderson en la aproximación Spin-Less. Cálculo de las funciones de Green-Keldish por medio del método de ecuaciones de movimientos. Condiciones iniciales y solución de las ecuaciones para procesos en y fuera del equilibrio.

Tema 8: Distintas aproximaciones en la correlación electrónica intra-estado. Modelo de Anderson en la aproximación de U-finito y U-infinito. Cálculo de las funciones de Green-Keldish. Condiciones iniciales y solución de las ecuaciones para procesos en y fuera del equilibrio. Parámetros del Hamiltoniano. Modelo de enlace de a pares. Acoplamiento átomo-sustrato como superposición de contribuciones diméricas.

Tema 9: Modelo de Anderson multicanal. Aproximación de canales independientes. Aproximación probabilística de la correlación entre canales. Correlación electrónica entre canales y sus diferencias con el modelo de canal independiente. Cálculo de las funciones de Green-Keldish. Condiciones iniciales y solución de las ecuaciones para procesos en y fuera del equilibrio.

Cronograma tentativo:

Semana	Actividad	Temas	Sitio / Lugar	Horas asignadas	Docentes
1	Teoría	Tema 1	Aula	3	Romero
	Coloquio		Aula	3	Romero
2	Teoría	Tema 2	Aula	3	Romero
	Coloquio		Aula	3	Romero
3	Teoría	Tema 2	Aula	3	Romero
	Coloquio		Aula	3	Romero
4	Teoría	Tema 3	Aula	3	Romero
	Coloquio		Aula	3	Romero
5	Teoría	Tema 4	Aula	3	Romero
	Coloquio		Aula	3	Romero
6	Teoría	Tema 5	Aula	3	Gómez
	Coloquio		Aula	3	Gómez
7	Teoría	Tema 6	Aula	3	Gómez
	Coloquio		Aula	3	Gómez
8	Teoría	Tema 6	Aula	3	Gómez
	Coloquio		Aula	3	Gómez
9	Teoría	Tema 7	Aula	3	Romero
	Primer Parcial		Aula	3	Gómez/Romero
10	Teoría	Tema 8	Aula	3	Romero
	Coloquio	Tema 8	Aula	3	Romero
11	Teoría	Tema 9	Aula	3	Romero
	Coloquio	Tema 9	Aula	3	Romero
12	Teoría	Tema 9	Aula	3	Romero
	Teoría	Tema 9	Aula	3	Romero
13	Coloquio	Tema 9	Aula	3	Romero
	Segundo parcial		Aula	3	Gómez/Romero
14	Trabajo Final/Recuperatorio		Aula	3	Gómez/Romero
			Aula	3	Gómez/Romero
15	Exposición del trabajo integral		Aula	3	Gómez/Romero
			Aula	3	Gómez/Romero

14) Bibliografía:

- Apuntes del curso entregado por el director (principalmente).
- Green-Function Theory of Chemisorption. Sydney George Davison y K.W. Sulston (2006)
- Green's Functions in Quantum Physics. Eleftherios N. Economou (2006)
- Molecular electronics: An introduction to theory and experiment. Juan Carlos Cuevas Rodríguez y Elke Scheer (2010)
- Many-body quantum theory in condensed matter physics. Henrik Bruus and Karsten Flensberg (2002)
- Física del estado sólido. Juan José Meléndez Martínez (2012)
- Solid State Physics. Neil W. Ashcroft y N. David Mermin (1976)
- The Kondo Problem to Heavy Fermions. A. C. Hewson (1993)
- Artículos científicos seleccionados

Todos los libros y apuntes se entregarán a los estudiantes en formato digital por el director del curso en caso de ser necesario.

15) Requisitos mínimos de asistencia. Métodos de evaluación y/o promoción:

1. **Para Regularizar:** El estudiante deberá asistir al 80% de las clases teóricas/prácticas. Deberán rendir y aprobar los dos (2) exámenes parciales que se realizarán durante el cuatrimestre, alcanzando un puntaje mínimo de 58/100 (cincuenta y ocho sobre cien) en ambos. En caso de que el estudiante no alcance el puntaje mínimo requerido en uno de los parciales, podrá recuperar dicho examen (sólo uno). En caso de que algún estudiante se vea imposibilitado de realizar alguno de los parciales por causa debidamente justificada se contempla la posibilidad de reprogramar la evaluación.
2. **Para promocionar (aprobar) el curso:** El estudiante deberá cumplir con los requisitos para regularizar y además realizar una presentación (informe escrito, exposición oral y responder preguntas de los docentes) de uno o dos artículos científicos recientes seleccionados por el docente responsable, para lo cual deberá comprender, reproducir (cálculos pertinentes al curso) y explicar el desarrollo del mismo, como así también, interpretar físicamente los resultados.

16) **Del derecho de Inscripción:** El curso no es arancelado.

17) **Currículo Vitae resumido de los docentes:** Se Adjunta.