

Image not found

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 características que vale la pena conocer, por nombrar solo algunas.

Sin embargo, descubrir el valor exacto de estas propiedades del estado fundamental se vuelve mas dificil a medida que aumenta el numero de particulas, llegando a un punto en el que ni siquiera un superordenador seria capaz de encontrar la solucion. Para sortear este obstaculo, existen dos metodos numericos que limitan la energia del estado fundamental: el metodo variacional y el de relajacion. Estos proporcionan un limite superior y un limite inferior, respectivamente. Asi, aunque estrictamente hablando la energia exacta del estado fundamental todavia es incierta, seguro que estara contenida entre esos dos valores. Cuanto mas cerca esten los limites superior e inferior, menos incertidumbre habra sobre la energia. Los metodos variacionales y de relajacion han demostrado ser realmente efectivos, ya que proporcionan limites lo suficientemente estrictos como para poder inferir la energia del estado fundamental con la precision deseada en una amplia variedad de problemas fisicos. Sin embargo, cuando estas tecnicas 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 garantia de que sean limites superiores o inferiores. Encontrar limites no triviales no solo permitiria a los cientificos comprobar si la informacion proporcionada por los metodos variacionales esta en el camino correcto, sino que tambien conduciria por si solo a una estimacion certificada del valor real de las propiedades del estado fundamental.

Esta cuestion ha sido abordada ahora por un equipo internacional en un articulo 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 Acin**, así como el Instituto Perimeter de Física Teórica, la Universidad Grenoble Alpes, la Universidad de Sobbornne, el College de France, ESAT, Inria Paris-Saclay, el Instituto Politecnico de Paris, LAAS-CNRS y el Instituto de Matematicas de Toulouse. En el muestran como, **al tener en cuenta los resultados variacionales y por relajacion con respecto a la energia, se pueden derivar limites certificables en otras propiedades del estado fundamental de forma escalable.**

Hacia la certificacion de cualquier propiedad del estado fundamental

Su enfoque, consistente en un metodo numerico llamado relajacion de programacion semidefinida (SDP, por sus siglas en ingles), asegura que el valor real de una determinada propiedad del estado fundamental se encuentra dentro del rango obtenido. Nuevamente, tal como sucedia con la energia, la capacidad de acercar los limites aumentara la precision de las predicciones. La novedad del articulo radica en el hecho de que ahora se consideran los limites de energia dados por los metodos variacional y de relajacion. La estrategia conduce a una mejora significativa (en un orden de magnitud) con respecto a intentos anteriores, **siendo la primera vez que un metodo muestra un rendimiento competitivo al certificar propiedades del estado fundamental mas alla de la energia.**

El equipo aplico su metodo a varios modelos (modelos de Heisenberg) que describian una serie de particulas interactuantes de espín $\frac{1}{2}$ (como podrian ser los electrones). La propiedades abordadas fueron las funciones de correlacion espín-espín, las cuales brinda informacion directa sobre si el sistema se comporta ferromagneticamente antiferromagneticamente. En todos los casos la relajacion de SDP proporciono limites d acuerdo con las expectativas. **Tambiendelimitaron con exito la funcion de correlacion espín-espín de un sistema particular** (modelo de Heisenberg de red cuadrada $J_1 - J_2$ para 100 espines) **cuyo calculo exacto es actualmente inalcanzable, lo que muestra el potencial de la tecnica propuesta.**

Aunque las relajaciones de SDP estan apenas en su infancia y se pueden hacer muchas mejoras para acercar los limites superior e inferior, los resultados obtenidos son muy prometedores. **Ademas, su herramienta es completamente general**, por lo que en principio podria aplicarse a cualquier otro observable de interes. "Nuestro metodo ofrece conocimientos profundos para comprender las fases de la materia, como se organizan las particulas para minimizar su energia, lo cual es esencial para entender muchos fenomenos, desde procesos quimicos hasta el diseno de materiales", afirma el Profesor ICREA del ICFO Antonio Acin. "Y confiamos en que nuestro enfoque se convertira en una herramienta central en el estudio de los problemas del estado fundamental, una cuestion ubicua en la ciencia".

Agradecimientos de financiacion::

This work is supported by the ERC AdG CERQUITE, 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 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).