

Image not found

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

Un equip d'investigadors obte teoricament, per primera vegada, limits certificables de propietats mes enlla de l'energia de l'estat fonamental d'un sistema amb molts cossos. El metode 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 minima, la seva descripcio ve donada per l'anomenat *est*at fonamental, o estat d'energia minima. 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 magnetiques i de conduccio son al res caracteristiques que val la pena coneixer, per anomenar-ne nomes algu es. Tot i això, descobrir el valor exacte d'aquestes propietats de l'estat fonamental es torna mes dificil a mesura que augmenta el nombre de partícules, fins que arriba un punt en que ni tan sols un superordinador seria capac de trobar la solucio. Per sortejar aquest obstacle, h ha dos metodes numerics que acoten l'energia de l'estat fonamental: el metode variacional el de relaxacio. Aquests proporcionen un limit superior i un limit inferior, respectivament. A xi, encara que estrictament parlant l'energia exacta de l'estat fonamental encara es ince ta, segur que estara continguda entre aquests dos valors. Com mes a prop estiguin els li its superior i inferior, menys incertesa hi haura respecte l'ener ia. Els metodes variacionals i de relaxacio han demostrat ser realment efectius, ja que proporcionen limits prou estrictes com per a poder inferir l'energia de l'estat fonamental amb la precisio desitjada en una amplia varietat de problemes fisics. No obstant això, uan aquestes tecniques s'apliquen a altres propietats diferents, no es possible saber si les quantitats obtingudes s'acosten al valor real, porque ja no hi ha cap garantia de que si uin cotes superiors o inferiors. Trobar limits no trivials no nomes permetria als cienti ics comprovar si la informacio proporcionada pels metodes variacionals es troba en el ami correcte, sino que tambe conduiria per si mateix a una estimacio certificada del valor rea de les propietats de l'estat fonamen al. Aquesta qüestio ha estat abordada ara per un equip internacional en un article *Physical Review X*, amb el Dr. Jie Wang de l'Academia Xina de Ciencies com a autor principal i la

participacio dels investigadors de l'ICFO **Dr. Jacopo Surace** i el **Prof. ICREA Antonio Acin**, aixi com l'Institut Perimeter de Fisica Teorica, la Universitat Grenoble Alpes, la Universitat de Sobborne, el College de Franca, ESAT, Inria Paris-Saclay, l'Institut Politecnic de Paris, LAAS-CNRS i l'Institut de Matematiques de Tolosa. En ell mostren com, **en tenir en compte els resultats variacionals i per relaxacio sobre l'energia, es poden derivar cotes certificables d'altres propietats de l'estat fonamental de manera escalable.**

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

El seu enfocament, consistent en un metode numeric anomenat relaxacio de programacio semidefinida (SDP, per les sigles en angles), 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 limits augmentara la precisió de les prediccions. La novetat de l'article radica en el fet que ara es consideren els limits de l'energia donats pels metodes variacional i de relaxacio. L'estrategia comporta una millora significativa (en un ordre de magnitud) respecte a intents anteriors, **essent la primera vegada que un metode mostra un rendiment competitiu en certificar propietats de l'estat fonamental mes enlla de l'energia.**

L'equip va aplicar el metode a diversos models (models de Heisenberg) que descriuen una serie de particules interactuants d'espi $\frac{1}{2}$ (com podrien ser els electrons). Les propietat abordades van ser les funcions de correlacio espi-espi, les quals brinden informacio direct sobre si el sistema es comporta ferromagneticament o antiferromagneticament. En tots el casos, la relaxacio de SDP va proporcionar limits d'acord amb les expectatives. **Tambe van delimitar amb exit la funcio de correlacio espi-espi d'un sistema particular (model de Heisenberg de xarxa quadrada $J_1 - J_2$ per a 100 espins) el calcul exacte del qual es actualment inassolible, cosa que mostra el potencial de la tecnica proposada.**

Tot i que les relaxacions de SDP estan tot just a la seva infancia i es poden fer moltes millores per apropar els limits superior i inferior, els resultats obtinguts son molt prometedors. A mes, **la seva eina es completament general**, per la qual cosa en principi s'hauria de poder aplicar a qualsevol altre observable d'interes. "El nostre metode ofereix coneixements profunds per a comprendre les fases de la materia, com s'organitzen les particules per minimitzar la seva energia, cosa que es essencial a l'hora d'entendre molts fenomens, des de processos quimics fins al disseny de materials", afirma el Professor ICREA de l'ICFO Antonio Acin. "I confiem en que el nostre enfocament es convertira en una eina central en l'estudi dels problemes de l'estat fonamental, una qüestio ubiqua en la ciencia"

Agraïments de financament:

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), Fundacio Cellex, Fundacio 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 i2i Investing for the Future PIA3i2i 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)