

SANTA FE, 1º de julio de 2026.

VISTO las presentes actuaciones vinculadas con la propuesta de Curso de Posgrado “Transporte electrónico en contactos Atómicos y Moleculares”, 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 “Transporte electrónico en contactos Atómicos y Moleculares”, 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°: 626

Planificación Curso de Posgrado “Transporte electrónico en contactos Atómicos y Moleculares”

- 1) **Denominación:** Curso de Posgrado – Maestría y Doctorado.
- 2) **Nombre:** Transporte electrónico en contactos Atómicos y Moleculares.
- 3) **Director:** Dr. Marcelo A. Romero.
- 4) **Coordinador:** No es necesario.
- 5) **Docente Colaborador:** Dra. Sandra Carolina Gómez Carrillo.
- 6) **Objetivos:** Introducir al alumno en el área de la física de los nanodispositivos construídos a partir de átomos y moléculas. Estudiar las propiedades de transporte de los mismos, tomar conocimiento de los formalismos teóricos y herramientas de cálculo que se han desarrollado para describirlos. Para esto se espera que al finalizar el curso el alumno haya logrado:
 - (i) Comprender las técnicas experimentales de fabricación de contactos atómicos (STM, MCB, electromigración, electroquímicos) y moleculares, así como los dispositivos electrónicos moleculares básicos.
 - (ii) Dominar el formalismo de scattering y la fórmula de Landauer para transporte balístico en nanocontactos, incluyendo canales de conducción, ruido (shot noise) y transporte térmico.
 - (iii) Aplicar funciones de Green (en equilibrio y fuera de equilibrio con Keldysh) al transporte en contactos atómicos y moleculares, usando modelos tight-binding y combinación con DFT.
 - (iv) Analizar fenómenos avanzados en transporte molecular: corriente inelástica (electrón-fonón), correlación electrónica (bloqueo de Coulomb y efecto Kondo), ruido, termoelectricidad y fotoconductancia.
- 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: Introducción general al transporte en circuitos atómicos y moleculares. Breve historia del campo. Métodos de fabricación de contactos metálicos de tamaño atómico: El microscopio de efecto túnel (STM), las uniones de rotura mecánicamente controlada (MCB), electromigración y métodos electroquímicos. Técnicas para la fabricación de contactos moleculares: Adaptación de las técnicas de fabricación de conductores atómicos a la formación de uniones moleculares, nanoporos y otras posibilidades más exóticas. Dispositivos electrónicos moleculares: diodos, transistores, etc.

Tema 2: Introducción a la teoría del transporte en nanocontactos. Límite clásico (Maxwell). Aproximación semiclásica para contactos balísticos: la resistencia de Sharvin. El formalismo de scattering: La fórmula de Landauer. El concepto de canal de conducción. El ruido de partición (shot noise). Transporte térmico. Limitaciones del formalismo de scattering.

Tema 3: Introducción a las técnicas de funciones de Green. Las representaciones de Schrödinger y Heisenberg. Funciones de Green de un sistema de electrones no interactuantes. Las funciones de Green retardadas y avanzadas monoelectrónicas. Aplicaciones a Hamiltonianos tight-binding.

Tema 4: Teoría diagramática de las funciones de Green. La representación de interacción. El operador de evolución temporal. Teoría de perturbaciones para el cálculo de funciones de Green. El teorema de Wick. Expansión perturbativa de la función de Green causal. El concepto de autoenergía y la ecuación de Dyson. Algunas aplicaciones de la teoría de perturbaciones: Hartree-Fock, etc.

Tema 5: Funciones de Green para sistemas fuera del equilibrio. Introducción. El formalismo de Keldysh. Expansión diagramática en el formalismo de Keldysh. Propiedades de las funciones de Green de Keldysh. Aplicaciones a problemas de transporte: algunos ejemplos sencillos.

Tema 6: Aplicación de las técnicas de funciones de Green al transporte en contactos atómicos. Derivación microscópica de la fórmula de Landauer. Uso de modelos tight-binding para la descripción del transporte en contactos atómicos. Origen microscópico de los canales de conducción. Influencia de las propiedades mecánicas en el transporte electrónico. Descripción del transporte en contactos ferromagnéticos. Relevancia de la interacción espín-órbita: magnetoresistencia anisotrópica.

Tema 7: Introducción a la teoría del transporte electrónico en contactos moleculares: modelos sencillos. Túnel resonante. Dependencia de la conductancia eléctrica con la temperatura. Simetría de las características corriente-voltaje: rectificación. Transporte a través de una molécula de hidrógeno: sistema de dos niveles. Dependencia de la conductancia con la longitud de las moléculas.

Tema 8: La teoría del funcional de la densidad en electrónica molecular. Introducción a la teoría del funcional de la densidad (DFT). Combinación de funciones de Green y DFT para la descripción del transporte en contactos moleculares. Aplicaciones a diversos ejemplos de interés: Transporte a través de moléculas sencillas: oxígeno y benceno; conductancia de oligofenilenos: dependencia con la longitud y efectos del grado de conjugación de las moléculas.

Tema 9: Corriente inelástica en contactos moleculares: el papel de los modos de vibración. Motivación experimental. Modelos teóricos sencillos: clasificación de los regímenes de transporte inelástico. Descripción ab initio de la interacción electrón-fonón en contactos moleculares.

Tema 10: Fenómenos de correlación electrónica en contactos moleculares. Motivación experimental. El fenómeno del bloqueo de Coulomb. El efecto Kondo.

Tema 11: Otras propiedades de transporte de contactos atómicos y moleculares. El ruido de partición (shot noise). Termoelectricidad. Fotoconductancia: túnel asistido por fotones. Transporte a través de moléculas largas: transporte incoherente. Transporte electrónico a través de moléculas de ADN. Descripción teórica del régimen de transporte de hopping incoherente.

Cronograma tentativo:

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

	<i>Final/Recuperatorio</i>		<i>Aula</i>	<i>3</i>	<i>Gómez/Romero</i>
15	<i>Exposición del trabajo integral</i>		<i>Aula</i>	<i>3</i>	<i>Gómez/Romero</i>
			<i>Aula</i>	<i>3</i>	<i>Gómez/Romero</i>

14) Bibliografía:

- Molecular Electronics: An Introduction to Theory and Experiment. Juan Carlos Cuevas y Elke Scheer (World Scientific 2010).
- Electronic Transport in Mesoscopic Systems, S. Datta, Cambridge University Press 1995.
- Quantum Transport: Atom to Transistor, S. Datta, Cambridge University Press 2005.
- The Birth of Molecular Electronics, Scientific American, June 2000.
- Molecular Electronics, Physics Today, May 2003.
- Electronics using hybrid-molecular and mono-molecular devices, C. Joachim J. K. Gimzewski & A. Aviram, Nature 408, 541-548 (2000).
- Electron transport in molecular wire junctions: Models and Mechanisms, A. Nitzan and M. Ratner, Science 300, 1384-1389 (2003).
- Quantum properties of atomic-sized conductors, N. Agraït, A. Levy Yeyati, J.M. van Ruitenbeek, Physics Report 377, 81-279 (2003); cond-mat/0208239.
- Electron transport in molecular junctions, N.J. Tao, Nature Nanotechnology 1, 173-181(2006).
- 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 rendir un examen teórico-práctico, oral y escrito sobre los temas del curso que el docente responsable crea conveniente.

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

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