



## Mas alla de la energia: propiedades del estado fundamental desbloqueadas de forma certificable y escalable

Un equipo de investigadores obtiene teoricamente, por primera vez, limites certificables de propiedades mas alla de la energia del estado fundamental de un sistema con muchos cuerpos. El metodo resultante es general, escalable y presenta un rendimiento competitivo

July 22, 2024

---

Un conjunto de particulas que interactuan entre si tiende a minimizar su energia. Cuando todo el sistema alcanza realmente la energia minima, su descripcion viene dada por el llamado "estado fundamental", o estado de energia minima. Por ello, los cientificos estan muy interesados ??en descubrir y analizar sus propiedades, que por supuesto incluyen, entre otras, la energia. Por ejemplo, las propiedades magneticas y de conduccion son otras caracteristicas que vale la pena conocer, por nombrar solo algunas.

Sin embargo, descubrir el valor exacto de estas propiedades del estado fundamental se

vuelve más difícil a medida que aumenta el número de partículas, llegando a un punto en el que ni siquiera un superordenador sería capaz de encontrar la solución. Para sortear este obstáculo, existen dos métodos numéricos que limitan la energía del estado fundamental: el método variacional y el de relajación. Estos proporcionan un límite superior y un límite inferior, respectivamente. Así, aunque estrictamente hablando la energía exacta del estado fundamental todavía es incierta, seguro que estará contenida entre esos dos valores. Cuanto más cerca estén los límites superior e inferior, menos incertidumbre habrá sobre la energía. Los métodos variacionales y de relajación han demostrado ser realmente efectivos, ya que proporcionan límites lo suficientemente estrictos como para poder inferir la energía del estado fundamental con la precisión deseada en una amplia variedad de problemas físicos. Sin embargo, cuando estas técnicas se aplican a otras propiedades distintas, no es posible saber si las cantidades obtenidas se acercan al valor real, debido a que ya no hay ninguna garantía de que sean límites superiores o inferiores. Encontrar límites no triviales no solo permitiría a los científicos comprobar si la información proporcionada por los métodos variacionales está en el camino correcto, sino que también conduciría por sí solo a una estimación certificada del valor real de las propiedades del estado fundamental. Esta cuestión ha sido abordada ahora por un equipo internacional en un artículo de *Physical Review X*, con el Dr. Jie Wang de la Academia China de Ciencias como autor principal y la participación de los investigadores del ICFO **Dr. Jacopo Surace** y el **Prof. ICREA Antonio Acín**, así como el Instituto Perimeter de Física Teórica, la Universidad Grenoble Alpes, la Universidad de SOBBOURNE, el College de France, ESAT, Inria Paris-Saclay, el Instituto Politécnico de París, LAAS-CNRS y el Instituto de Matemáticas de Toulouse. En el muestran como, **al tener en cuenta los resultados variacionales y por relajación con respecto a la energía, se pueden derivar límites certificables en otras propiedades del estado fundamental de forma escalable.**

### **Hacia la certificación de cualquier propiedad del estado fundamental**

Su enfoque, consistente en un método numérico llamado relajación de programación semidefinida (SDP, por sus siglas en inglés), asegura que el valor real de una determinada propiedad del estado fundamental se encuentra dentro del rango obtenido. Nuevamente, tal como sucedía con la energía, la capacidad de acercar los límites aumentará la precisión de las predicciones. La novedad del artículo radica en el hecho de que ahora se consideran los límites de energía dados por los métodos variacional y de relajación. La estrategia conduce a una mejora significativa (en un orden de magnitud) con respecto a intentos anteriores, **siendo la primera vez que un método muestra un rendimiento competitivo al certificar propiedades del estado fundamental más allá de la energía.**

El equipo aplicó su método a varios modelos (modelos de Heisenberg) que describían una serie de partículas interactuantes de espín  $\frac{1}{2}$  (como podrían ser los electrones). Las propiedades abordadas fueron las funciones de correlación espín-espín, las cuales brinda

información directa sobre si el sistema se comporta ferromagnéticamente antiferromagnéticamente. En todos los casos la relajación de SDP proporciona límites de acuerdo con las expectativas. También **delimitaron con éxito la función de correlación espín-espín de un sistema particular** (modelo de Heisenberg de red cuadrada  $J_1 - J_2$  para 100 espines) **cuyo cálculo exacto es actualmente inalcanzable, lo que muestra el potencial de la técnica propuesta.**

Aunque las relajaciones de SDP están apenas en su infancia y se pueden hacer muchas mejoras para acercar los límites superior e inferior, los resultados obtenidos son muy prometedores. Además, **su herramienta es completamente general**, por lo que en principio podría aplicarse a cualquier otro observable de interés. "Nuestro método ofrece conocimientos profundos para comprender las fases de la materia, como se organizan las partículas para minimizar su energía, lo cual es esencial para entender muchos fenómenos, desde procesos químicos hasta el diseño de materiales", afirma el Profesor ICREA del ICFO Antonio Acín. "Y confiamos en que nuestro enfoque se convertirá en una herramienta central en el estudio de los problemas del estado fundamental, una cuestión ubicua en la ciencia".

#### **Agradecimientos de financiación::**

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 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)