



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Sistemas cuánticos abiertos: teoría y espectroscopía				
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/semana	Total horas/semestre
Tipo: Curso		Teoría:	Práctica:	3
		3	0	
Modalidad: Presencial		Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica
Objetivo general: Aprender a describir sistemas cuánticos acoplados a medios ambientes disipativos para así entender sistemas importantes dentro de la química, como lo son las antenas fotosintéticas, las moléculas fotoexcitadas, las moléculas en cavidades y los espines en campos magnéticos (RMN, RME). Entender las espectroscopías relevantes y cómo simularlas.
Objetivos específicos: Adquirir los conceptos de canales disipativos y fluctuaciones, aprender a utilizar la ecuación de Liouville y el espacio de superoperadores, entender las propiedades de dinámicas disipativas y su importancia en el funcionamiento de sistemas selectos. El estudiante será capaz de construir ecuaciones maestras, así como realizar simulaciones utilizando scripts en python que formarán parte del material del curso. El estudiante obtendrá mediante el formalismo de función de respuesta una intuición acerca de distintas espectroscopías comunes así como otras más especializadas. Se hará un énfasis en conectar la teoría con experimentos realizados dentro del instituto de química.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Motivación para incluir procesos disipativos en sistemas moleculares. <ul style="list-style-type: none"> Repaso de dinámica Hamiltoniana Ejemplos de procesos disipativos y fluctuaciones 	3	
2	Dinámica de sistemas cuánticos abiertos <ul style="list-style-type: none"> La matrix de densidad La ecuación de Liouville Ecuación de Lindblad, operadores de Krauss y semigrupos dinámicos. Descomposición espectral y comparación con dinámica Hamiltoniana. Derivación microscópica de la ecuación de Lindblad y otras ecuaciones maestras 	20	
3	Ejemplos relevantes en química. <ul style="list-style-type: none"> Antenas fotosintéticas: transporte de energía en cadenas de cromóforos Química en cavidades: modelos de Rabi y Jaynes-Cummings RMN: Relajación de espines en un campo magnético y su relación con la dinámica rotacional Desfase de qubits acoplados 	10	
4	Técnicas espectroscópicas para sistemas cuánticos abiertos <ul style="list-style-type: none"> Espectroscopías continuas y función de línea (UV-vis, fluorescencia, RMN, RME) 	13	

	<ul style="list-style-type: none"> • Espectroscopía no lineal resuelta en el tiempo (en particular espectroscopías coherentes multidimensionales) • Espectroscopía de molécula única • Tomografía de estados cuánticos 		
5	Conclusión <ul style="list-style-type: none"> • Recapitulación de los conceptos fundamentales del curso, las técnicas utilizadas en sistemas cuánticos abiertos, sus límites de aplicabilidad y la investigación de frontera en esta área. 	2	
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:	
<p>Open quantum systems. Breuer and Petruccione Lectures on the theory of open quantum systems. Lidar (arXiv) Scripts de python para simular la dinámica disipativa</p>	
Bibliografía complementaria:	
<p>Principles of nonlinear optical spectroscopy. Shaul Mukamel Notes on quantum optics. Daniel Steck Charge and energy transfer dynamics in molecular systems. Kuhn and May Molecular excitation dynamics and relaxation: quantum theory and spectroscopy. Abramavicius, Valkunas and Mancal Theory of evolution and relaxation in multi-spin systems. Danuta Kruk</p>	
Sugerencias didácticas:	Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:
Exposición oral (x)	Exámenes parciales (x)
Exposición audiovisual (x)	Examen final escrito (x)
Ejercicios dentro de clase (x)	Trabajos y tareas fuera del aula (x)
Ejercicios fuera del aula (x)	Exposición de seminarios por los alumnos (x)
Seminarios (x)	Participación en clase ()
Lecturas obligatorias ()	Asistencia ()
Trabajo de investigación ()	Seminario ()
Prácticas de taller o laboratorio ()	Otras: ()
Prácticas de campo ()	
Otras: ()	