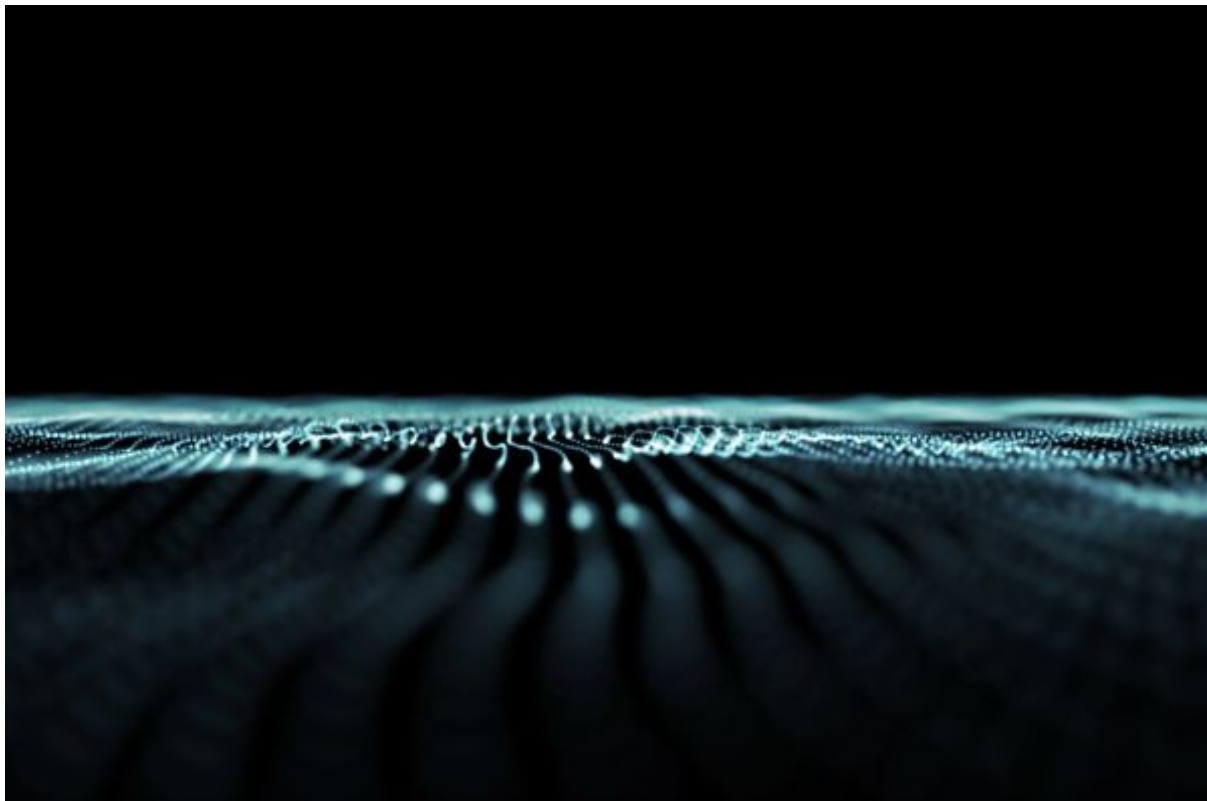




Mes enlla de l'energia: propietats de l'estat fonamental desbloquejades de manera certificable i escalable

Un equip d'investigadors obte teòricament, per primera vegada, límits certificables de propietats mes enlla de l'energia de l'estat fonamental d'un sistema amb molts cossos. El mètode resultant es general, escalable i presenta un rendiment competitiu

July 22, 2024

Un conjunt de partícules que interactuen entre si tendeixen a minimitzar la seva energia. Quan tot el sistema arriba realment a l'energia mínima, la seva descripció ve donada per l'anomenat $\frac{1}{2}$ estat fonamental $\frac{1}{2}$, o estat d'energia mínima. Per això, els científics e tan molt interessats a descobrir i analitzar-ne les propietats, que per descomptat inclouen, e tre d'altres, l'energia. Per exemple, les propietats magnètiques i de conducció son al res característiques que val la pena coneixer, per anomenar-ne només algu es. Tot i això, descobrir el valor exacte d'aquestes propietats de l'estat fonamental es torna mes difícil a mesura que augmenta el nombre de partícules, fins que arriba un punt en que ni

tan sols un superordinador seria capaç de trobar la solució. Per sortejar aquest obstacle, hi ha dos mètodes numèrics que acoten l'energia de l'estat fonamental: el mètode variacional i el de relaxació. Aquests proporcionen un límit superior i un límit inferior, respectivament. Així, encara que estrictament parlant l'energia exacta de l'estat fonamental encara és incerta, segur que estarà continguda entre aquests dos valors. Com més a prop estiguin els límits superior i inferior, menys incertesa hi haurà respecte l'energia. Els mètodes variacionals i de relaxació han demostrat ser realment efectius, ja que proporcionen límits prou estrictes com per a poder inferir l'energia de l'estat fonamental amb la precisió desitjada en una àmplia varietat de problemes físics. No obstant això, quan aquestes tècniques s'apliquen a altres propietats diferents, no és possible saber si les quantitats obtingudes s'acosten al valor real, perquè ja no hi ha cap garantia de que siguin cotes superiors o inferiors. Trobar límits no trivials no només permetria als científics comprovar si la informació proporcionada pels mètodes variacionals es troba en el lloc correcte, sinó que també conduiria per si mateix a una estimació certificada del valor real de les propietats de l'estat fonamental.

Aquesta qüestió ha estat abordada ara per un equip internacional en un article de *Physical Review X*, amb el Dr. Jie Wang de l'Acadèmia Xina de Ciències com a autor principal i la participació dels investigadors de l'ICFO **Dr. Jacopo Surace** i el **Prof. ICREA Antonio Acín**, així com l'Institut Perimeter de Física Teòrica, la Universitat Grenoble Alpes, la Universitat de Sobornne, el College de França, ESAT, Inria Paris-Saclay, l'Institut Politècnic de París, LAAS-CNRS i l'Institut de Matemàtiques de Tolosa. En ell mostren com, **en tenir en compte els resultats variacionals i per relaxació sobre l'energia, es poden derivar cotes certificables d'altres propietats de l'estat fonamental de manera escalable.**

Cap a la certificació de qualsevol propietat de l'estat fonamental

El seu enfocament, consistent en un mètode numèric anomenat relaxació de programació semidefinida (SDP, per les sigles en anglès), assegura que el valor real d'una determinada propietat de l'estat fonamental es troba dins del rang obtingut. Novament, tal com passava amb l'energia, la capacitat d'apropar els límits augmentarà la precisió de les prediccions. La novetat de l'article radica en el fet que ara es consideren els límits de l'energia donats pels mètodes variacional i de relaxació. L'estratègia comporta una millora significativa (en un ordre de magnitud) respecte a intents anteriors, **essent la primera vegada que un mètode mostra un rendiment competitiu en certificar propietats de l'estat fonamental més enllà de l'energia.**

L'equip va aplicar el mètode a diversos models (models de Heisenberg) que descriuen una sèrie de partícules interactuants d'espi $\frac{1}{2}$ (com podrien ser els electrons). Les propietats abordades van ser les funcions de correlació espi-espi, les quals brinden informació directa sobre si el sistema es comporta ferromagnèticament o antiferromagnèticament. En tots els casos, la relaxació de SDP va proporcionar límits d'acord amb les expectatives. **Tambe van**

delimitar amb èxit la funció de correlació espi-espi d'un sistema particular (model de Heisenberg de xarxa quadrada $J_1 - J_2$ per a 100 espins) **el càlcul exacte del qual és actualment inassolible, cosa que mostra el potencial de la tècnica proposada.**

Tot i que les relaxacions de SDP estan tot just a la seva infància i es poden fer moltes millores per apropar els límits superior i inferior, els resultats obtinguts són molt prometedors. A més, **la seva eina és completament general**, per la qual cosa en principi s'hauria de poder aplicar a qualsevol altre observable d'interès. "El nostre mètode ofereix coneixements profunds per a comprendre les fases de la matèria, com s'organitzen les partícules per minimitzar la seva energia, cosa que és essencial a l'hora d'entendre molts fenòmens, des de processos químics fins al disseny de materials", afirma el Professor ICREA de l'ICFO Antonio Acín. "I confiem en que el nostre enfocament es convertirà en una eina central en l'estudi dels problemes de l'estat fonamental, una qüestió ubíqua en la ciència"

Agraïments de finançament:

This work is supported by the ERC AdG CERQUTE, the Government of Spain (NextGenerationEU PRTR-C17.I1 and Quantum in Spain, Severo Ochoa CEX2019-000910-S), Fundació Cellex, Fundació Mir-Puig, Generalitat de Catalunya (CERCA programme), the AXA Chair in Quantum Information Science, EU projects PASQUANS2, NEQST, and Quanteria Veriqtas, the National Natural Science Foundation of China under Grant No. 12201618, the European Union Horizon's 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska Curie Grant Agreement No. 101031549 (QuoMoDys), the NSF Grant No. OAC-1835443 and the ERC Adv. Grant Agreement No. 885682. Research at the Perimeter Institute for Theoretical Physics is supported by the Government of Canada through the Department of Innovation, Science and Economic Development Canada and by the Province of Ontario through the Ministry of Research, Innovation and Science. V.M. was supported by the FastQI grant funded by the Institut Quantique Occitan, the PHC Proteus Grant No. 46195TA, the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie Actions, Grant Agreement No. 813211 (POEMA), by the AI Interdisciplinary Institute ANITI funding, through the French *Investing for the Future* PIA3 *Investing for the Future* program under the Grant Agreement No. ANR-19-PI3A-0004 as well as by the National Research Foundation, Prime Minister's Office, Singapore under its Campus for Research Excellence and Technological Enterprise (CREATE) program. This work was partially performed using HPC resources from CALMIP (Grant No. 2023-P2303). M.O.R. acknowledges funding by the ANR for the JCJC grant LINKS (ANR-23-CE47-0003).