



*IPhT
Saclay*



UNIVERSITÉ PARIS-SUD 11 - ORSAY

et

INSTITUT DE PHYSIQUE THÉORIQUE - CEA/SACLAY

Thèse de doctorat

Spécialité **Physique Théorique**

Sujet de la thèse :

Intrication dans des systèmes quantiques à basse dimension

présentée par **Jean-Marie STEPHAN**

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Paris-sud 11

Soutenue le lundi 12 décembre 2011 devant le jury composé de :

Monsieur	Pasquale CALABRESE	Rapporteur
Monsieur	Jean-Sébastien CAUX	Examineur
Monsieur	Jesper JACOBSEN	Examineur extérieur
Monsieur	Henk HILHORST	Président du jury
Monsieur	Grégoire MISGUICH	Membre invité
Monsieur	Vincent PASQUIER	Directeur de thèse
Monsieur	Didier POILBLANC	Rapporteur

Intrication dans des systèmes quantiques à basse dimension

Résumé :

On a réalisé ces dernières années que certaines mesures d'intrication s'avèrent être des outils efficaces pour comprendre et caractériser de nouvelles et exotiques phases de la matière, en particulier lorsque les méthodes traditionnelles basées sur l'identification d'un paramètre d'ordre montrent leurs limites. Cette thèse porte sur l'étude de quelques systèmes quantiques à basse dimension où une telle approche est fructueuse. Parmi ces mesures l'entropie d'intrication, définie via une bipartition du système quantique, est probablement la plus populaire, surtout à une dimension. Celle-ci est habituellement très difficile à évaluer en dimension supérieure, mais nous montrons ici que le calcul se simplifie drastiquement pour une classe particulière de fonctions d'ondes, dites de Rokhsar-Kivelson. L'entropie d'intrication peut en effet s'exprimer comme une entropie de Shannon relative aux probabilités dans la fonction d'onde des différentes configurations de spins d'un autre système quantique, cette fois-ci unidimensionnel. Cette réduction dimensionnelle nous permet d'étudier l'entropie aussi bien par des méthodes numériques (fermions libres, diagonalisations exactes, ...) qu'analytiques (théories conformes). Nous argumentons aussi que cette approche permet d'accéder facilement à certaines caractéristiques subtiles et universelles d'une fonction d'onde donnée, en général.

Une autre partie de cette thèse est consacrée aux trempes quantiques locales dans des systèmes critiques unidimensionnels. Nous insistons particulièrement sur une quantité appelée écho de Loschmidt, le recouvrement entre la fonction d'onde avant la trempe et la fonction d'onde à temps t après la trempe. En exploitant la commensurabilité du spectre de la théorie conforme, nous montrons que l'évolution temporelle doit être périodique, et peut même être souvent obtenue analytiquement. Inspiré par ces résultats, nous étudions aussi la probabilité de mesurer l'énergie du fondamental immédiatement après la trempe. Elle s'exprime comme un simple produit scalaire – que nous nommons fidélité bipartie – et est une quantité intéressante en elle-même. Malgré sa simplicité, son comportement se trouve être très similaire à celui de l'entropie d'intrication. Pour un système critique unidimensionnel en particulier, cette fidélité décroît algébriquement avec la taille du système, un comportement rappelant la célèbre catastrophe d'orthogonalité d'Anderson. L'exposant est universel et relié à la charge centrale de la théorie conforme sous-jacente.

Mots clefs : intrication, modèles de dimères quantique, transitions de phase quantiques, trempes quantiques, chaînes de spins, théories conformes avec bords.

Entanglement in low-dimensional quantum systems

Abstract :

In recent years, it has been understood that entanglement measures can be useful tools for the understanding and characterization of new and exotic phases of matter, especially when the study of order parameters alone proves insufficient. This thesis is devoted to the study of a few low-dimensional quantum systems where this is the case. Among these measures the entanglement entropy, defined through a bipartition of the quantum system, has been perhaps one of the most heavily studied, especially in one dimension. Such a quantity is usually very difficult to compute in dimension larger than one, but we show that for a particular class of wave functions, named after Rokhsar and Kivelson, the entanglement entropy of an infinite cylinder cut into two parts simplifies considerably. It can be expressed as the Shannon entropy of the probability distribution resulting from the ground-state wave function of a one-dimensional quantum system. This dimensional reduction allows for a detailed numerical study (free fermions, exact diagonalizations, ...) as well as an analytic treatment, using conformal field theory (CFT) techniques. We also argue that this approach can give an easy access to some refined universal features of a given wave function in general.

Another part of this thesis deals with the study of local quantum quenches in one-dimensional critical systems. The emphasis is put on the Loschmidt echo, the overlap between the wave function before the quench and the wave function at time t after the quench. Because of the commensurability of the CFT spectrum, the time evolution turns out to be periodic, and can be obtained analytically in various cases. Inspired by these results, we also study the probability to measure the ground-state energy immediately after the quench. It can be expressed as a simple overlap – which we name bipartite fidelity – and can be studied in its own right. We show that despite its simple definition, it mimics the behavior of the entanglement entropy very well. In particular when the one-dimensional system is critical, this fidelity decays algebraically with the system size, reminiscent of Anderson’s celebrated orthogonality catastrophe. The exponent is universal and related to the central charge of the underlying CFT.

Key words : entanglement, quantum dimer models, quantum phase transitions, quantum quenches, spin chains, boundary conformal field theory.

Articles de référence

Publiés dans des revues à comité de lecture

{1} *Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions*, J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich and V. Pasquier, Physical Review B **79**, 115421 (2009). [arXiv:0906.1153]

{2} *Rényi entropy of a line in two-dimensional Ising models*, J.-M. Stéphan, G. Misguich and V. Pasquier, Physical Review B **82**, 125455 (2010). [arXiv:1006.1605]

{3} *Geometric entanglement and Affleck-Ludwig boundary entropies in critical XXZ and Ising chains*, J.-M. Stéphan, G. Misguich and F. Alet, Physical Review B **82**, 180406(R) (2010). [arXiv:1007.4161]

{4} *Universal behavior of a bipartite fidelity at quantum criticality*, J. Dubail and J.-M. Stéphan, Journal of Statistical Mechanics L03002 (2011). [arXiv:1010.3716]

{5} *Local quantum quenches in critical one-dimensional systems : entanglement, the Loschmidt echo, and light-cone effects.*, J.-M. Stéphan and J. Dubail, Journal of Statistical Mechanics P08019 (2011). [arXiv:1105.4846]

{6} *Phase transition in the Rényi-Shannon entropy of Luttinger liquids*, J.-M. Stéphan, G. Misguich and V. Pasquier, Physical Review B **84**, 195128 (2011). [arXiv:1104.2544]

Prépublications

{7} *Entanglement entropy in Rokhsar-Kivelson wave functions : from criticality to topological order* J.-M. Stéphan, G. Misguich and V. Pasquier, [arXiv:1108.1699]

Remerciements

Je remercie Pasquale Calabrese et Didier Poilblanc, qui ont accepté la pénible tâche de rapporteur, ainsi que les examinateurs : Jean-Sébastien Caux, Jesper Jacobsen et Henk Hilhorst. Vous avez eu à affronter des difficultés liées à la langue, l’avion, ou le RER, et je suis très heureux de votre présence dans le jury.

Je suis particulièrement redevable à mes deux directeurs Grégoire et Vincent, qui ont encadré cette thèse, et m’ont beaucoup apporté. Outre leurs évidentes qualités scientifiques, je retiendrai leur disponibilité, leur humilité, ainsi que leur complémentarité. Je les remercie aussi pour leur soutien sans faille lors des périodes délicates, notamment pour la recherche de postdocs et la préparation de la soutenance.

J’ai beaucoup bénéficié de conseils et discussions avec des chercheurs plus expérimentés. Qu’il me soit permis de remercier tout particulièrement – en plus des noms déjà cités – Fabien Alet, Paul Fendley, Shunsuke Furukawa, Andreas Läuchli, Frank Pollmann et Hubert Saleur.

Je remercie le personnel et les chercheurs de l’IPhT, qui font de ce laboratoire un lieu de travail idéal. Je pense en particulier à Michel Bauer, Loïc Bervas, Anne Capdepon, Catherine Cataldi, Olivier Golinelli, Jean-Yves Ollitrault, Henri Orland, Laure Sauboy et Sylvie Zaffanella. Merci aussi aux membres du service informatique.

J’ai occupé le bureau 109 pendant deux ans, en compagnie de Clément et Jérôme : nous formions une belle équipe, et pour cela je tiens à les remercier. J’ai aussi appris beaucoup de science avec eux, et les discussions, démarrées habituellement autour d’un verre de café, ont même pu être transformées en une collaboration fructueuse avec Jérôme. Après leur départ et pour la dernière année, Hélène et Alexandre se sont montrés à la hauteur de leurs prédécesseurs, un grand merci à eux aussi.

Je remercie Roberto et ses soirées au vieux chêne (c’était pas mal!), Emeline avec qui l’on ne peut jamais s’ennuyer, Michaël et ces séances de blitz sans concessions, ainsi que Jeanne pour la coloc. Je n’oublie pas les autres thésards et postdocs, même si je ne les cite pas nommément. Puissent-ils ne pas trop m’en vouloir. Je ne doute pas que la bonne ambiance, notamment lors des repas à la cantine, perdurera.

Enfin, je remercie ma famille, notamment mes parents et mon frère, pour leurs encouragements et leur soutien dans la voie que j’ai choisie.

Table des matières

I	Introduction : matière condensée et information quantique	5
I.1	Systèmes quantiques : le problème à N corps	5
I.1.1	Transitions de phase quantiques	5
I.1.2	Ordre topologique	6
I.2	Quelques concepts d'information quantique	6
I.2.1	Intrication	6
I.2.2	Entropie d'intrication	7
I.3	Organisation du manuscrit	9
II	Quelques aspects des théories conformes en deux dimensions	13
II.1	Systèmes critiques	13
II.1.1	Transitions de phase	13
II.1.2	Un modèle simple sur réseau, le modèle d'Ising	13
II.2	Un autre exemple simple sur réseau : les dimères	15
II.2.1	Définition	15
II.2.2	Théorie de Kasteleyn	16
II.2.3	Le modèle de dimères est critique	18
II.2.4	Représentation de hauteur et description continue	20
II.2.5	La matrice de transfert	22
II.3	Théorie conforme	24
II.3.1	Qu'est-ce qu'une théorie conforme ?	24
II.3.2	Tenseur énergie-impulsion	25
II.3.3	Identité de Ward conforme	26
II.3.4	Point de vue algébrique	26
II.4	Théorie conforme avec bord	30
II.4.1	Théorie sur une bande	31
II.4.2	Classification des conditions aux bords invariantes conformes	32
II.4.3	Facteurs g universels d'Affleck et Ludwig	33
II.5	Exemples d'application : intrication dans des chaînes de spins	34
II.5.1	Une mesure géométrique de l'intrication	34
II.5.2	Entropie d'intrication	36

III	Intrication dans les fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson critiques	43
III.1	Hamiltonien et fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson	44
III.1.1	Introduction	44
III.1.2	Le point RK	45
III.1.3	Diagramme de phase à température nulle	47
III.2	Entropie d'intrication et entropie de Shannon	48
III.2.1	Décomposition de Schmidt	48
III.2.2	Matrice de transfert et chaîne de spin correspondante	50
III.2.3	Résumé de la correspondance	51
III.3	Résultats pour le boson libre	53
III.3.1	Deux points particuliers	54
III.3.2	Lois d'échelle pour l'entropie	54
III.3.3	Cylindre infini et dimères	55
III.3.4	Arguments analytiques généraux	61
III.3.5	Répliques et livre de la théorie conforme	64
III.3.6	Vérifications numériques	67
III.3.7	Transition de phase	69
III.3.8	Cas ouvert	72
III.4	Modèles minimaux sur l'exemple d'Ising	78
III.4.1	Entropie de Shannon pour elle-même	78
III.4.2	Cylindre infini pour Ising : l'échec des répliques	79
III.4.3	Quelques mots sur les modèles RSOS	85
III.4.4	Autres géométries	86
III.5	Conclusion	90
IV	En dehors de l'équilibre : la trempe quantique	97
IV.1	Présentation	97
IV.1.1	Qu'est-ce qu'une trempe quantique ?	97
IV.1.2	Fidélité	98
IV.1.3	Trempe locale et trempe globale	98
IV.2	Fidélité bipartite	99
IV.2.1	Loi d'échelle et catastrophe d'orthogonalité	100
IV.2.2	Systèmes unidimensionnels critiques	102
IV.2.3	Systèmes unidimensionnels critiques II : effets de bord	111
IV.2.4	Quelques résultats en dimension supérieure	115
IV.3	Évolution temporelle suite à une trempe locale	118
IV.3.1	Découpage, collage et ping-pong	119
IV.3.2	Comparaison analytique/numérique	126
IV.4	Conclusion	135
A	Some exact results for the bipartite fidelity in XX chains	139
A.1	Bipartite fidelity as a determinant	139
A.1.1	Diagonalization	140
A.1.2	Wick's theorem	140

A.2	Closed form formula for the determinant	141
A.2.1	The Cauchy determinant	141
A.2.2	A Cauchy-like determinant	141
A.3	Asymptotic expansion at half filling : results	142
A.3.1	Some notations	142
A.3.2	The toughest term	142
A.3.3	Summary of the expansions	143
A.3.4	Final result at half-filling	144
A.3.5	Numerical checks	145
A.4	Away from half filling	145
A.5	Comparison LBF vs EE	146
A.6	Some useful formulae	147
A.6.1	Two superfactorial identities	147
A.6.2	Asymptotic expansions	148

CHAPITRE I

Introduction : matière condensée et information quantique

Ces dernières années ont vu le développement rapide de recherches menées à l'interface entre la matière condensée et l'information quantique. Ce rapprochement n'est pas seulement dû aux importants progrès expérimentaux dans les systèmes d'atomes froids, qui permettent maintenant d'étudier des systèmes à N corps quantiques. Il est maintenant reconnu que certains outils développés initialement pour l'information quantique permettent de jeter un nouveau regard sur divers systèmes de matière condensée « traditionnelle ». En particulier, le concept d'*intrication* s'avère intimement lié à la criticité quantique [1, 2, 3], et les mesures d'intrications des outils de choix pour étudier de nouvelles phases exotiques de la matière, qui résistent aux approches traditionnelles. Cette thèse s'inscrit dans cette démarche.

Afin de justifier l'intérêt d'une telle approche, nous allons d'abord brièvement présenter quelques uns des systèmes quantiques qui sont intéressants de ce point de vue, avant de présenter les concepts d'information quantique qui nous seront utiles par la suite.

I.1 Systèmes quantiques : le problème à N corps

Nous nous intéressons à des systèmes quantiques mésoscopiques ou macroscopiques, c'est à dire des systèmes possédant un grand nombre de degrés de liberté. On peut penser à un système de N particules (bosons ou fermions), à priori en interaction. Ce type de système est en général difficile à étudier, mais peut donner lieu à des comportements collectifs intéressants. Nous en présentons ici deux exemples.

I.1.1 Transitions de phase quantiques

Une transition de phase quantique [4] est une transition entre deux phases quantiques différentes, qui se déroule sous l'effet d'un paramètre extérieur λ , et à température nulle $T = 0$. λ peut typiquement être le champ magnétique, la pression, ou même le dopage. Cette transition a lieu lorsque l'énergie du fondamental $E(\lambda)$ devient non-analytique, à la limite thermodynamique. Le point de transition est appelé point critique quantique, nous le notons λ_c . La transition

s'accompagne d'un changement qualitatif important des propriétés du système étudié. Les transitions dites du second ordre vont nous intéresser en priorité. Typiquement le système va alors posséder un gap $\Delta(\lambda)$, qui va se fermer au point critique :

$$\Delta(\lambda) \sim |\lambda - \lambda_c|^{z\nu}. \quad (\text{I.1})$$

$z\nu$ est l'exposant critique correspondant. Si ξ désigne une longueur de cohérence typique du système, alors celle-ci diverge au voisinage du point critique :

$$\xi(\lambda) \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu}. \quad (\text{I.2})$$

Comme exemples, on peut citer la transition isolant-supraconducteur, ou bien des transitions ferromagnétique-paramagnétique dans des composés comme LiHoF4.

I.1.2 Ordre topologique

La théorie de Landau des transitions de phase est un des piliers de notre compréhension des différentes phases de la matière, ainsi que des transitions entre ces phases. Celle-ci cherche à classer les différents états de la matière par leurs symétries, et les transitions qui ont lieu entre eux. Cependant, certains systèmes échappent à cette description et possèdent une forme d'ordre caché appelé *ordre topologique* [5, 6]. Les exemples les plus fameux sont fournis par l'effet Hall quantique fractionnaire [7, 8] en deux dimensions, ainsi que les isolants topologiques [9, 10]. Nous discuterons très peu ce type d'ordre dans ce manuscrit, même s'il est possible que certains résultats présentés ici soient utiles dans ce contexte. L'article {7} s'inscrit aussi dans cette thématique. Signalons finalement que ces phases peuvent exhiber des comportements assez exotiques : excitations fractionnaires, statistiques non-abéliennes, etc. Leur compréhension est actuellement un sujet d'étude majeur en matière condensée.

I.2 Quelques concepts d'information quantique

I.2.1 Intrication

Le phénomène d'intrication est une des caractéristiques les plus étonnantes de la mécanique quantique : la mesure d'une observable dans une partie A du système peut affecter instantanément le résultat possible d'une mesure dans une autre partie B . Ceci, quelle que soit la distance qui sépare A de B . Pour illustrer cela, considérons deux spins, qui peuvent prendre deux valeurs $\uparrow$ ou $\downarrow$. Supposons que l'on prépare le système – comportant les deux spins – dans l'état

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_A \downarrow_B\rangle + |\downarrow_A \uparrow_B\rangle). \quad (\text{I.3})$$

Nous disposons aussi de deux observateurs, traditionnellement nommés Alice et Bob : Alice ne peut mesurer que des observables restreintes au système A , et Bob au système B . Si Alice mesure $\uparrow_A$, alors Bob mesurera $\uparrow_B$, et inversement. On dit que l'état (I.3) est intriqué. Tous les états ne sont pas intriqués. Ainsi,

$$|\psi\rangle = |\uparrow_A\rangle \otimes |\downarrow_B\rangle \quad (\text{I.4})$$

ne l'est pas. Signalons aussi que c'est ce phénomène qui permet l'existence d'algorithmes quantiques performants[11, 12], et empêche toute explication des corrélations quantiques via des variables cachées locales[13, 14, 15].

L'intrication n'est pas seulement un phénomène qualitatif, et il est important d'en trouver des observables quantitatives. C'est un des objets de l'information quantique théorique. Pour un système dans un état pur et biparti (que l'on coupe en deux), la situation est relativement bien comprise, comme expliqué ci-après. Dans le cas contraire, la compréhension et la classification des mesures d'intrication est un problème beaucoup plus difficile, objet de nombreuses recherches.

I.2.2 Entropie d'intrication

a Définition

Considérons un système quantique, préparé dans un état pur $|\psi\rangle$. Le système est spatialement découpé en deux sous-systèmes A et B , comme montré à la figure I.1.

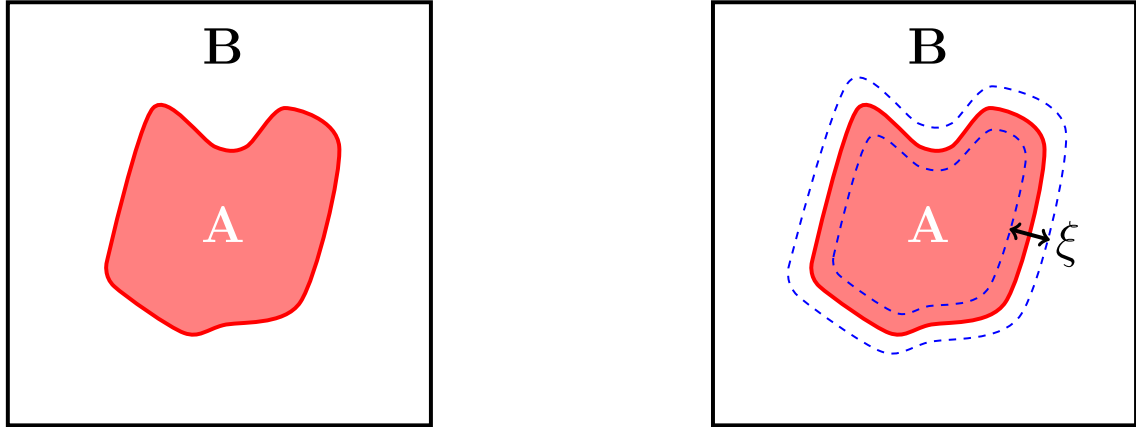


FIGURE I.1 – *A gauche* : exemple de bipartition d'un système quantique en dimension $d = 2$. On a supposé que l'espace de Hilbert du système total pouvait s'écrire comme un produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Même si c'est le cas qui va nous intéresser en priorité par la suite, la bipartition n'est pas nécessairement spatiale. *A droite* : pour un système possédant une longueur de corrélation ξ , l'intrication s'étend le long de la frontière dans un volume ξL^{d-1} .

Vu d'Alice (dans A), le système n'est plus dans un état pur, et ses observations sont intriquées avec celles de Bob. La matrice densité d'Alice est

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (\text{I.5})$$

On définit alors l'*entropie d'intrication*, ou *entropie de von Neumann*[16] comme

$$S_A = -\text{Tr}_A \rho_A \ln \rho_A. \quad (\text{I.6})$$

b Décomposition de Schmidt

La plupart des caractéristiques importantes de l'entropie d'intrication découlent de la propriété mathématique suivante, appelée *décomposition de Schmidt*. Tout état pur peut s'écrire comme

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\psi_{\alpha A}\rangle \otimes |\psi_{\alpha B}\rangle. \quad (\text{I.7})$$

Les $|\psi_{\alpha A}\rangle$ et $|\psi_{\alpha B}\rangle$ sont des vecteurs mutuellement orthogonaux dans $\mathcal{H}_A$ et $\mathcal{H}_B$ respectivement. Les λ_{α} peuvent être choisies réelles non-négatives, et sont appelées valeurs propres de Schmidt. Elles sont aussi normalisées :

$$\sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 = 1. \quad (\text{I.8})$$

En terme de ces valeurs propres, l'entropie est alors donnée par

$$S_A = - \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 \ln(\lambda_{\alpha}^2). \quad (\text{I.9})$$

Notons que les λ_{α}^2 peuvent être vues comme des probabilités. L'entropie d'intrication est alors identique à l'entropie de Shannon (classique) de ce jeu de probabilités.

c Propriétés

L'entropie d'intrication possède de nombreuses propriétés intéressantes. Citons les suivantes :

- L'entropie de A par rapport à B est égale à l'entropie de B par rapport à A : $S_A = S_B = S$. Ceci découle immédiatement de la décomposition de Schmidt, mais n'est plus vrai si le système est dans un état mixte.
- L'entropie d'intrication est indépendante de la base.
- L'entropie est sous-additive : si l'on se donne deux sous-systèmes quelconques A_1 et A_2 , alors on a

$$S_{A_1} + S_{A_2} \geq S_{A_1 \cup A_2} + S_{A_1 \cap A_2}. \quad (\text{I.10})$$

- Pour un système dans un état pur que l'on coupe en deux, l'entropie d'intrication est l'unique « bonne » mesure d'intrication, c'est à dire l'unique mesure qui satisfait les trois contraintes

1. d'invariance sous les transformations unitaires locales. Autrement dit, S est uniquement fonction des λ_{α} .
2. de continuité.
3. d'additivité : $S(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = S(|\psi\rangle) + S(|\phi\rangle)$.

- Pour un système quantique en dimension d , l'entropie suit habituellement une *loi d'aire*. Supposons que notre système possède une longueur de corrélation ξ . Si L est une taille typique du système, son « volume » est d'ordre L^d , et la frontière entre A et B a une « aire » L^{d-1} . L'intrication entre A et B ne va donc se propager que sur des distances d'ordre ξ , dans un volume ξL^{d-1} le long de la frontière. Voir la figure I.1 à droite pour un exemple. Quand L devient grand, l'entropie suit donc la loi d'échelle

$$S(L) = aL^{d-1} + o(L^{d-1}). \quad (\text{I.11})$$

Pour un système critique, dont la longueur de corrélation diverge, des corrections multiplicatives logarithmiques sont possibles. Ce résultat doit être comparé avec l'entropie d'intrication d'un état pur pris au hasard dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Pour une telle fonction d'onde l'entropie vérifie alors plutôt une loi de volume $S(L) \propto L^d$. Les systèmes pertinents du point de vue de la matière condensée ont donc la caractéristique d'être relativement peu intriqués.

d Applications

L'étude de l'entropie a permis d'améliorer notre compréhension de certains systèmes de matière condensée. Citons trois de ses principaux succès :

- Pour des systèmes unidimensionnels critiques, l'entropie viole la loi d'aire et diverge logarithmiquement avec la taille d'un sous-système, alors qu'elle sature lorsque le système possède une longueur de corrélation finie. Le préfacteur est lié à la charge centrale de la théorie conforme sous-jacente, qui indexe la classe d'universalité du modèle étudié. Ce résultat est présenté en II.5.2, et nous le discuterons à nouveau au chapitre IV.
- Pour un système quantique bidimensionnel qui possède un ordre topologique caché, l'entropie suit la loi d'échelle $S = aL - S_{\text{topo}} + o(1)$. Le terme sous-dominant est lié à la dimension quantique $\mathcal{D}$ de la théorie topologique des champs qui décrit le système à la limite continue[17, 18].
- L'entropie est intimement liée à certaines techniques numériques qui permettent de simuler les systèmes quantiques à N corps. Parmi elles, on peut citer des méthodes maintenant bien établies comme DMRG[19], et d'autres prometteuses basées sur des réseaux de tenseurs[20, 21]. En particulier l'entropie permet d'estimer la difficulté à simuler un problème de mécanique quantique sur un ordinateur classique.

Les deux premiers points peuvent être très utiles en pratique. Étant donné une fonction d'onde dont on ne connaît a priori rien, l'entropie permet de renseigner sur certaines des propriétés importantes du système : dans quelle phase se trouve-t-on, y a-t-il une forme d'ordre caché, etc. Pour ce faire, il faut étudier les lois d'échelle que suit l'entropie, et l'information intéressante est bien souvent cachée dans les termes sous-dominants à la loi d'aire. Par la suite, nous utiliserons cette méthode de manière systématique.

I.3 Organisation du manuscrit

Cette thèse traite de l'application des méthodes de l'information quantique à certains problèmes de matière condensée, notamment en relation avec la criticité quantique. Nous étudions ces questions en utilisant des méthodes aussi bien numériques (fermions libres, diagonalisation exactes, ...) qu'analytiques (théorie des champs, et notamment théorie conforme).

Le manuscrit est organisé comme suit :

- Au chapitre II nous présentons quelques résultats bien connus de théorie conforme qui permet de décrire les systèmes critiques bidimensionnels classiques à la limite continue. Nous en profitons aussi pour discuter certains modèles sur réseau auxquels on peut appliquer ces techniques. Nous discutons pour finir une application bien connue à l'entropie d'intrication, ainsi qu'à une autre mesure d'intrication, cette fois multipartie. Cette dernière fait l'objet d'une courte publication{3}.
- Le chapitre III nous permet d'étudier en détails l'entropie d'intrication pour une certaine classe d'états bidimensionnels, dites de Rokhsar et Kivelson. Nous expliquons comment calculer cette entropie en pratique, et extrayons certaines caractéristiques universelles de ces fonctions d'onde. Les articles correspondants sont les {1}, {2} et {6}.
- Le chapitre IV est finalement l'occasion d'introduire une quantité inspirée de l'entropie, que nous nommons *fidélité bipartie*. Ce n'est pas une mesure d'intrication au sens strict, mais elle possède de nombreuses propriétés intéressantes, que nous mettons en évidence. Nous nous intéressons aussi au cours de ce chapitre à des problématiques hors d'équilibre dans des chaînes de spins critiques, que nous étudions via l'entropie et la fidélité. Les articles correspondants sont les {4} et {5}.

Bibliographie

- [1] Amico L, Fazio R, Osterloh A and Vedral V, *Entanglement in many-body systems*, 2008 Rev. Mod. Phys **80** 517
- [2] Calebrese P, Cardy J and Doyon B (ed), *Entanglement entropy in extended quantum systems*, 2009 J. Phys. A : Math. Theor **42** 500301
- [3] Eisert J, Cramer M and Plenio M. B, *Colloquium : Area laws for the entanglement entropy*, 2010 Rev. Mod. Phys **82** 277
- [4] Sachdev S, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (2001)
- [5] Thouless D. J, Kohmoto M, Nightingale M. P and den Nijs M, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, 1982 Phys. Rev. Lett **49** 405
- [6] Wen, X. G., *Topological orders and edge excitations in fractional quantum Hall states*, 1995 Advances in Physics **44** 405
- [7] Tsui D. C, Stormer H. L and Gossard A. C, *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*, 1982 Phys. Rev. Lett **48** 1559
- [8] Laughlin, R. B, *Anomalous Quantum Hall Effect : An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations*, 1983 Phys. Rev. Lett **50** 1395
- [9] Kane C. L and Mele E. J, *Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*, 2005 Phys. Rev. Lett **95** 146802 ; Kane C. L and Mele E. J, *Quantum Spin Hall Effect in Graphene*, 2005 Phys. Rev. Lett **95** 226801
- [10] Bernevig B. A, Hughes T. L and Zhang S-C, *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*, 2006 Science **314** 1757
- [11] Shor P. W, *Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer*, 1997 SIAM J. Comput. **26** 1484
- [12] Grover L. K, *A fast quantum mechanical algorithm for database search*, 1996 Proceeding, STOC **28** 212
- [13] Einstein A, Podolsky B and Rosen N, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete ?*, 1935 Phys. Rev **47** 777
- [14] Bell J. S, *On the Einstein Podolsky Rosen Paradox* 1964 Physics **1** 195
- [15] Aspect A, Grangier P and Roger G, *Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment : A New Violation of Bell's Inequalities*, 1982 Phys. Rev. Lett **49** 91 ; Aspect A, Dalibard J and Roger G, *Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers*, 1982 Phys. Rev. Lett **49** 1804

- [16] von Neumann J, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin : Springer (1955)
- [17] Kitaev A and Preskill J, *Topological entanglement entropy*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** 110404
- [18] Levin M and Wen X-G, *Detecting Topological Order in a Ground State Wave Function*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** 110405
- [19] White S, *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*, 1992 Phys. Rev. Lett **69** 2863
- [20] Cirac J. I and Verstraete F, *Renormalization and tensor product states in spin chains and lattices*, 2009 J. Phys. A : Math. Theor **42** 504004
- [21] Vidal G, *Class of Quantum Many-Body States That Can Be Efficiently Simulated*, 2008 Phys. Rev. Lett **101** 110501

CHAPITRE II

Quelques aspects des théories conformes en deux dimensions

II.1 Systèmes critiques

II.1.1 Transitions de phase

Considérons un système physique classique comportant un grand nombre de degrés de liberté, et influencé par un certain nombre de paramètres extérieurs comme la température, la pression, un champ magnétique, etc. Il y a transition de phase lorsque le système se transforme radicalement sous l'effet de la variation d'un de ces paramètres extérieurs. On peut citer par exemple les diverses transitions que subit l'eau : liquide-solide (solidification) autour de $T = 273K$ à pression ambiante, fusion, ébullition, etc.

La description d'un tel système peut être simplifiée en un modèle, que l'on étudie à l'aide des méthodes de la physique statistique. Ceci permet de définir mathématiquement un certain nombre de quantités globales, comme l'énergie libre et la capacité calorifique, entre autres. Il y a transition de phase lorsque l'énergie libre devient non-analytique à la limite thermodynamique, c'est à dire lorsque le nombre de degrés de liberté tend vers l'infini. On distingue habituellement les transitions dites du premier ordre des transitions du second ordre. Les premières sont les plus singulières, et impliquent une chaleur latente : le système émet ou doit recevoir une grande quantité d'énergie pour que la transition ait lieu. Les transitions du second ordre se font de manière continue et n'impliquent pas de chaleur latente. C'est le cas de la transition ferromagnétique, en fonction de la température, dans certains métaux magnétiques comme le fer. A la transition on dit alors que le système est critique, et le point de transition est nommé *point critique*. Notons que l'eau aussi possède un point critique, à température $T_c \simeq 647K$ et pression $P_c \simeq 221\text{bars}$. Nous allons mentionner ci-après certaines autres propriétés des points critiques, en prenant comme exemple le modèle d'Ising.

II.1.2 Un modèle simple sur réseau, le modèle d'Ising

Un bon modèle de physique statistique doit posséder les deux caractéristiques suivantes

1. Il doit être simple, afin de pouvoir être étudié efficacement. Idéalement, on voudrait même pouvoir calculer exactement certaines des grandeurs physiques importantes du modèle.
2. Il doit capturer l'essence du phénomène physique que l'on cherche à décrire.

Le modèle d'Ising en est un exemple, peut-être le plus fameux, et permet de décrire le comportement de certains matériaux magnétiques. Considérons un réseau hypercubique infini $a\mathbb{Z}^d$ en dimension quelconque d . Chaque site du réseau représente un atome, et a est la distance inter-atomique. L'atome numéro i porte un moment magnétique de spin s_i : $s_i = +1$ si le spin est « up » et $s_i = -1$ si le spin est « down ». Les interactions entre spins font que deux spins voisins ont tendance à s'aligner entre eux. On demande alors que l'énergie d'une configuration de tous les spins soit donnée par

$$E(\{s_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j. \quad (\text{II.1})$$

La notation $\langle ij \rangle$ indique que la somme ne se fait que sur les plus proches voisins sur le réseau. La fonction de partition est alors donnée à température T par

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E(\{s_i\})} \quad , \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (\text{II.2})$$

On peut en déduire les quantités thermodynamiques usuelles. En dimension $d \geq 2$, il existe une température critique $T_c > 0$, la température de Curie. Pour $T < T_c$ les spins s'ordonnent spontanément dans le même sens : le matériau est alors dans une phase ferromagnétique. Pour $T > T_c$ les spins sont désordonnés, et l'on est dans une phase paramagnétique. La fonction de corrélation de deux spins décroît exponentiellement à longue distance :

$$\langle s(r)s(r') \rangle \sim e^{-|r-r'|/\xi}. \quad (\text{II.3})$$

ξ est la longueur de corrélation, finie. Au point critique ξ diverge, et les fonctions de corrélation décroissent cette fois-ci algébriquement :

$$\langle s(r)s(r') \rangle \sim \frac{1}{|r - r'|^{2-d-\eta}}. \quad (\text{II.4})$$

η est un exposant critique. En dimension $d = 2$ par exemple, cet exposant a été calculé exactement par Onsager, et vaut $\eta = 1/8$.

Le comportement que nous venons de décrire peut s'analyser en utilisant les concepts du groupe de renormalisation. Le système à $T > T_c$ est « attiré » par la température $T = \infty$, on dit qu'il *flotte* vers le point fixe stable $T = \infty$. $T = 0$ est de même un point fixe stable. Le point critique est le dernier point fixe du groupe de renormalisation, cette fois-ci instable. Le groupe de renormalisation introduit aussi la notion d'universalité : les exposants critiques ne dépendent que d'un petit nombre de paramètres, comme la dimension d ou bien les symétries. Les détails microscopiques fins, et même souvent le réseau, importent peu. La mesure expérimentale des

exposants critiques de divers matériaux ferromagnétiques fournit ainsi des résultats très proches. Ces considérations nous permettent d'introduire la notion de classe d'universalité : deux modèles microscopiques a priori très différents peuvent tout à fait être décrits à la limite continue par une même classe d'universalité. Ceci nous permet de justifier a posteriori les caractéristiques que l'on exigeait d'un bon modèle de physique statistique. Signalons finalement que l'on dispose de méthodes très puissantes pour analyser les phénomènes critiques en dimension $d = 2$. Parmi elles figurent les théories conformes. Elles sont l'objet de ce chapitre.

II.2 Un autre exemple simple sur réseau : les dimères

Nous allons étudier ici un autre modèle de la physique statistique : le modèle de dimères. Il va nous servir de fil conducteur tout au long de ce chapitre, car c'est une des régularisations les plus simples d'une théorie conforme des champs.

II.2.1 Définition

Partons d'un réseau (ou graphe) a priori quelconque. Nous définissons le dimère comme une entité qui relie deux sites du réseau (ou noeuds du graphe). L'acception la plus courante du modèle impose les trois contraintes suivantes

1. Les dimères ne peuvent relier que les sites plus proches voisins sur le réseau.
2. Un site ne peut être occupé que par un seul dimère. C'est la contrainte de "cœur dur".
3. Tous les liens – entre sites plus proches voisins – sont occupés par des dimères.

Un pavage de dimères (ou configuration de dimères) est la donnée d'un agencement possible des dimères sur les liens du réseau. Voir la figure II.1 pour un exemple. On relâche parfois la troisième contrainte, en autorisant la présence de monomères, qui sont des sites inoccupés par les dimères. Dans la suite et sauf mention explicite du contraire, les trois contraintes seront imposées.

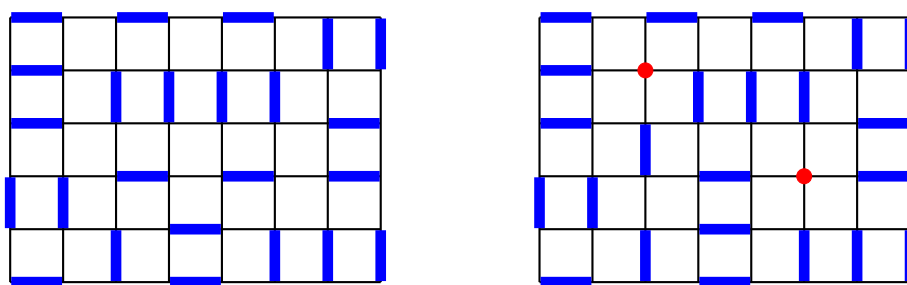


FIGURE II.1 – *A gauche* : Un pavage de dimères sur un réseau carré, de longueur $L_x = 8$ et de hauteur $L_y = 6$. Les dimères sont représentés par des traits bleus épais. Chaque lien du réseau est occupé par un dimère, et un seul. *A droite* : Pavage de dimère sur le même réseau, mais où l'on a relâché la contrainte (3.), en autorisant les monomères (points rouges).

Ce modèle jouet permet de décrire divers systèmes physiques. On peut notamment citer l'adsorption de molécules diatomiques à la surface d'un cristal et le magnétisme frustré. Ce deuxième aspect sera étudié plus en détail au chapitre III où nous présenterons une version quantique du modèle. Signalons aussi les liens qui existent avec d'autres modèles de la physique statistique. En particulier, le modèle d'Ising peut être reformulé en termes de dimères sur un réseau spécifique, dit réseau de Fisher [1, 2].

II.2.2 Théorie de Kasteleyn

Une première question qui se pose est celle du dénombrement des pavages de dimères sur un réseau donné. C'est en général un problème difficile, mais la réponse est connue dans le cas particulier des réseaux planaires, qui va nous intéresser par la suite. Ce résultat, devenu un classique de combinatoire, a été obtenu indépendamment par Kasteleyn[3] et Temperley et Fisher[4] en 1961. Nous allons ici présenter brièvement la méthode.

a Pfaffien

Le Pfaffien d'une matrice M antisymétrique de taille $(2n \times 2n)$ est défini comme

$$\text{Pf } M = \sum_{\pi \in S_{2n}} \epsilon(\pi) M_{\pi_1 \pi_2} M_{\pi_3 \pi_4} \dots M_{\pi_{2n-1} \pi_{2n}}, \quad (\text{II.5})$$

où $\epsilon(\pi)$ est la signature de la permutation π . La somme porte sur les permutations de $(1, 2, \dots, 2n)$ qui satisfont les contraintes

$$\pi_{2i-1} < \pi_{2i} \quad , \quad 1 < i < n \quad (\text{II.6})$$

$$\pi_{2i-1} < \pi_{2i+1} \quad , \quad 1 < i < n-1. \quad (\text{II.7})$$

Le Pfaffien est lié au déterminant par l'importante relation[5]

$$(\text{Pf } M)^2 = \det M. \quad (\text{II.8})$$

Cette relation fait du Pfaffien un objet pratique à manipuler, car on peut l'évaluer en utilisant les techniques standard de calcul de déterminant. Notons aussi que c'est un objet familier en physique théorique. Il permet par exemple l'écriture compacte du théorème de Wick appliqué à un corrélateur fermionique, ou bien de construire des fonctions d'onde d'essai pour l'effet Hall.

b Pavage de dimères

Nous allons exposer ici la méthode sur l'exemple du réseau carré. La fonction de partition, ou le nombre de pavages de dimères, est donné à un signe près par

$$\mathcal{Z} = \text{Pf } \mathcal{K}. \quad (\text{II.9})$$

$\mathcal{K}$ est une matrice d'adjacence signée et antisymétrique, construite de la manière suivante. Orientons tout d'abord le réseau, en posant des flèches sur chacun des liens. Un élément de la

matrice de Kasteleyn $\mathcal{K}$ est donné par

$$\mathcal{K}_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{si la flèche pointe du site } i \text{ au site } j \\ -1 & \text{si la flèche pointe du site } j \text{ au site } i \\ 0 & \text{si } i \text{ et } j \text{ ne sont pas plus proches voisins} \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

La clef réside dans le choix de la règle que doit respecter l'agencement des flèches sur le réseau. Autour de chaque plaquette élémentaire, le produit des orientations (± 1) des flèches dans le sens des aiguilles d'une montre doit être -1 . Cette règle – dite de Kasteleyn – permet de compter exactement les configurations de dimères. On peut la comprendre intuitivement en remarquant que le nombre de pavages peut s'exprimer formellement comme

$$\mathcal{Z} = \sum_{\pi \in S_{2n}} M_{\pi_1 \pi_2} M_{\pi_3 \pi_4} \dots M_{\pi_{2n-1} \pi_{2n}}, \quad (\text{II.11})$$

où M est la matrice d'adjacence du réseau ($M_{ij} = |\mathcal{K}_{ij}|$) et où les permutations satisfont les contraintes (II.6) et (II.7). Ici la signature de la permutation $\epsilon(\pi)$ est absente. Or c'est précisément cette signature qui rend la somme plus facilement manipulable, en faisant le lien avec le Pfaffien. L'astuce a consisté simplement à choisir les orientations des flèches de manière à ce que tous les termes soient positifs dans l'équation (II.5). Dit autrement, la règle d'orientation de Kasteleyn permet de compenser exactement le signe venant de la signature de la permutation :

$$M_{\pi_1 \pi_2} M_{\pi_3 \pi_4} \dots M_{\pi_{2n-1} \pi_{2n}} = \epsilon(\pi) \mathcal{K}_{\pi_1 \pi_2} \mathcal{K}_{\pi_3 \pi_4} \dots \mathcal{K}_{\pi_{2n-1} \pi_{2n}}. \quad (\text{II.12})$$

Il reste à vérifier qu'il est effectivement possible de trouver une telle orientation des liens. On peut vérifier que c'est toujours le cas sur un graphe planaire. Un exemple est présenté à la figure II.2 pour le réseau carré.

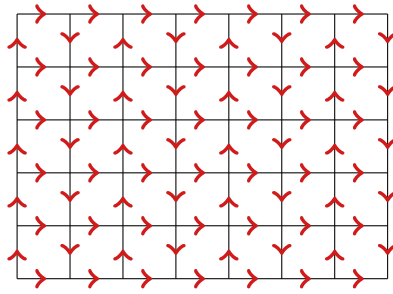


FIGURE II.2 – Un exemple d'orientation de Kasteleyn du réseau carré avec conditions aux bords ouvertes. Sur chaque cycle de longueur paire pris dans le sens des aiguilles d'une montre, on peut vérifier que le produit des signes correspondant aux flèches est bien -1 .

II.2.3 Le modèle de dimères est critique

Nous allons ici nous intéresser à des systèmes de très grandes tailles $L_x, L_y \rightarrow \infty$, toujours sur l'exemple du réseau carré. Dans cette limite thermodynamique, nous allons tâcher de caractériser certaines propriétés du modèle, notamment l'entropie des configurations, ainsi que certaines fonctions de corrélation. Le comportement à longue distance des dimères dépend du type de réseau. En deux dimensions le modèle est habituellement critique si le réseau est biparti^a – comme c'est le cas sur réseau carré – et massif dans le cas contraire.

a Diagonalisation

Le calcul du nombre de pavages de dimères se résume à un problème de diagonalisation. Comme nous allons voir, la situation est ici particulièrement favorable car la diagonalisation peut être réalisée sans approximation. Remarquons que la matrice de Kasteleyn $\mathcal{K}$ définie par la figure II.2 commute avec les opérateurs antisymétriques $\mathcal{T}_y^{(1)}$ et $\mathcal{T}_x^{(2)}$, qui « translatent » respectivement d'un pas du réseau dans la direction y, et de deux pas du réseau dans la direction x, quand c'est possible. A chaque site d'abscisse $x \in 1, 2, \dots, L_x$ et d'ordonnée $y \in \{1, 2, \dots, L_y\}$ on peut associer un ket $|x, y\rangle$. $\mathcal{T}_y^{(1)}$ s'écrit par exemple comme

$$\mathcal{T}_y^{(1)} = \sum_{x=1}^{L_x} \sum_{y=1}^{L_y-1} |x, y+1\rangle \langle x, y| - |x, y\rangle \langle x, y+1|. \quad (\text{II.13})$$

Il est alors naturel d'introduire les modes de Fourier

$$|k_x 0, k_y\rangle = \frac{1}{[(L_x + 1)(L_y + 1)]^{1/2}} \sum_{x=1}^{L_x/2} \sum_{y=1}^{L_y} i^{2x+y} \sin(k_x 2x) \sin(k_y y) |2x, y\rangle \quad (\text{II.14})$$

$$|k_x 1, k_y\rangle = \frac{1}{[(L_x + 1)(L_y + 1)]^{1/2}} \sum_{x=1}^{L_x/2} \sum_{y=1}^{L_y} i^{2x-1+y} \sin(k_x (2x - 1)) \sin(k_y y) |2x - 1, y\rangle \quad (\text{II.15})$$

où les quasi-impulsions k_x et k_y sont données par

$$k_x = \frac{m_x \pi}{L_x + 1}, \quad 1 \leq m_x \leq L_x/2 \quad (\text{II.16})$$

$$k_y = \frac{m_y \pi}{L_y + 1}, \quad 1 \leq m_y \leq L_y. \quad (\text{II.17})$$

Dans cette base les opérateurs de translation sont diagonaux, et $\mathcal{K}$ est diagonale par blocs. La sous-matrice dans un bloc de quasi-impulsion k_x et k_y est deux par deux :

$$\mathcal{K}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} 2i \cos k_y & 2i \cos k_x \\ 2i \cos k_x & -2i \cos k_y \end{pmatrix}. \quad (\text{II.18})$$

a. Un réseau biparti est un réseau dont on peut colorier les sites à l'aide de deux couleurs, de sorte que deux sites plus proches voisins quelconques ne puissent jamais être de la même couleur. Comme exemples de réseaux bipartis on peut citer les réseaux carrés et hexagonaux. Les réseaux triangulaires et kagomés ne sont pas bipartis.

Le déterminant de chaque bloc s'évalue facilement, et l'on obtient

$$\mathcal{Z} = \prod_{k_x, k_y} (4 \cos^2 k_x + 4 \cos^2 k_y)^{1/2}. \quad (\text{II.19})$$

A l'aide de cette expression, il est aisé de voir la croissance exponentielle (avec le nombre de sites) du nombre de pavages de dimères. On peut ainsi évaluer l'énergie libre par dimère (qui est aussi une entropie ici)

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \mathcal{Z}}{N/2} \quad (\text{II.20})$$

$$= \int_0^{\pi/2} dk_x \int_0^{\pi} dk_y \ln (4 \cos^2 k_x + 4 \cos^2 k_y) \quad (\text{II.21})$$

$$= \frac{2K}{\pi}, \quad (\text{II.22})$$

où K est la constante de Catalan.

b Statistiques locales

Nous allons maintenant nous intéresser à des fonctions de corrélation d'opérateurs locaux. Pour ce faire, considérons la matrice de Kasteleyn inverse. On a la formule bien connue de Laplace

$$\mathcal{K}^{-1} = \frac{1}{\det \mathcal{K}} (\text{Com } \mathcal{K})^T, \quad (\text{II.23})$$

où Com désigne la comatrice. En prenant deux indices i et j correspondant à deux sites plus proches voisins sur le réseau, l'élément de matrice $(\text{Com } \mathcal{K})_{ij}$ est le déterminant d'une matrice de Kasteleyn légèrement modifiée par la suppression des lignes et colonnes i et j . Le réseau correspondant (sans les sites i et j) est toujours planaire, et l'orientation des liens vérifie toujours la règle de Kasteleyn. Cet élément de matrice compte donc exactement le nombre de pavages de dimères où l'on a forcé l'occupation par un dimère du lien $i \leftrightarrow j$. $\mathcal{K}_{ij}^{-1}$ est ainsi simplement (le carré de) la probabilité d'avoir un dimère sur le lien $i \leftrightarrow j$. Cette quantité peut facilement être calculée en utilisant la représentation de la matrice de Kasteleyn dans l'espace des quasi-impulsions. On trouve par exemple

$$p[(2x, y) \leftrightarrow (2x, y + 1)] = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{k_x, k_y} \frac{2 \sin(k_y) \sin^2(k_x 2x) \sin(k_y y) \sin(k_y (y + 1))}{4 \sin^2(k_x) + 4 \sin^2(k_y)} \quad (\text{II.24})$$

A la limite thermodynamique et loin du bord, on trouve $p = 1/4$, résultat évident par symétrie. Près du bord, ce résultat n'est évidemment plus valable, car l'entourage d'un site du réseau est anisotrope. On a par exemple le joli résultat suivant[6]

$$p = \frac{1}{\pi}, \quad (\text{II.25})$$

pour la probabilité de trouver un dimère sur un lien du bord bas du réseau, suffisamment loin des côtés droits et gauches.

Ces considérations peuvent être poussées plus loin, afin d'obtenir les corrélations dimère-dimère. La probabilité d'avoir deux dimères sur les liens respectifs $i \leftrightarrow j$ et $i' \leftrightarrow j'$ peut s'écrire sous la forme

$$p(i \leftrightarrow j, i' \leftrightarrow j') = \det \begin{pmatrix} \mathcal{K}_{ij}^{-1} & \mathcal{K}_{ij'}^{-1} \\ \mathcal{K}_{i'j}^{-1} & \mathcal{K}_{i'j'}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.26})$$

et ce résultat se généralise facilement à un plus grand nombre de dimères. A la limite thermodynamique, on obtient l'important résultat suivant pour la corrélation dimère-dimère

$$\langle d(\mathbf{0})d(\mathbf{r}) \rangle \sim \frac{1}{r^2}. \quad (\text{II.27})$$

Cette décroissance algébrique des fonctions de corrélations montre que le système est critique. On peut aussi étudier la corrélation monomère-monomère en utilisant des techniques similaires^b. Asymptotiquement on a

$$\langle m(\mathbf{0})m(\mathbf{r}) \rangle \sim \frac{1}{r^{1/2}}. \quad (\text{II.28})$$

II.2.4 Représentation de hauteur et description continue

Avant d'introduire la représentation de hauteur qui va nous permettre d'introduire le champ libre, remarquons que toutes les fonctions de corrélation du modèle peuvent être exprimées plus ou moins directement à l'aide de la matrice de Kasteleyn inverse $\mathcal{K}^{-1}$. Celle-ci joue ainsi le rôle d'un propagateur. Dans l'espace de Fourier, ses composantes à basses fréquences se comportent comme

$$\mathcal{K}^{-1}(\mathbf{k}) \sim \frac{1}{k^2}, \quad (\text{II.29})$$

signature d'une théorie libre de masse nulle. Remarquons aussi que si l'on avait introduit une fugacité t le long de liens diagonaux (ce qui transforme alors le réseau en un réseau triangulaire), on aurait obtenu $\mathcal{K}^{-1}(\mathbf{k}) \sim \frac{1}{k^2+t^2}$, et la fugacité jouerait alors le rôle de la masse^c.

a Représentation de hauteur

Sur réseau biparti, il existe une représentation des configurations de dimères en termes d'un champ de hauteurs discrètes sur réseau dual[9]. Séparons le réseau en deux sous réseaux A et B , comme montré à la figure II.3. Les hauteurs h_j sont construites de façon suivante : en tournant dans le sens des aiguilles d'une montre sur un site du sous-réseau A , la hauteur diminue de 3 si l'on croise un dimère et augmente de 1 dans le cas contraire. Sur le sous-réseau B la règle

b. Il est tentant de supposer que la corrélation entre deux monomères aux sites i et j est simplement donnée par $\mathcal{K}_{ij}^{-1}$. C'est en fait incorrect car le réseau privé des sites i et j ne respecte plus l'orientation de Kasteleyn. Pour surmonter la difficulté, il faut inverser les orientations des liens selon une ligne en zigzag qui joint les deux monomères. La corrélation s'exprime alors comme un déterminant de Toeplitz, dont la taille est de l'ordre de l'espacement entre les monomères. Le comportement à longue distance s'obtient en appliquant des théorèmes connus sur de tels déterminants. Voir la référence [6] pour de plus amples détails. Nous avons aussi utilisé cette méthode dans l'article [7].

c. Il est cependant possible de rendre le modèle de nouveau critique, en rajoutant des interactions[7, 8]

est inversée : la hauteur augmente de 3 si l'on croise un dimère, et diminue de 1 dans le cas contraire. Avec des conditions aux bords ouvertes et en fixant par convention la hauteur d'une plaquette, la hauteur de toutes les plaquettes est alors fixée de manière univoque. Voir la figure II.3 pour un exemple de configuration de hauteur associée à une configuration de dimères.

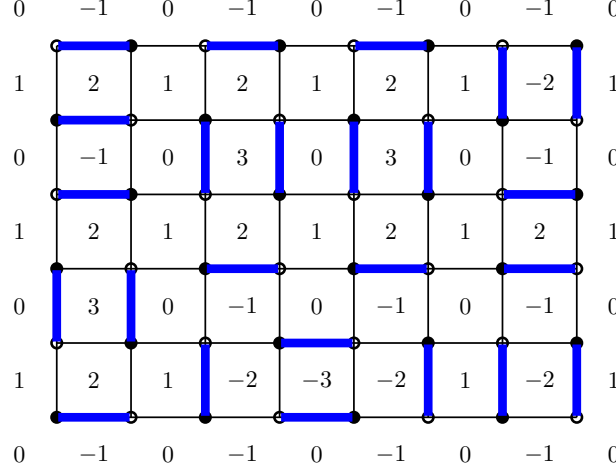


FIGURE II.3 – Représentation de hauteur associée à une configuration de dimères. Les hauteurs vivent sur le réseau dual, dont les sites se situent au milieu de chacune des plaquettes. Le sous-réseau A (resp. B) est représenté par des cercles noirs pleins (resp. vides). On fixe par convention une hauteur nulle dans le coin inférieur gauche.

b Champ libre compact

On se convainc aisément que les configurations les plus plates sont bien plus nombreuses. Une bonne description à la limite continue se doit donc de défavoriser les champs $h(x, y)$ dont les pentes sont raides. Inspiré de plus par l'équation II.29, il est légitime de postuler^d une action gaussienne :

$$S[h] = \frac{\kappa}{4\pi} \int (\nabla h)^2 dx dy. \quad (\text{II.30})$$

κ est appelée la rigidité. Afin de tenir compte des contraintes venant du réseau, le champ h doit notamment être compactifié^e sur un cercle de rayon r :

$$h \equiv h + 2\pi r. \quad (\text{II.31})$$

d. Notre approche est ici essentiellement heuristique, mais certains des résultats que nous présentons sur l'invariance conforme du modèle de dimère ainsi que la description en terme de champ libre peuvent être démontrés[10, 11]

e. Afin d'être cohérent avec cette convention, les hauteurs de la figure II.3 doivent en fait être exprimées en unités de $\pi r/2$.

κ et r ne sont pas fixés de manière indépendante : les exposants que l'on peut calculer dans le champ libre ne seront fonction que du paramètre « physique »

$$R = \sqrt{2\kappa r}, \quad (\text{II.32})$$

que l'on nommera parfois – au risque de le confondre avec r – rayon de compactification. Les opérateurs monomères et dimères peuvent s'exprimer en fonction du champ libre et de ses dérivées[12], et par comparaison avec les équations (II.27) et (II.28) l'on obtient $R = 1$. Signalons aussi que l'action (II.30) peut contenir d'autres termes, à conditions qu'ils respectent les symétries du réseau. Ces termes sont en général non pertinents (au sens du groupe de renormalisation), mais ils peuvent avoir leur importance, comme on le verra au chapitre III.

La théorie (II.30) qui décrit la limite continue du modèle de dimères est invariante sous les transformations conformes : c'est donc un exemple de théorie conforme. Nous allons présenter certains de leurs aspects en II.3.

II.2.5 La matrice de transfert

Il existe une autre méthode permettant d'accéder aux propriétés du système à la limite thermodynamique, la *matrice de transfert* $\mathcal{T}$. Notons $|i\rangle$ un vecteur qui représente les occupations des dimères sur les liens verticaux d'une même ligne horizontale,

$$|i\rangle = |i_1, i_2, \dots, i_{L_x}\rangle. \quad (\text{II.33})$$

Pour $l = 1, \dots, L_x$, i_l vaut 1 si le lien est occupé par un dimère, 0 s'il est vide. Les éléments de matrice sont définis comme suit :

$$\langle i|\mathcal{T}|j\rangle = \begin{cases} 1 & , \text{ si } |i\rangle \text{ et } |j\rangle \text{ sont compatibles} \\ 0 & , \text{ sinon} \end{cases} \quad (\text{II.34})$$

La fonction de partition sur un rectangle $L_x \times L_y$ peut alors s'exprimer à l'aide de $\mathcal{T}$

$$Z = \langle a|\mathcal{T}^{L_y}|a\rangle. \quad (\text{II.35})$$

$|a\rangle$ est une configuration fictive vide de dimères que l'on insère en bas et en haut, voir la figure II.2.5. La matrice de transfert du modèle de dimères sur réseau carré a été étudiée en détails dans la référence[13], et nous reprenons ici certains des résultats. Imposons des conditions aux limites périodiques selon x , L_x pair, et utilisons les notations de $\{\mathbf{1}\}$. L'astuce consiste à remplacer les configurations $|i\rangle$ de dimères par des configurations de fermions, qui codent de manière naturelle la contrainte de coeur dur. Les fermions obéissent aux relations de commutation canoniques $\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij}$ et $\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0$ pour $j = 1, \dots, L_x$. La correspondance est détaillée à la figure II.2.5. Nous notons ainsi

$$|i\rangle = c_{j_1}^\dagger \dots c_{j_n}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{II.36})$$

où $|0\rangle$ est le vide des fermions. n est un nombre conservé, et vaut $n = L_x/2$ dans notre cas (voir encore la figure II.2.5).

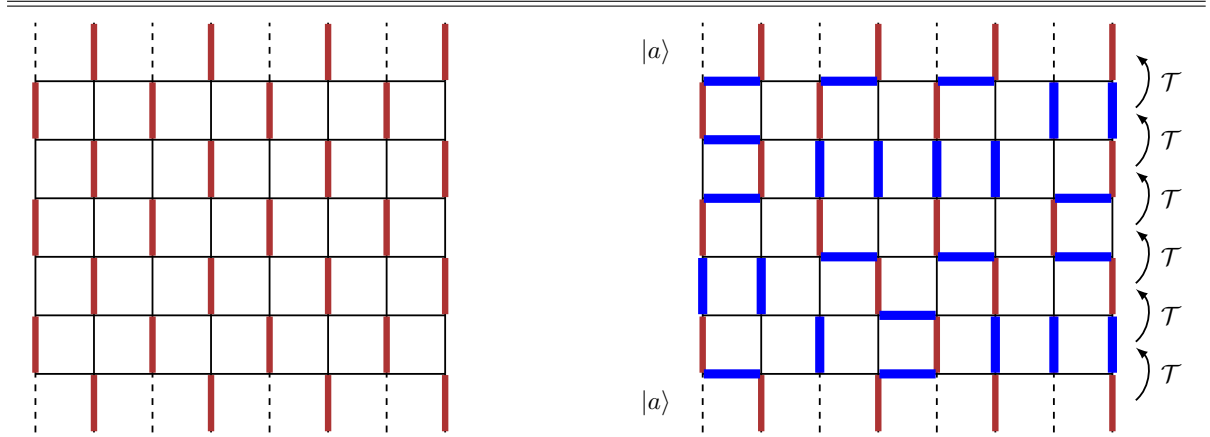


FIGURE II.4 – Matrice de transfert du modèle de dimères sur réseau carré en termes de fermions. Ici $L_x = 8$ et $L_y = 6$. *A gauche* : Configuration fictive de référence, à pente maximale. Les dimères fictifs sont représentés par des traits marron fins. *A droite* : la superposition d'une configuration de dimères réels (traits bleus épais) sur la configuration de référence génère des chemins auto-évitants qui se déplacent vers le haut. On définit alors un fermion comme un lien vertical occupé par un dimère et un seul, qu'il soit réel ou fictif. Leur nombre est conservé par la matrice de transfert. Afin que l'équation (II.35) évalue précisément le nombre de pavages de dimères, on insère des configurations fictives $|a\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle$, vides de dimères réels, en haut et en bas. Dans le langage des fermions $|a\rangle$ s'écrit $|a\rangle = c_2^\dagger c_4^\dagger c_6^\dagger c_8^\dagger |0\rangle$.

La matrice de transfert^f peut alors s'exprimer de façon élégante en fonction des opérateurs de fermions

$$\mathcal{T} = \prod_k \left\{ 1 + [\lambda(k) - 1] d_k^\dagger d_k \right\} \quad (\text{II.37})$$

$$= \exp \left\{ \sum_k \ln \lambda(k) d_k^\dagger d_k \right\}. \quad (\text{II.38})$$

Les $d_k^\dagger$ vérifient les relations de commutation canoniques, et sont des combinaisons linéaires des $c_j^\dagger$. Leurs expressions exactes ne nous sont pas utiles ici. Les valeurs propres à un fermion sont données par

$$\lambda(k) = \cos k + \sqrt{1 + \cos^2 k} \quad , \quad k = \frac{(2m+1)\pi}{L} \quad , \quad m = -L/2, \dots, L/2 - 1. \quad (\text{II.39})$$

Dans la limite d'un cylindre infini ($L_y \rightarrow \infty$), la matrice de transfert est dominée par sa plus grande valeur propre. Celle-ci s'obtient en remplissant une « mer de Fermi », c'est à dire en utilisant tous les états d'impulsion k telles que $\lambda(k) > 1$. En notant Λ_0 cette plus grande valeur propre, on obtient

$$\Lambda_0 = \prod_{k, |k| < \pi/2} \lambda(k). \quad (\text{II.40})$$

f. ou plutôt, une version symétrisée de celle-ci.

Ce résultat permet bien sûr de retrouver l'entropie des dimères (II.22), mais nous allons voir qu'il contient plus d'information. Notons que les équations (II.37) et (II.38) illustrent bien la correspondance entre un problème de mécanique statistique classique en $d + 1 = 2$ dimensions, et un problème de mécanique quantique en $d = 1$ dimension : la matrice de transfert est essentiellement l'exponentielle du Hamiltonien,

$$\mathcal{T} = \exp(-H). \quad (\text{II.41})$$

II.3 Théorie conforme

Nous allons ici introduire succinctement certains aspects des théories conformes bidimensionnelles, en nous focalisant sur les aspects qui nous seront utiles par la suite. Pour une revue plus détaillée, voire les références [14, 15, 16], dont cette présentation est fortement inspirée.

II.3.1 Qu'est-ce qu'une théorie conforme ?

Un système critique est un point fixe du groupe de renormalisation. Une théorie des champs qui décrit ce point fixe est donc nécessairement invariante sous les transformations d'échelle, en plus de l'invariance par rotation et translation. Pour un modèle de physique statistique avec interactions à courte portée, il est de plus naturel de postuler, en suivant la démarche de Polyakov, l'invariance selon toutes les transformations qui préservent localement les angles : les transformations conformes. L'invariance conforme peut être vue comme une version locale de l'invariance d'échelle, et cette hypothèse est très naturelle pour décrire à la limite continue un modèle statistique avec des interactions à courte portée.

Les quantités physiques présentes sur le réseau sont remplacées à la limite continue par leurs analogues renormalisés : des champs $\phi(z, \bar{z})$. Sous une transformation d'échelle combinée à une rotation $z \mapsto \lambda z$, $\lambda \in \mathbb{C}$, ces champs se transforment comme

$$\phi(\lambda z, \lambda \bar{z}) = \lambda^{-\Delta} \bar{\lambda}^{-\bar{\Delta}} \phi(z, \bar{z}). \quad (\text{II.42})$$

$X = \Delta + \bar{\Delta}$ est la dimension d'échelle du champ. Par exemple, le champ correspondant à l'insertion d'un monomère doit avoir pour dimension $X = 1/2$, en vertu de l'équation (II.28). $S = \Delta - \bar{\Delta}$ est le spin, non nul pour les observables qui ne sont pas invariante par rotation. En dimension $d = 2$, les transformations conformes sont essentiellement données par les fonctions holomorphes $z \mapsto w(z)$. Il est alors tentant, afin de généraliser la relation (II.42), de postuler

$$\phi(w, \bar{w}) = \left(\frac{dw}{dz} \right)^{-\Delta} \left(\frac{d\bar{w}}{d\bar{z}} \right)^{-\bar{\Delta}} \phi(z, \bar{z}). \quad (\text{II.43})$$

Δ et $\bar{\Delta}$ sont appelées *dimensions conformes*. Cette dernière relation n'est en fait vérifiée que par certains champs spéciaux, appelés *champs primaires*. Nous verrons qu'il est possible de construire d'autres opérateurs, à partir des dérivées successives des opérateurs primaires. Ceux-ci ne vérifieront pas II.42.

II.3.2 Tenseur énergie-impulsion

Dans une théorie classique des champs, le tenseur énergie-impulsion est défini via la réponse de l'action sous une transformation infinitésimale $x^\mu \rightarrow x^\mu + \epsilon^\mu$,

$$\delta S = \frac{1}{2\pi} \int T_{\mu\nu} \partial^\mu \epsilon^\nu d^2x. \quad (\text{II.44})$$

Nous travaillons ici en deux dimensions, et il est donc pratique d'utiliser la variable complexe $z = x + iy$ ainsi que son complexe conjugué $\bar{z}$. La tenseur énergie-impulsion a alors pour composantes T_{zz} , $T_{\bar{z}\bar{z}}$, $T_{z\bar{z}}$, et $T_{\bar{z}z}$. Les deux dernières composantes sont identiquement nulles, et nous notons $T(z) = T_{zz}$, $\bar{T}(\bar{z}) = T_{\bar{z}\bar{z}}$. Pour le boson libre, T peut s'exprimer directement en fonction du champ de hauteur.

$$T(z) = : \kappa (\partial_z h)^2 : \quad (\text{II.45})$$

Les « : » indiquent qu'une régularisation est nécessaire, car la fonction à deux points $\langle \partial_z h(z) \partial_{z_1} h(z_1) \rangle$ diverge lorsque z_1 tend vers z . En soustrayant cette partie divergente on obtient

$$T(z) = \kappa \lim_{z_1 \rightarrow z} \left\{ \partial_z h(z) \partial_{z_1} h(z_1) - \frac{1}{2\kappa(z - z_1)^2} \right\}, \quad (\text{II.46})$$

et une expression similaire pour $\bar{T}$. Le tenseur énergie impulsion n'est pas primaire. Il se transforme sous une transformation conforme $z \mapsto w(z)$ comme

$$T(z) = (w'(z))^2 T(w) + \frac{1}{2} \lim_{z_1 \rightarrow z} \left\{ \frac{w'(z)w'(z_1)}{(w(z) - w(z_1))^2} - \frac{1}{(z - z_1)^2} \right\}. \quad (\text{II.47})$$

Le deuxième terme dans la partie droite de l'équation (II.47) est un terme d'anomalie. Il provient du fait que la régularisation n'est pas compatible avec la symétrie conforme. Après calcul on obtient

$$T(z) = (w'(z))^2 T(w) + \frac{c}{12} \{w(z), z\}. \quad (\text{II.48})$$

Ici $c = 1$, et $\{w(z), z\}$ est la dérivée Schwarzienne de $w(z)$

$$\{w(z), z\} = \frac{w'''(z)}{w'(z)} - \frac{3}{2} \left(\frac{w''(z)}{w'(z)} \right)^2. \quad (\text{II.49})$$

Cette dérivée possède les deux importantes propriétés suivantes

- Elle est nulle pour les transformations de Möbius $w(z) = \frac{az+b}{cz+d}$, qui envoient la sphère de Riemann sur la sphère de Riemann.
- Elle satisfait la propriété de chaîne $\{w(\zeta(z)), z\} = \{w(\zeta), \zeta\} + \{\zeta(z), z\}$.

Pour une théorie conforme plus générale, la loi de transformation du tenseur énergie-impulsion est entièrement déterminée par ces deux conditions, à un facteur de proportionnalité près : c'est le paramètre c de l'équation (II.48). c est la *charge centrale*, et permet d'indexer (partiellement) la classe d'universalité du modèle statistique bidimensionnel critique. En général elle peut prendre une valeur quelconque. A l'exception du boson libre et du fermion libre, il n'est d'habitude pas possible d'écrire de manière complètement explicite le lagrangien de la théorie. On postule alors que T existe malgré tout.

II.3.3 Identité de Ward conforme

Cherchons maintenant à calculer la variation de l'action sous l'effet d'une transformation conforme infinitésimale $z \mapsto z' = z + \epsilon(z)$. Une telle transformation n'existe pas au sens strict^g dans $\mathbb{C}$. Il est donc nécessaire que la transformation soit restreinte à l'intérieur d'un certain contour $\mathcal{C}$, et agisse comme l'identité à l'extérieur. Il y a ainsi une discontinuité sur $\mathcal{C}$, et la variation de l'action correspondante peut se calculer à l'aide de (II.44). On trouve après un peu d'algèbre le résultat suivant

$$\delta_\epsilon S = -\frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \epsilon(z) T(z) + cc. \quad (\text{II.50})$$

La fonction de corrélation $\langle \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) \rangle$ ne doit pas varier sous l'effet de la transformation conforme infinitésimale, si tous les z_α sont à l'intérieur de $\mathcal{C}$. Cependant, si l'on écrit explicitement cette variation il vient

$$\langle \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int [\mathcal{D}\Phi] \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) e^{-S[\Phi]} \quad (\text{II.51})$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int [\mathcal{D}\Phi] \prod_\alpha (\phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) + \delta_\epsilon \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha)) e^{-S[\Phi] - \delta S[\phi]} \quad (\text{II.52})$$

On s'aperçoit alors que la contribution venant du développement du poids de Boltzmann au premier ordre $e^{-S-\delta S} = (1 - \delta S)e^{-S}$ va être exactement compensée par les variations dues aux champs $\delta_\epsilon \phi_\alpha$. On obtient alors

$$\delta_\epsilon \langle \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) \rangle = \frac{1}{2i\pi} \int_{\mathcal{C}} \epsilon(z) \langle T(z) \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) \rangle. \quad (\text{II.53})$$

En appliquant la loi de transformation des champs primaires, on trouve finalement l'identité de Ward conforme

$$\langle T(z) \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) \rangle = \sum_\alpha \left(\frac{\Delta_\alpha}{(z - z_\alpha)^2} + \frac{1}{z - z_\alpha} \partial_{z_\alpha} \right) \langle \prod_\alpha \phi_\alpha(z_\alpha, \bar{z}_\alpha) \rangle. \quad (\text{II.54})$$

Cette identité de Ward synthétise l'influence de la symétrie conforme sur les fonctions de corrélation. Elle n'est valable que pour les champs primaires, même si l'identité (II.53) est plus générale. Cette identité permet de calculer les fonctions de corrélation à 1, 2 et 3 points.

II.3.4 Point de vue algébrique

Il est souvent pratique de voir une théorie quantique des champs en termes d'opérateurs agissant sur un espace d'états. Pour ce faire, il faut exploiter l'invariance d'échelle et quantifier radialement.

g. mis à part les rotations et les translations

a Quantification radiale

Du point de vue de l'intégrale de chemin, l'espace de Hilbert des états est l'espace des configurations du champ sur un cercle de rayon r_0 . L'analogue du Hamiltonien est alors le générateur $\hat{D}$ des transformations d'échelle. Le vide de la théorie est donné par

$$|0\rangle = \int [\mathcal{D}h(|\mathbf{r}| < r_0)] e^{-S[h]} |h(|\mathbf{r}| = r_0)\rangle. \quad (\text{II.55})$$

Les états excités s'obtiennent alors en insérant des champs dans l'intégrale de chemin ci-dessus. Par exemple pour un champ primaire $\phi_\alpha(z, \bar{z})$ on a

$$|\phi_\alpha\rangle = \lim_{z \rightarrow 0} \phi_\alpha(z, \bar{z}) |0\rangle. \quad (\text{II.56})$$

En utilisant cette correspondance opérateurs-champs, le Hamiltonien peut alors s'écrire à l'aide du tenseur énergie-impulsion : $H = L_0 + \bar{L}_0$, avec

$$L_0 = \frac{1}{2i\pi} \int_C z T(z) dz, \quad (\text{II.57})$$

où C est un contour fermé qui entoure l'origine. Tout comme le champ libre peut-être décomposé en modes, il est tentant de développer le tenseur énergie-impulsion comme

$$T(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{L_n}{z^{n+2}} \quad , \quad L_n = \frac{1}{2i\pi} \int_C z^{n+1} T(z) dz, \quad (\text{II.58})$$

et l'on a des expressions similaires pour les $\bar{L}_n$ en fonction de $\bar{T}(\bar{z})$. Les modes L_n et $\bar{L}_n$ sont appelés modes de Virasoro. Ils satisfont l'algèbre

$$[L_m, L_n] = (m - n) L_{m+n} + \frac{c}{12} m(m-1)(m+1) \delta_{m+n,0}, \quad (\text{II.59})$$

dite *Algèbre de Virasoro*. On peut alors montrer les propriétés suivantes

$$L_n |0\rangle = 0 \quad , \quad n \geq -1 \quad (\text{II.60})$$

$$L_0 |\phi_\alpha\rangle = \Delta_\alpha |\phi_\alpha\rangle \quad (\text{II.61})$$

$$L_n |\phi_\alpha\rangle = 0 \quad , \quad n \geq 1. \quad (\text{II.62})$$

En utilisant l'algèbre de Virasoro, on obtient aussi pour $n > 0$

$$L_0 (L_{-n} |\phi_\alpha\rangle) = (\Delta_\alpha + n) L_{-n} |\phi_\alpha\rangle. \quad (\text{II.63})$$

$L_{-n} |\phi_\alpha\rangle$ est donc état propre de L_0 , avec énergie propre $\Delta_\alpha + n$. En agissant avec tous les modes de Virasoro, il est possible de trouver d'autres états propres, que l'on nomme descendants^h. On construit ainsi la représentation suivante de l'algèbre de Virasoro :

$$|\phi_\alpha\rangle \quad (\text{II.64})$$

$$L_{-1} |\phi_\alpha\rangle \quad (\text{II.65})$$

$$L_{-2} |\phi_\alpha\rangle, L_{-1}^2 |\phi_\alpha\rangle \quad (\text{II.66})$$

$$\vdots \quad (\text{II.67})$$

h. Par analogie avec l'oscillateur harmonique, les L_{-n} sont les créateurs, tandis que les L_n sont les annihilateurs.

Une telle représentation, construite à partir de l'état de plus bas poids $|\phi_\alpha\rangle$ est appelé un module de Verma. Une théorie conforme générique possède plusieurs, voire même une infinité de modules de Verma : si l'on note $\mathcal{V}_\alpha$ le module de Verma associé à un état de plus bas poids α , l'espace de Hilbert est donné par

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha, \bar{\alpha}} \mathcal{V}_\alpha \otimes \bar{\mathcal{V}}_{\bar{\alpha}}. \quad (\text{II.68})$$

Terminons par deux remarques

- Au sein d'un même module de Verma, les énergies propres associées aux divers états propres de L_0 sont toutes séparées par des entiers. Ceci expliquera les résultats obtenus sur le réseau en c , et aura de conséquences importantes en ce qui concerne l'étude des trempes locales IV. En effet le Hamiltonien sur un cylindre de circonférence L peut s'obtenir[17, 18] à l'aide d'une transformation conforme $w(z) = \frac{L}{2\pi} \ln z$:

$$H = v_F \frac{2\pi}{L} (L_0 + \bar{L}_0) - v_F \frac{\pi c}{6L}. \quad (\text{II.69})$$

Nous avons introduit ici un paramètre supplémentaire v_F , que l'on identifie sur le réseau avec la vitesse de Fermi. Il permet de tenir compte de l'indétermination à un facteur multiplicatif près du Hamiltonien. Au niveau de la théorie conforme, on pose $v_F = 1$.

- Une telle construction algébrique est très satisfaisante. En exagérant quelque peu, l'on a ainsi réduit la compréhension des phénomènes critiques bidimensionnels à un problème de classification des représentations d'une certaine algèbre, l'algèbre de Virasoroⁱ.

b Modèles minimaux unitaires

Nous allons ici nous intéresser à une classe particulière de théories conformes, où l'on impose les deux contraintes supplémentaires suivantes

- Les représentations de l'algèbre de Virasoro sont unitaires, c'est à dire que tous les états de la représentation ont une norme positive ou nulle.
- L'espace de Hilbert est construit à partir d'un nombre fini de modules de Verma.

La première hypothèse est justifiée car nous étudions des modèles statistiques dont les poids de Boltzmann sont positifs et locaux. La limite continue, formulée en terme d'observables mésoscopiques, garde en général la propriété de positivité. Dans ce cas, la deuxième est automatiquement vérifiée si $c < 1$, mais pas nécessairement dans le cas contraire. Le résultat important est le suivant : la charge centrale ne peut prendre que des valeurs discrètes

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)} \quad , \quad m = 3, 4, 5, \dots \quad (\text{II.70})$$

et les dimensions d'échelle possibles sont données par

$$\Delta_{rs} = \frac{[(m+1)r - ms]^2 - 1}{4m(m+1)} \quad , \quad 1 \leq r \leq m-1, 1 \leq s \leq r. \quad (\text{II.71})$$

i. ou éventuellement une extension qui contient l'algèbre de Virasoro comme sous-algèbre, s'il y a des symétries supplémentaires.

La plupart des modèles qui nous intéressent ici rentrent dans cette classification. Par exemple le modèle d'Ising correspond à $m = 3$ et possède donc une charge centrale $c = 1/2$. Les trois opérateurs primaires sont l'identité $\hat{1}$, l'aimantation $\hat{\sigma}$, et l'énergie $\hat{\epsilon}$. Nous discuterons aussi brièvement au chapitre III les modèles RSOS, qui réalisent toute la série des modèles minimaux unitaires. Ces modèles ont la particularité importante que tous les états de la représentation ne sont pas linéairement indépendants. Par exemple pour le modèle d'Ising on a

$$L_{-2}|\sigma\rangle = \frac{4}{3}L_{-1}^2|\sigma\rangle, \quad (\text{II.72})$$

relation qui se traduit en une équation différentielle sur les fonctions de corrélation d'aimantation. Ce type de relation permet ainsi d'aller plus loin que l'identité de Ward ne le permettait. De manière générale il est en principe possible de calculer toutes les fonctions de corrélation des modèles minimaux. Notons finalement que $c = 1$ est un cas limite de l'équation (II.70), mais la théorie correspondante, bien qu'unitaire, n'est pas un modèle minimal.

c Retour sur la matrice de transfert et les dimères

Il est possible de faire le lien entre ce formalisme algébrique et des quantités que l'on peut évaluer sur le réseau comme la matrice de transfert[13]. Pour les dimères sur réseau carré et en utilisant l'équation (II.41), le Hamiltonien est donné par

$$H = -\ln \mathcal{T} = \sum_k \epsilon(k) d_k^\dagger d_k, \quad \epsilon(k) = -\ln \lambda(k), \quad (\text{II.73})$$

et l'énergie du fondamental du Hamiltonien est

$$E_0 = - \sum_{|k| < k_F} \epsilon(k), \quad k_F = \pi/2. \quad (\text{II.74})$$

A priori la théorie conforme décrit les excitations de basse énergie du système, à la limite continue. Pour un système de fermions ces excitations sont proches du niveau de Fermi $k_F = \pi/2$. Le lien avec le réseau se fait via des corrections sous-dominantes à E_0 , qui ne sont sensibles qu'au voisinage du niveau de Fermi. Ces termes peuvent être évalués en utilisant la formule d'Euler-Maclaurin. On obtient pour $L \rightarrow \infty$

$$E_0 = aL - \frac{\pi}{6L} + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (\text{II.75})$$

Par identification du terme en $1/L$ avec l'équation (II.69), on a $v_F c = 1$. Ici la vitesse de Fermi peut explicitement se calculer à partir de la relation de dispersion

$$v_F = \left. \frac{d\epsilon}{dk} \right|_{k=k_F} = 1, \quad (\text{II.76})$$

et l'on retrouve bien $c = 1$. Il est possible d'identifier les descendants à partir du spectre de la matrice de transfert. Par exemple, le premier état excité, toujours à nombre de fermions fixé, s'obtient en faisant passer le fermion le plus proche de $\pi/2$ juste au dessus du niveau de Fermi

de $k = \pi/2 - \pi/L$ à $k = \pi/2 + \pi/L$. Il est deux fois dégénéré car on peut procéder de même autour de $k = -\pi/2$. On procède ainsi de suite pour générer tous les états excités. On peut alors vérifier que l'énergie du n -ième état excité aura pour correction

$$E_n - E_0 = \frac{2\pi p_n}{L} + \mathcal{O}(1/L^2), \quad (\text{II.77})$$

avec p_n entier, ce qui est compatible avec le spectre de (II.69). Il est aussi possible d'identifier les opérateurs présents dans la théorie[13]. Par exemple si l'on s'intéresse à des excitations qui enlèvent un fermion, on trouve pour le fondamental du secteur à $n = L/2 - 1$ fermions :

$$E_0^{(1)} - E_0 = \frac{\pi}{2L} + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (\text{II.78})$$

L'opérateur correspondant a pour dimension $\Delta = 1/4$, ce qui nous donne l'exposant $X = \Delta + \bar{\Delta} = 1/2$. La suppression d'un fermion correspond à l'insertion d'un monomère, et ce résultat est cohérent avec le comportement asymptotique (II.28).

II.4 Théorie conforme avec bord

En général les systèmes que l'on étudie ont des bords, et il est naturel de se demander quelle pourrait-être l'influence de ces derniers. Ce sujet – développé sous l'impulsion de Cardy[19, 20, 21] – a de nombreuses applications en physique statistique, en matière condensée^j et même en théorie des cordes.

La question qui nous intéresse est de savoir comment l'effet des bords peut s'insérer dans le formalisme que nous avons décrit précédemment. La géométrie la plus simple avec bord est celle du demi-plan complexe supérieur $\mathbb{H} = \{z, \text{Im } z > 0\}$. Le calcul des fonctions de corrélation dans $\mathbb{H}$ est quelque peu différent : pour calculer une fonction à n points il faut introduire l'image miroir par rapport à l'axe réel de chacun des points[14]. Une corrélation à n points dans $\mathbb{H}$, fonction des $z_1, \dots, z_n, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_n$, peut alors être vue comme une corrélation à $2n$ points dans $\mathbb{C}$. Celle-ci sera fonction des $z_1, \dots, z_{2n}$, où l'on aura procédé aux identifications $z_{i+n} = z_i^*$. Pour respecter la symétrie conforme, les flux d'énergie et d'impulsion au travers de l'axe réel sont interdits. Les composantes non-diagonales T_{xy} et T_{yx} du tenseur énergie-impulsion doivent donc être nulles. En coordonnées complexes ceci implique

$$T = \bar{T} \quad , \quad \text{Im } z = 0. \quad (\text{II.79})$$

On suppose en général qu'une condition au bord uniforme sur le réseau renormalise vers une telle condition au bord conforme. Nous allons cependant voir que la condition (II.79) n'est pas suffisamment forte pour parvenir à une description satisfaisante.

j. On peut penser par exemple à des problèmes d'impuretés quantiques comme l'effet Kondo, ou bien de transport dans des fils quantiques.

II.4.1 Théorie sur une bande

Il est possible de trouver une transformation conforme de $\mathbb{H}$ vers tout ouvert Ω non vide simplement connexe de $\mathbb{C}$, qui n'est pas $\mathbb{C}$ lui même. Ceci nous permet d'étudier toutes ces géométries. On peut par exemple s'intéresser à un modèle statistique sur une bande infinie (ou un système quantique $1d$ avec des conditions aux bords ouvertes), comme montré à la figure II.5.

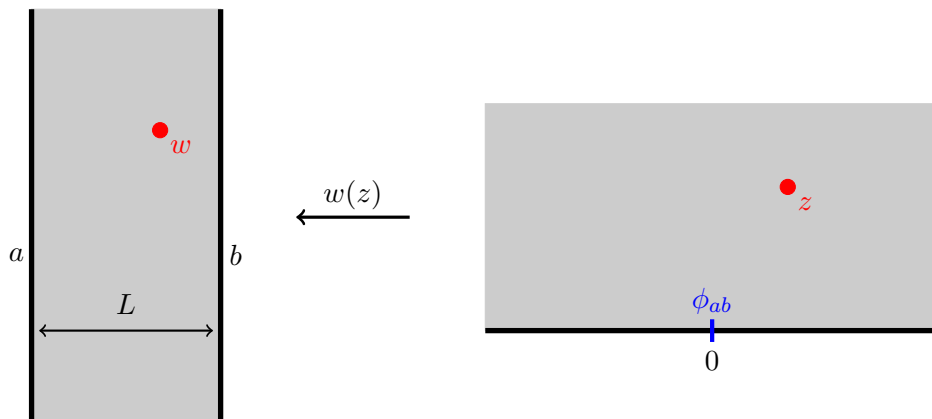


FIGURE II.5 – *A gauche* : géométrie de la bande infinie avec condition a au bord gauche, et b au bord de droite. *A droite* : demi-plan supérieur $\mathbb{H}$. La transformation conforme qui envoie $\mathbb{H}$ sur la bande infinie est donnée par l'équation (II.80). Pour tenir compte du passage de la condition a à la condition b , il faut insérer deux opérateurs de changement de condition au bord (bcc) ϕ_{ab} en $z = 0$ et ϕ_{ba} en $z \sim \infty$.

La transformation conforme qui envoie $\mathbb{H}$ sur la géométrie qui nous intéresse est donnée par

$$w(z) = \frac{iL}{\pi} \ln z, \quad (\text{II.80})$$

et permet de ramener le calcul de fonctions de corrélation au demi-plan. Cependant, il nous faut tenir compte du fait que la condition au bord n'est pas la même à gauche et à droite. Il est tentant de supposer que les effets de ce changement seront localisés près des points où la condition au bord change^k. Notons $\mathcal{Z}_{ab}$ la fonction de partition sur la bande infinie avec conditions aux bords a, b (figure II.5) et $\mathcal{Z}_{aa}$ la fonction de partition avec la même condition au bord des deux côtés. On interprète alors le ratio $\mathcal{Z}_{ab}/\mathcal{Z}_{aa}$ comme une fonction de corrélation d'opérateurs dits de *changement de condition au bord* (bcc) :

$$\frac{\mathcal{Z}_{ab}}{\mathcal{Z}_{aa}} = \langle \phi_{ab}(w_1) \phi_{ba}(w_2) \rangle, \quad (\text{II.81})$$

k. L'argument est plus naturel si l'on prend l'exemple d'une géométrie rectangulaire, avec des conditions aux bords différentes sur chacun des 4 côtés. On suppose alors que l'effet de ces changements sera localisé près des coins du rectangle.

où $w_1 \sim -i\infty$ et $w_2 \sim i\infty$. Ce résultat est particulièrement utile car on peut montrer que ces opérateurs s'identifient aux opérateurs primaires de la théorie, et le calcul des fonctions de corrélations s'effectue en passant au demi-plan supérieur. Dans cette géométrie, les deux opérateurs se situent en $z = 0$ et $z \sim \infty$.

De manière similaire au cylindre, on peut aussi déterminer le Hamiltonien sur la bande infinie

$$H = \frac{\pi}{L} \left(L_0 - \frac{c}{24} \right). \quad (\text{II.82})$$

Contrairement au cas du cylindre, $\bar{L}_0$ n'intervient pas et il n'y a qu'une seule algèbre de Virasoro. Ceci signifie que pour une chaîne de spins critique ouverte, l'énergie du fondamental va se comporter comme

$$E_0(L) = aL + b - \frac{\pi v_F c}{24L} + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (\text{II.83})$$

II.4.2 Classification des conditions aux bords invariantes conformes

On aimerait classer les différentes conditions aux bords permises à la limite continue, et savoir comment les états correspondants peuvent s'exprimer en fonction des états de la théorie dans le volume ($|\phi_\alpha\rangle, L_{-1}|\phi_\alpha\rangle, \dots$). Du point de vue de la quantification radiale, la condition d'invariance conforme au bord se traduit sur l'état de bord $|b\rangle$ par la contrainte

$$L_n|b\rangle = \bar{L}_{-n}|b\rangle. \quad (\text{II.84})$$

Un état qui satisfait une telle contrainte est appelé *état d'Ishibashi*. La condition $T = \bar{T}$ n'est pas une contrainte suffisamment forte pour classifier efficacement les conditions aux bords. Considérons pour ce faire un anneau (figure II.6) dont les conditions aux bords gauche et droit ($|a\rangle$ et $|b\rangle$) ne sont pas nécessairement les mêmes.

L'anneau a pour épaisseur ℓ et circonférence L . La fonction de partition est donnée par une trace

$$\mathcal{Z}_{ab} = \text{Tr} e^{-LH_{ab}}, \quad (\text{II.85})$$

où le Hamiltonien a les conditions aux bords a et b et agit dans la direction périodique correspondant à L . Il est aussi possible de quantifier dans l'autre sens, et la fonction de partition devient

$$\mathcal{Z}_{ab} = \langle a | e^{-\ell H_{\text{per}}} | b \rangle, \quad (\text{II.86})$$

où le H_{per} est cette fois-ci le Hamiltonien du système périodique (II.69). Les états de bord $|a\rangle$ et $|b\rangle$ doivent satisfaire la condition d'invariance conforme et sont donc des combinaisons linéaires d'états d'Ishibashi. L'égalité des équations (II.85) et (II.86) impose des contraintes supplémentaires, les contraintes de Cardy, qui permettent de résoudre notre problème. Le résultat final est le suivant : si la théorie est diagonale, il y a bijection entre les conditions aux bords invariantes conformes et les opérateurs primaires de la théorie. Ceux-ci sont aussi identifiés avec les opérateurs bcc. Par exemple pour le modèle d'Ising il y a trois opérateurs primaires : l'identité,

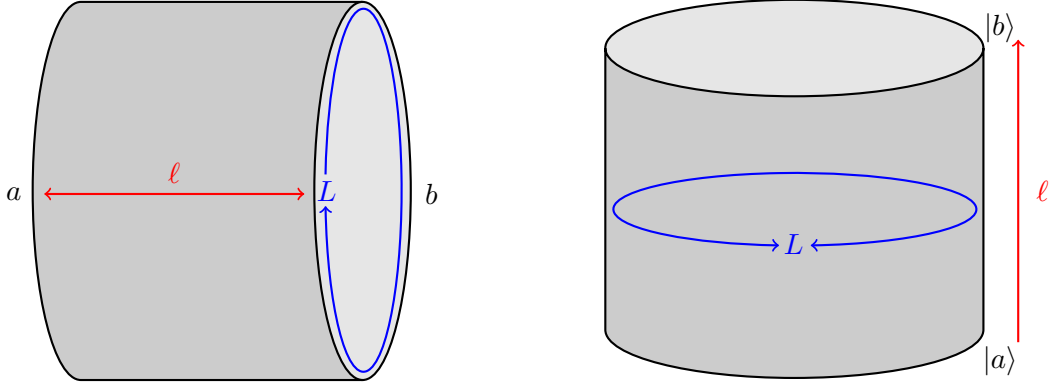


FIGURE II.6 – Deux manières de quantifier la théorie sur un anneau. *A gauche* : Quantification dans la direction fermée L . La fonction de partition, donnée par l'équation (II.85), s'exprime comme une trace. *A droite* : Quantification dans la direction ouverte ℓ . La fonction de partition est alors donnée par l'équation (II.86). Pour que la théorie soit cohérente, on demande que les deux fonctions de partition soient égales.

l'aimantation σ et l'énergie ϵ . Les trois conditions permises correspondent à $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|\text{libre}\rangle$ et s'expriment en fonction des états de plus bas poids comme[20]

$$|\uparrow\rangle = 2^{-1/2}|0\rangle + 2^{-1/4}|\sigma\rangle + 2^{-1/2}|\epsilon\rangle \quad (\text{II.87})$$

$$|\downarrow\rangle = 2^{-1/2}|0\rangle - 2^{-1/4}|\sigma\rangle + 2^{-1/2}|\epsilon\rangle \quad (\text{II.88})$$

$$|\text{libre}\rangle = |0\rangle - |\sigma\rangle \quad (\text{II.89})$$

II.4.3 Facteurs g universels d'Affleck et Ludwig

La fonction de partition de l'anneau se simplifie grandement lorsque l'épaisseur ℓ tend vers l'infini :

$$\mathcal{Z}_{ab}(\ell \rightarrow \infty, L) \sim e^{-\ell E_0(L)} \langle a|0\rangle \langle 0|b\rangle. \quad (\text{II.90})$$

$g_a = \langle a|0\rangle$ et $g_b = \langle 0|b\rangle$ sont universels, et appelés « facteurs g ». Ils ont été introduits par Affleck et Ludwig[22]. Par exemple pour le modèle d'Ising, et en utilisant les expressions (II.87), (II.88), (II.89) on trouve $g_{\text{libre}} = 1$ et $g_{\text{fixe}} = g_{\uparrow} = g_{\downarrow} = 2^{-1/2}$.

Ces quantités peuvent être évaluées sur le réseau, en projetant un état uniforme sur le fondamental $|\psi\rangle$ de la matrice de transfert d'un cylindre de circonférence finie L . Pour le modèle d'Ising, on peut évaluer g_{fixe} en prenant l'état uniforme $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ dans la base des spins. On peut alors vérifier que le produit scalaire admet le développement asymptotique

$$-\ln(\langle \uparrow\uparrow \dots \uparrow | \psi \rangle) = aL - \ln g_{\text{fixe}} + \mathcal{O}(1/L). \quad (\text{II.91})$$

a est un coefficient non-universel d'énergie libre linéique. Encore une fois, le lien entre les quantités que l'on peut calculer sur réseau et la théorie conforme sous-jacente se fait via les termes sous-dominants. Nous reviendrons sur cette méthode de mesure des facteurs g au chapitre III.

II.5 Exemples d'application : intrication dans des chaînes de spins

Nous allons présenter ici deux applications des théories conformes à des problèmes d'intrication dans des chaînes de spin critiques unidimensionnelles. La première sera une application assez directe des théories conformes avec bord, la deuxième un peu plus élaborée.

II.5.1 Une mesure géométrique de l'intrication

Définition L'entropie d'intrication n'est pas la seule quantité à même de mesurer l'intrication. Une autre mesure valable, que nous nommerons *intrication géométrique* (« geometric entanglement » en anglais) et noterons GE, est définie comme suit. Partons comme toujours d'une fonction d'onde $|\psi\rangle$ pour un modèle quantique sur un réseau possédant N sites. On introduit alors

$$\Lambda_{\max} = \max_{|\phi\rangle} |\langle\phi|\psi\rangle|. \quad (\text{II.92})$$

La maximisation porte uniquement sur des états produits à un site

$$|\phi\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\phi_j\rangle. \quad (\text{II.93})$$

Intuitivement plus $\Lambda_{\max}$ est grand, plus la fonction d'onde $|\psi\rangle$ est proche d'un état produit, et moins la fonction d'onde est intriquée. L'intrication géométrique $E(|\psi\rangle)$ est alors définie sous forme logarithmique

$$E(|\psi\rangle) = -\log_2 \Lambda_{\max}^2. \quad (\text{II.94})$$

On a utilisé le logarithme en base 2. Cette quantité mesure la distance entre la fonction d'onde et l'espace des fonctions d'onde produit (qui ne sont pas intriquées). Cette mesure multipartie a été étudiée dans divers contextes comme le calcul quantique, ou celui de la matière condensée. Notons que N n'a pas nécessairement besoin d'être le nombre de sites total, même si c'est le cas qui va nous intéresser exclusivement par la suite.

Chaînes critiques périodiques I : XXZ. Il est légitime de se demander comment va se comporter le GE d'une chaîne critique. Commençons par nous intéresser à la chaîne de Heisenberg anisotrope XXZ

$$H = - \sum_{j=1}^L \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right). \quad (\text{II.95})$$

La région critique correspond à $|\Delta| < 1$ et la charge centrale vaut $c = 1$. Nous reviendrons sur cela au chapitre III. Il nous faut alors déterminer l'état produit tensoriel qui maximise le produit scalaire avec la fonction d'onde. Une telle procédure doit être effectuée en général numériquement. L'état recherché est connu si $|\psi\rangle$ est le fondamental de la chaîne[23] :

$$|\phi_{\max}\rangle = |\rightarrow\rightarrow\ldots\rightarrow\rangle = \frac{1}{2^{L/2}} \sum_{\{\sigma_j^z=\pm 1\}} |\sigma_1^z, \sigma_2^z, \dots, \sigma_L^z\rangle \quad (\text{II.96})$$

$$= |\text{free}\rangle_z \quad (\text{II.97})$$

Le GE est donc donné par

$$E(|\psi\rangle) = -\log_2 |z\langle \text{free}|\psi\rangle|^2. \quad (\text{II.98})$$

On reconnaît immédiatement le lien avec les facteurs g d’Affleck et Ludwig. Le GE va suivre la loi d’échelle

$$E(|\psi\rangle) = aL - \log_2 \langle N|0\rangle^2 = aL - 2\log_2 g_N. \quad (\text{II.99})$$

a ne nous intéresse pas. L’état de bord qui encode la condition libre est Neuman (N) pour le champ libre. Le facteur g_N correspondant est bien connu [24], et dépend du paramètre d’anisotropie Δ . Nous avons vérifié que cette valeur est en très bon accord avec des calculs numériques précédents[23]. Voir plus de détails dans l’article {3}.

Chaînes critiques périodiques II : Ising. On peut appliquer la même démarche dans une chaîne de spin plus simple, la chaîne d’Ising en champ transverse critique

$$H = -\sum_{j=1}^L \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=1}^L \sigma_j^z. \quad (\text{II.100})$$

L’état qui maximise le produit scalaire avec le fondamental est un état penché[25]

$$|\phi_{\max}\rangle = \bigotimes_{j=1}^L [\cos(\xi/2)|\uparrow_j\rangle_z + \sin(\xi/2)|\downarrow_j\rangle_z]. \quad (\text{II.101})$$

$\xi \neq 0$ et peut même être calculée exactement. Commençons par remarquer que la base naturelle (pour le modèle statistique 2d sous-jacent) est la base des états propres des σ_j^x . Il n’y a aussi que deux états de bord dans le modèle d’Ising |libre> et |fixe>, définis à la limite continue en partant de la base des états propres des σ_j^x . En utilisant ce dictionnaire, l’état de bord (instable) |libre> correspond à $\xi = 0$. Une condition au bord $|\xi \neq 0\rangle$ sur le réseau va flotter vers le seul point fixe stable, à savoir |fixe>. Le facteur g correspondant a été calculé par Cardy[20], $g_{\text{fixe}} = 2^{-1/2}$. Le GE va donc se comporter comme

$$E(|\psi\rangle) = aL - 2\log_2 (g_{\text{fixe}}) = aL + 1. \quad (\text{II.102})$$

La constante sous-dominante vaut donc 1. On peut d’ailleurs la calculer exactement à partir du réseau{3}. D’une certaine manière la relation entre le GE et les facteurs g est quelque peu décevante. En effet la complexité du GE tient pour beaucoup à l’état produit tensoriel sur lequel il faut optimiser le produit scalaire, et la conclusion principale de notre étude est que la valeur précise de cet angle n’a aucune importance !

Quelques extensions possibles La relation que nous avons mise en évidence peut aussi être étendue à d’autres situations, en utilisant des résultats connus de théorie conforme. Discutons les brièvement :

- Pour une théorie conforme plus sophistiquée, la contribution sous-dominante au GE sera toujours donnée par un facteur g associé à une certaine condition au bord invariante conforme. Il faudra cependant déterminer vers laquelle flotte l’état optimisé $|\phi\rangle$. Il serait intéressant de voir si c’est l’état de bord le plus stable, avec le plus petit facteur g , ou bien un autre.

- On peut aussi s'intéresser à des cas où $|\psi\rangle$ est un des états excités de la chaîne ($|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, ...), sur l'exemple d'Ising. Ceux-ci sont construits à partir des champs primaires identités (correspondant au fondamental $|0\rangle$), aimantation ($|\sigma\rangle$) et énergie ($|\epsilon\rangle$), ainsi que leurs descendants. L'état de Cardy $|\text{fixe}\rangle$ est [20]

$$|\text{fixe}\rangle = 2^{-1/2}|0\rangle + 2^{-1/4}|\sigma\rangle \pm 2^{-1/2}|\epsilon\rangle. \quad (\text{II.103})$$

On en déduit $\langle \text{fixe}|1\rangle = \langle \text{fixe}|\sigma\rangle = 2^{-1/4}$ et $\langle \text{fixe}|2\rangle = \langle \text{fixe}|\epsilon\rangle = 2^{-1/2}$.

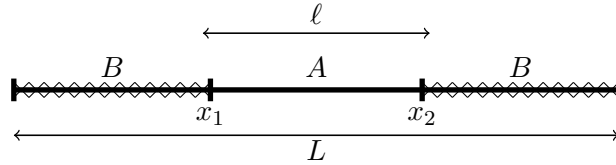
- Il est aussi possible d'explorer les chaînes ouvertes. Dans ce cas l'état $|\phi\rangle$ va renormaliser vers un état de bord $|b\rangle$. Si l'on impose cette même condition de bord aux deux extrémités de la chaîne, on s'attend à ce que le GE du k -ième état excité se comporte comme

$$E(|\psi\rangle) = E(|k\rangle) = aL - \frac{c}{4} \ln L - 2 \log_2 \langle b|k\rangle + \text{cste} + o(1). \quad (\text{II.104})$$

Le terme $-\frac{c}{4} \ln L$ est une conséquence de la présence de 2 coins d'angles $\pi/2$, et se calcule à l'aide de la formule de Cardy-Peschel. La compréhension des termes $\langle b|k\rangle$ nécessite une analyse plus poussée [26].

II.5.2 Entropie d'intrication

Nous allons montrer ici comment appliquer les techniques de théories conformes à l'étude de l'entropie d'intrication, en suivant [27, 28, 29]. L'objectif est de montrer sur un cas particulier comment comprendre analytiquement la divergence logarithmique de l'entropie au point critique. Bien que relativement récent, ce sujet fait déjà l'objet d'une vaste littérature. Voir [30] pour une présentation plus complète. L'exemple canonique d'un système qui peut être traité par de telles méthodes est celui d'une chaîne de spins critique coupée en deux :



Intéressons nous par exemple à l'entropie d'une partie A de la chaîne, de longueur ℓ . Afin de mener à bien le calcul, il est commode d'introduire l'entropie de Rényi, définie pour $n \in \mathbb{R}_+$:

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln (\text{Tr } \rho_A^n) \quad , \quad \rho_A = \text{Tr}_B \rho. \quad (\text{II.105})$$

On a supposé que le système est dans un état pur $|\psi\rangle$, et l'opérateur densité est alors $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. L'entropie de von Neumann en est la limite $n \rightarrow 1$.

Répliques Il est en général très difficile d'évaluer $\text{Tr } \rho_A^n$ pour n quelconque. Quand n est un entier les choses sont plus simples, et nous allons voir que $\text{Tr } \rho_A^n$ peut s'interpréter en termes d'une fonction de partition sur une surface de Riemann à n feuillets. Il s'avère alors possible de mener le calcul jusqu'à son terme. C'est l'idée de la *méthode des répliques* : l'on se restreint

à n entier et l'on espère que la formule obtenue à la fin est valable pour tout $n \in \mathbb{C}$. Il n'est pas du tout évident qu'une telle méthode va donner le prolongement analytique correct, et nous verrons d'ailleurs des contre-exemples au chapitre III. Cette approche s'est cependant avérée très puissante dans le contexte des systèmes unidimensionnels.

Limite continue et surface de Riemann Sur le réseau, les éléments de matrice de ρ sont les ρ_{ij} où i et j libellent les différentes configurations du système, auxquelles sont associées les éléments de base $|i\rangle$ et $|j\rangle$. A la limite continue i et j sont promus en des configurations de champs

$$i \longrightarrow \phi(x) \quad , \quad |i\rangle \longrightarrow |\phi(x)\rangle. \quad (\text{II.106})$$

Ceci nous permet d'écrire la matrice densité en termes d'intégrale de chemin. Pour un système dans un état thermique à température inverse β , on a ainsi

$$\rho_{ij} \longrightarrow \rho[\phi(x), \phi'(x)] = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \int_{\Phi(x,0)=\phi(x)}^{\Phi(x,\beta)=\phi'(x)} [\mathcal{D}\Phi] \exp \left\{ - \int_0^\beta \mathcal{L} d\tau \right\}. \quad (\text{II.107})$$

La constante de normalisation est simplement la fonction de partition, et assure $\text{Tr } \rho = 1$:

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [\mathcal{D}\phi(x)] \int_{\Phi(x,0)=\phi(x)}^{\Phi(x,\beta)=\phi(x)} [\mathcal{D}\Phi] \exp \left\{ - \int_0^\beta \mathcal{L} d\tau \right\}. \quad (\text{II.108})$$

$\mathcal{Z}$ et ρ peuvent être interprétés géométriquement, comme montré à la figure II.7 (a) et (b). $\rho(\phi, \phi')$ est représentée par un rectangle de largeur L et de hauteur β , où l'on a imposé les conditions $\phi(x)$ en bas ($\tau = 0$), et $\phi'(x)$ en haut ($\tau = \beta$). $\mathcal{Z}(\beta)$ s'obtient à partir de $\rho(\phi, \phi')$ en collant les deux extrémités à $\tau = 0^+$ et $\tau = \beta^-$, et en intégrant sur ϕ . Cette fonction de partition est donc un cylindre de circonférence β et de taille L . Dans ce formalisme, il est aisé de construire la matrice densité réduite au système A , en collant les extrémités correspondant à B , mais pas celles correspondant à A . Voir la figure II.7 (c), où les degrés de liberté sur lesquels on n'a pas encore tracé sont représentés par des traits bleus épais.

Les puissances entières de la matrice densité réduite peuvent aussi être obtenues :

$$\text{Tr } \rho_A^n = \frac{\mathcal{Z}^{(n)}}{\mathcal{Z}^n}. \quad (\text{II.109})$$

$\mathcal{Z}^{(n)}$ est la fonction de partition de n cylindres, où l'on a identifié les configurations de champs le long des coupures. Si l'on nomme Φ_j le champ vivant sur le cylindre j , $j = 1, \dots, n$, l'on doit procéder aux identifications suivantes

$$\Phi_j(x, \tau = \beta^-) = \Phi_{j+1}(x, \tau = 0^+) \quad , \quad j = 1, \dots, n \quad (\text{II.110})$$

$$\Phi_{n+1} = \Phi_1 \quad (\text{II.111})$$

$\mathcal{Z}^{(n)}$ est ainsi la fonction de partition d'une théorie conforme vivant sur une surface de Riemann à n feuilletés.

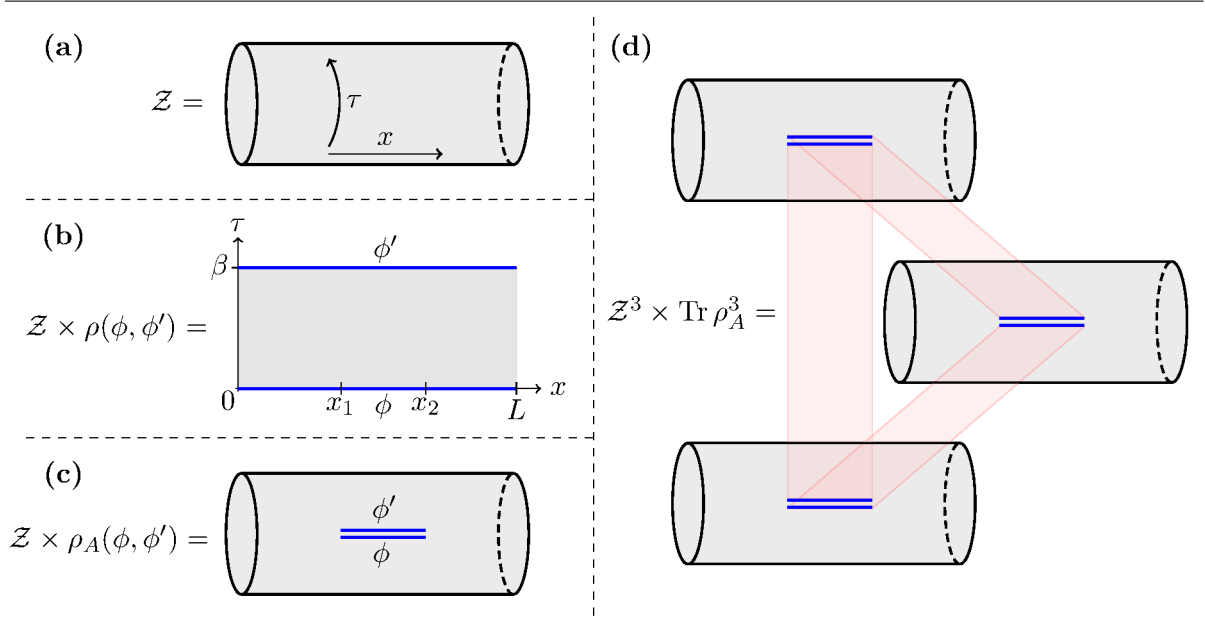


FIGURE II.7 – Représentation de diverses quantités utiles au calcul de l’entropie d’intrication. *A gauche* : **(a)** Fonction de partition $\mathcal{Z}(\beta)$ (équation (II.108)). Les champs en $\tau = 0$ et $\tau = \beta$ sont identifiés, et l’on obtient la géométrie d’un cylindre. **(b)** Matrice densité ρ . Les « indices » ϕ et ϕ' de la matrice sont représentés par des lignes bleues épaisses. **(c)** Matrice densité réduite : les points qui sont dans B sont recollés, mais pas les autres. *A droite* : **(d)** Fonction de partition $\mathcal{Z}^{(n)} = \mathcal{Z}^n \times \text{Tr } \rho_A^n$ sur une surface de Riemann à n feuillets, sur l’exemple $n = 3$. Les cylindres sont recollés les uns sur les autres au niveau de leurs coupures (bleues) et de manière cyclique.

Loi d’échelle et singularité conique : En termes d’énergie libre $F^{(n)} = -\ln \mathcal{Z}^{(n)}$, on attend le comportement d’échelle suivant

$$F^{(n)} = n f_S \times \mathcal{S} + n f_L \times \mathcal{L} + \dots \quad (\text{II.112})$$

f_S est l’énergie libre de surface et f_L l’énergie libre linéique d’un cylindre. Ces termes vont cependant être annihilés par le rapport (II.109). Des termes logarithmiques universels sont aussi possibles, en particulier quand la variété que l’on étudie possède une courbure singulière[15]. C’est le cas ici : il y a des singularités dites coniques aux points de branchement, et leurs contributions logarithmiques vont dominer l’entropie. Nous allons les calculer dans un cas simple, en faisant les hypothèses supplémentaires suivantes :

- Le système est à température nulle $\beta \rightarrow \infty$, si bien que le système est dans son fondamental.
- Le sous-système A , de taille $\ell = |x_2 - x_1|$ est plongé dans une chaîne infinie ($L \rightarrow \infty$). Étant donné que le système est infini à gauche de x_1 et à droite de x_2 , on peut poser sans perte de généralité $x_1 = 0$ et $x_2 = \ell$.

La contribution universelle à l’énergie libre $F_n = -\ln \mathcal{Z}^{(n)}$ peut se calculer comme suit[15]. Considérons un point $0 < x_0 < \ell$ et la transformation infinitésimale $x \mapsto x + \delta\ell$ pour $x > x_0$, et

l'identité pour $x < x_0$. Une telle transformation change la longueur ℓ de chacune des n coupures en $\ell + \delta\ell$. La variation d'énergie libre peut s'exprimer à l'aide du tenseur énergie-impulsion :

$$\delta F_n = \frac{n\delta\ell}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle T_{xx}(x_0, \tau) \rangle d\tau. \quad (\text{II.113})$$

Passons maintenant en variables complexes $w = x + i\tau$. En écrivant $T_{xx} = T(w) + \bar{T}(\bar{w})$, la valeur moyenne du tenseur énergie-impulsion se calcule en envoyant notre surface à n feuillets sur le plan complexe. Si l'on note $z(w)$ une telle transformation, alors

$$\langle T(w) \rangle = \left(\frac{dz}{dw} \right)^2 \langle T(z) \rangle + \frac{c}{12} \{z(w), w\}. \quad (\text{II.114})$$

La variation d'énergie libre est donnée par

$$\frac{\delta F_n}{\delta\ell} = -\frac{\delta \ln Z^{(n)}}{\delta\ell} = \frac{n}{i\pi} \int_{-i\infty+x_0}^{i\infty+x_0} \langle T(w) \rangle dw. \quad (\text{II.115})$$

Dans $\mathbb{C}$ l'invariance par translation et rotation impose $\langle T(z) \rangle = 0$. Reste à trouver une transformation conforme appropriée. La transformation $\zeta(w) = w/(w - \ell)$ envoie les points de branchements en 0 et ℓ sur 0 et $-\infty$. La surface de Riemann correspondante peut être envoyée sur le plan complexe comme suit : $z(\zeta) = \zeta^{1/n}$. On obtient

$$z(w) = \left(\frac{w}{w - \ell} \right)^{1/n}, \quad (\text{II.116})$$

et en calculant la dérivée schwarzienne la valeur moyenne du tenseur énergie-impulsion devient alors

$$\langle T(w) \rangle = \frac{c}{24} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) \frac{\ell^2}{w^2(w - \ell)^2} \quad (\text{II.117})$$

L'intégrale (II.115) se calcule alors comme un résidu en $w = 0$ (ou bien $w = \ell$) :

$$\frac{\delta F_n}{\delta\ell} = \frac{c}{6\ell} \left(n - \frac{1}{n} \right). \quad (\text{II.118})$$

On en déduit finalement la prédiction pour l'entropie de Rényi

$$S_n = \frac{c}{6} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \ln \ell + \text{cste} + o(1). \quad (\text{II.119})$$

Une telle formule peut d'ailleurs être prouvée dans certaines chaînes de spin simples[31, 32, 33], et a été vérifiée numériquement avec une grande précision dans d'autres plus compliquées. Ce résultat peut aussi être vu sous un autre angle. L'expression que nous avons obtenue pour $\langle T(w) \rangle$ sur la surface de Riemann ressemble en tous points à un corrélateur de deux champs primaires $\chi_n(0)$ et $\tilde{\chi}_n(\ell)$ dans le plan

$$\langle T(w) \rangle = \frac{\langle T(w) \chi_n(0) \tilde{\chi}_n(\ell) \rangle_{\mathbb{C}}}{\langle \chi_n(0) \tilde{\chi}_n(\ell) \rangle_{\mathbb{C}}}, \quad (\text{II.120})$$

dont les dimensions d'échelles, identiques, sont données par

$$x_n = \frac{c}{12} \left(1 - \frac{1}{n^2} \right). \quad (\text{II.121})$$

$\text{Tr} \rho_A^n$ se comporte donc exactement comme la fonction à deux points d'un opérateur, dont la dimension d'échelle est x_n . L'opérateur correspondant permet de réaliser l'identification (II.110), et est appelé opérateur de *twist*. Cette interprétation est souvent plus utile que le raisonnement présenté ici en pratique. Terminons cette étude par quelques remarques :

- La divergence logarithmique de l'entropie n'apparaît qu'au point critique. Pour un système possédant une certaine longueur de corrélation ξ , l'entropie en général sature à une valeur $S_n \sim \ln \xi$. Cette divergence est donc la signature d'un point critique quantique.
- Nous avons juste utilisé l'invariance conforme globale pour ce calcul. Le terme dominant ne dépend donc *que* de la charge centrale¹, et l'entropie est donc un moyen pratique afin de « mesurer » numériquement celle-ci.
- Certains aspects de ce calcul peuvent aisément être généralisés. On peut par exemple utiliser l'approche expliquée ci-dessus pour étudier des systèmes de taille finie, ou bien des système à température finie $\beta^{-1} \neq 0$.
- L'on peut aussi s'intéresser au cas où A est scindé en plusieurs intervalles disjoints. Par exemple pour A composé de deux intervalles disjoints $A = A_1 \cup A_2$, le comportement de l'entropie fait intervenir les détails fins de la théorie sous-jacente. Voir [34, 35, 36] pour de plus amples détails.

1. Contrairement, par exemple à la méthode des lois d'échelle sur l'énergie, qui nécessite la connaissance préalable de la vitesse de Fermi v_F .

Bibliographie

- [1] Kasteleyn P. W, *Dimer Statistics and Phase Transitions*, 1963 J. Math. Phys **4** 287
- [2] Fisher M. E, *On the Dimer Solution of Planar Ising Models*, 1966 J. Math. Phys **7** 1776
- [3] Kasteleyn P. W *The statistics of dimers on a lattice. I. The number of dimer arrangements on a quadratic lattice*, 1961 Physica **27** 1209
- [4] Temperley H. N. V and Fisher M. E, *Dimer problem in statistical mechanics-an exact result*, 1961 Philos **6** 68
- [5] McCoy B and Wu T. T, *The Two-Dimensional Ising Model* Harvard University Press (1973)
- [6] Fisher M. E and Stephenson J, *Statistical Mechanics of Dimers on a Plane Lattice. II. Dimer Correlations and Monomers*, 1963 Phys. Rev **132** 1411
- [7] Trouselet F, Pujol P, Alet F and Poilblanc D, *Criticality of a classical dimer model on the triangular lattice*, 2007 Phys. Rev. E **76** 041125
- [8] Trouselet F, *Modeles de dimeres classiques et quantiques pour des systemes d'electrons correles bidimensionnels* These (2009)
- [9] Henley C. L, *Relaxation time for a dimer covering with height representation*, 1997 J. Stat. Phys **89** 483
- [10] Kenyon R, *Conformal invariance of domino tiling*, 2000 Ann. Probab. **28** 759
- [11] Kenyon, R, *Dominos and the Gaussian Free Field*, 2001 Ann. Probab. **29** 1128
- [12] Fradkin E, Huse D, Moessner R, Oganesyan V and Sondhi S. L, *Bipartite Rokhsar-Kivelson points and Cantor deconfinement*, 2004 Phys. Rev. B **69** 224415
- [13] Alet F, Ikhlef I, Jacobsen J. L, Misguich G and Pasquier V, *Classical dimers with aligning interactions on the square lattice*, 2006 Phys. Rev. E **74** 041124
- [14] Cardy J, *Conformal Field Theory and Statistical Mechanics*, Les Houches Session LXXXIX (2008)
- [15] Di Francesco P, Mathieu P and Sénéchal D, *Conformal Field Theory*, Springer (1997)
- [16] Mussardo G, *Statistical Field Theory : An Introduction to Exactly Solved Models in Statistical Physics*, Oxford Graduate Texts (2009)
- [17] Blötte H. W, Cardy J. L and Nightingale M. P *Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality*, 1986 Phys. Rev. Lett **56** 742
- [18] Affleck I, *Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly*, 1986 Phys. Rev. Lett **56** 746

- [19] Cardy J, *Conformal invariance and surface critical behavior*, 1984 Nucl. Phys. B **240** 514
- [20] Cardy J. L, *Effect of boundary conditions on the operator content of two-dimensional conformally invariant theories*, 1986 Nucl. Phys. B **275** 200
- [21] Cardy J, *Boundary conditions, fusion rules and the Verlinde formula*, 1989 Nucl. Phys. B **324** 581
- [22] Affleck I and Ludwig A. W. W, *Universal noninteger ground-state degeneracy in critical quantum systems*, 1991 Phys. Rev. Lett **67** 161
- [23] Shi Q-Q, Orús R, Fjaerestad J. O and Zhou H-Q, *Finite-size geometric entanglement from tensor network algorithms*, 2010 New. Journ. Phys **12** 025008
- [24] Fendley P, Saleur H and Warner N, *Exact solution of a massless scalar field with a relevant boundary interaction*, 1994 Nucl. Phys. B **430** 577
- [25] Wei T-C and Goldbart P. M, *Geometric measure of entanglement and applications to bipartite and multipartite quantum states*, 2003 Phys. Rev. A **68** 042307
- [26] Bondesan R, Dubail J, Jacobsen J. L, Saleur H *Conformal boundary state for the rectangular geometry* arXiv :1110.6861 (2011)
- [27] Holzhey C, Larsen F, and Wilczek F, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, 1994 Nucl. Phys. B **424** 443
- [28] Vidal G, Latorre J, Rico E, and Kitaev A, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, 2003 Phys. Rev. Lett **90** 227902
- [29] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement entropy and conformal field theory*, 2004 J. Stat. Mech. P06002
- [30] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement entropy and conformal field theory*, 2009 J. Phys. A : Math. Theor **42** 504005
- [31] Jin B. Q and Korepin V. E, *Quantum Spin Chain, Toeplitz Determinants and the Fisher-Hartwig Conjecture*, 2004 J. Stat. Phys **116** 79
- [32] Its A. R, Jin B. Q and Korepin V. E, *Entanglement in the XY spin chain*, 2005 J. Phys. A : Math. Gen **38** 2975
- [33] Franchini F, Its A. R and Korepin V. E, *Renyi entropy of the XY spin chain*, 2008 J. Phys. A : Math. Theor **41** 025302
- [34] Furukawa S, Pasquier V and Shiraishi J, *Mutual Information and Boson Radius in a $c=1$ Critical System in One Dimension*, 2009 Phys. Rev. Lett **102** 170602
- [35] Caraglio M and Gliozzi F, *Entanglement entropy and twist fields*, 2008 JHEP **11** 076
- [36] Calabrese P, Cardy J and Tonni E, *Entanglement entropy of two disjoint intervals in conformal field theory*, 2009 J. Stat. Mech. P11001; Calabrese P, Cardy J and Tonni E, *Entanglement entropy of two disjoint intervals in conformal field theory : II*, 2011 J. Stat. Mech. P01021

CHAPITRE III

Intrication dans les fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson critiques

L'objectif de ce chapitre est d'étudier l'intrication de certaines fonctions d'onde bidimensionnelles critiques. Le cas unidimensionnel, objet de nombreuses publications, est maintenant relativement bien compris. Citons à nouveau le célèbre résultat de divergence logarithmique [1, 2, 3, 4]

$$S \sim \frac{c}{3} \ln L. \quad (\text{III.1})$$

Rappelons aussi qu'en dimension $d > 1$, l'entropie suit en général la loi d'échelle

$$S \sim aL^{d-1} + o(L^{d-1}). \quad (\text{III.2})$$

On s'attend à ce que l'étude d'un système bidimensionnel critique générique soit assez difficile, aussi bien du point de vue analytique que numérique :

- La théorie des champs décrivant notre système sera définie en $2 + 1 = 3$ dimensions. Il ne sera donc pas possible – a priori – d'utiliser les techniques puissantes de théories conformes en $1 + 1 = 2$ dimensions, qui permettent par exemple d'établir l'équation (III.1).
- En général, l'exponentielle de l'entropie est une bonne mesure de la difficulté qu'il y peut y avoir à simuler numériquement un système quantique sur un ordinateur *classique*. À deux dimensions on va avoir $e^S \sim e^{aL}$. Le calcul est donc exponentiel en la taille L du système. Le préfacteur a sera aussi plus grand que pour un système massif générique.

L'évaluation de l'entropie se fait en général en trois étapes, résumées à la figure III.1. Il faut d'abord diagonaliser le Hamiltonien afin de trouver la fonction d'onde qui nous intéresse. L'on forme ensuite la matrice densité réduite $\rho = \text{Tr}|\psi\rangle\langle\psi|$. Enfin, il reste à évaluer une deuxième trace, cette fois-ci sur la matrice densité réduite. Chacune de ces trois étapes (**I,II,III**) est exponentielle en la taille du système.

$$\mathcal{H} \xrightarrow{\text{I}} |\psi\rangle \xrightarrow{\text{II}} \rho_A = \text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| \xrightarrow{\text{III}} S = -\text{Tr}_A [\rho_A \ln \rho_A].$$

FIGURE III.1 – Comment calculer l'entropie d'intrication ?

Nous allons cependant voir que ce programme est réalisable pour une classe particulière de fonctions d'onde critiques bidimensionnelles, nommées d'après Rokhsar et Kivelson. Nous allons en particulier montrer que pour ces fonctions d'onde :

1. Il est possible de réaliser les étapes **I** et **II** de manière explicite. L'étape **III** restera exponentielle, mais nous parviendrons néanmoins à atteindre des tailles raisonnables.
2. Du point de vue de la théorie des champs, il sera malgré tout possible d'étudier un tel système par des méthodes de théorie conforme. Nous montrerons aussi que l'entropie encode de manière non triviale certaines propriétés universelles de la fonction d'onde.

Ce chapitre est organisé comme suit : nous commençons par présenter le modèle de Rokhsar et Kivelson (III.1), puis expliquons comment calculer l'entropie d'intrication pour de telles fonctions d'onde en III.2. Nous présentons ensuite les résultats en section III.3, et nous discutons enfin certaines généralisations (III.4).

III.1 Hamiltonien et fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson

III.1.1 Introduction

Nous allons ici introduire certains aspects du modèle de dimères quantique imaginé par Rokhsar et Kivelson[6]. Pour une description plus complète, on pourra consulter l'article de revue de Moessner et Raman [5], dont cette présentation est d'ailleurs fortement inspirée. Partons d'un modèle de dimères classiques sur réseau carré. Un espace de Hilbert est alors construit en associant à chaque configuration c de dimères un ket $|c\rangle$. Voir la figure III.2.

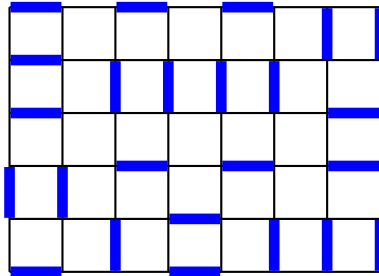


FIGURE III.2 – Une configuration de dimère c , à laquelle on associe un ket $|c\rangle$.

On demande aussi que deux configurations différentes correspondent à des états orthogonaux : $\langle c|c'\rangle = \delta_{c,c'}$. Il nous faut maintenant introduire une dynamique quantique. A cause de la contrainte de coeur dur, tous les mouvements locaux ne sont pas permis. Le plus simple autorisé sur réseau carré est le retournement des deux dimères sur une plaquette carrée élémentaire. Il est alors naturel d'écrire le Hamiltonien suivant :

$$H_{RK} = -t \sum_P \left(|\square\rangle\langle\square| + |\square\rangle\langle\square| \right) + v \sum_P \left(|\square\rangle\langle\square| + |\square\rangle\langle\square| \right) \quad (\text{III.3})$$

où les sommes portent sur toutes les plaquettes élémentaires carrées $P \equiv \square$ du réseau. On se restreint au cas $t > 0$, si bien que le seul paramètre pertinent du modèle est le rapport t/v . Le premier terme décrit une résonance entre deux différentes dimérisations de la plaquette, nous l'appellerons « terme cinétique ». Le second compte le nombre de plaquettes où les dimères sont parallèles, et peut-être vu comme un terme potentiel.

Ce modèle a été originellement introduit dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique. L'idée était de trouver une description simple de la physique des « liens de valence résonants » (Resonating valence bond – RVB – en anglais) qu'avait imaginé Anderson[7, 8, 9]. Dans ce langage, le dimère représente un singulet formé par les deux spins situés à ses extrémités :

$$|\text{—}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right) \quad (\text{III.4})$$

De manière générale, et bien qu'il n'offre probablement pas une bonne description de l'état parent supraconducteur, le modèle de dimères quantique peut être vu comme un point de départ simple dans l'étude des phases magnétiques dominées par des singulets locaux. Ce modèle est aussi construit de manière à posséder un point très particulier, que nous allons étudier ci-après.

III.1.2 Le point RK

Ce point se situe à $t/v = 1$. Il est intéressant car la fonction d'onde du fondamental peut s'écrire explicitement. Commençons par poser

$$|P\rangle = |\text{—}\rangle - |\text{—}\rangle \quad (\text{III.5})$$

Cet état peut être défini pour chacune des plaquettes P du réseau. À l'aide de $|P\rangle$, on peut réécrire H comme une somme de projecteurs

$$H = \sum_P |P\rangle\langle P|. \quad (\text{III.6})$$

Un tel Hamiltonien n'a donc que des états propres d'énergies non-négatives. Pour trouver le fondamental, il est suffisant d'exhiber un état propre d'énergie nulle. Posons pour ce faire

$$|RK\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_c |c\rangle, \quad (\text{III.7})$$

où la somme porte sur toutes les configurations c de dimère. Le préfacteur assure la normalisation. On a alors

$$H|RK\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_P \sum_c |P\rangle\langle P|c\rangle. \quad (\text{III.8})$$

Essayons d'évaluer un des termes de la somme $\langle P_0|c\rangle$. Trois cas se présentent :

- $|c\rangle$ a la configuration  à la plaquette P_0 . La configuration peut alors s'écrire

$$|c\rangle = |\text{blue square}\rangle \otimes |c \setminus P_0\rangle \quad (\text{III.9})$$

En utilisant l'équation (III.5) il vient alors $\langle P_0|c\rangle = +|c \setminus P_0\rangle$.

- $|c\rangle$ a la configuration  à la plaquette P_0 . La configuration peut alors s'écrire

$$|c\rangle = |\text{blue square}\rangle \otimes |c \setminus P_0\rangle \quad (\text{III.10})$$

En utilisant l'équation (III.5) il vient alors $\langle P_0|c\rangle = -|c \setminus P_0\rangle$.

- Autre cas : $\langle P_0|c\rangle = 0$.

Les deux premiers cas sont en correspondance biunivoque, et leurs contributions se compensent deux à deux. On obtient ainsi

$$\sum_c |P_0\rangle \langle P_0|c\rangle = 0. \quad (\text{III.11})$$

En répétant la même procédure pour toutes les plaquettes, il vient finalement

$$H|RK\rangle = 0. \quad (\text{III.12})$$

Ainsi donc l'état $|RK\rangle$, superposition de toutes les configurations de dimères, est un fondamental du Hamiltonien de Rokhsar-Kivelson. Avant d'étudier le diagramme de phase en entier, faisons quelques remarques :

- L'étape **I** du programme présentée à la figure III.1 est donc évidente pour le fondamental. Par contre, les états excités ont en général une forme compliquée.
- Cette construction au point RK peut aisément être généralisée à d'autres modèles. On peut par exemple penser à définir le modèle sur un réseau triangulaire, et à bien d'autres modèles possédant une contrainte de coeur dur ou non. L'idée est d'écrire un Hamiltonien sous la forme d'une somme de projecteurs[10]. La fonction d'onde du fondamental s'écrira toujours sous la forme

$$|RK\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_c e^{-\frac{1}{2}E(c)} |c\rangle. \quad (\text{III.13})$$

$E(c)$ est l'énergie d'une configuration c du modèle classique sous-jacent. Z est la fonction de partition, et assure la normalisation. Par extension, nous appellerons fonction d'onde de Rokhsar-Kivelson tout état qui s'écrit sous la forme (III.13).

- La forme particulière de la fonction d'onde du fondamental simplifie de façon drastique certaines fonctions de corrélation. Pour un opérateur $\hat{O}$ qui satisfait $\langle c|\hat{O}|c'\rangle = \langle c|\hat{O}|c\rangle\delta_{cc'} = O_c\delta_{cc'}$ – donc diagonal dans la base des dimères – on a ainsi

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle RK|\hat{O}|RK\rangle = \frac{1}{Z} \sum_c e^{-E(c)} \langle c|\hat{O}|c\rangle = \sum_c p(c) O_c. \quad (\text{III.14})$$

$p(c)$ est la probabilité classique de la configuration c . Cette expression n'est rien d'autre que la fonction de corrélation du modèle classique sous-jacent.

- Une conséquence immédiate de la remarque précédente : le modèle de dimère sur réseau carré étant critique, le modèle de dimères quantique correspondant est à un point critique quantique.
- Les fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson peuvent sembler quelque peu artificielles, car toutes leurs amplitudes sont positives. Cependant, il est possible d'approximer efficacement des fonctions d'onde massives à l'aide de fonction d'onde RK. Ce n'est pas vrai dans le cas critique, et ces fonctions d'onde doivent plutôt être vues comme des fonctions d'onde jouets, représentant une certaine classe d'universalité.

III.1.3 Diagramme de phase à température nulle

a Diagramme

Le diagramme de phase du modèle de dimères quantique sur réseau carré a été l'objet de nombreuses études, citons[11, 12, 13, 14]. Il est représenté schématiquement à la figure III.3.

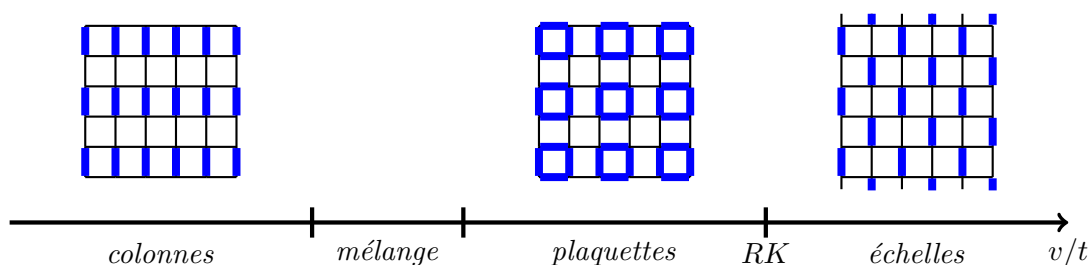


FIGURE III.3 – Diagramme de phase du modèle de Rokhsar-Kivelson sur réseau carré. La phase mélange, emprunte ses caractéristiques à la phase colonnes et à la phase plaquettes.

Ce diagramme peut être partiellement compris en étudiant deux limites simples :

- $v/t \rightarrow +\infty$. Le système minimise son énergie en minimisant le nombre de plaquettes retournables. Nous appelons état « échelles » l'état qui réalise cela. Voir la figure III.3 en haut à droite pour un exemple.
- $v/t \rightarrow -\infty$. Dans ce cas, le système essaye de maximiser le nombre de plaquettes retournables. Un exemple (« colonnes ») est montré à la figure III.3 en haut à gauche.

Pour pousser plus loin l'analyse, il faut réaliser des simulations numériques. Le résultat est le suivant : la phase échelle se termine sur le point critique RK, qui est isolé. À gauche de ce point se développe une phase que nous appelons « plaquettes » et qui est aussi représentée sur la figure. Cette image ne doit pas être comprise en un sens strict, mais plutôt en termes probabilistes : les liens en bleu ont une plus grande probabilité d'être occupés par un dimère que les autres. Notons que toutes ces phases apparaissent pour n'importe quel modèle de dimères bidimensionnel sur réseau biparti. Certaines simulations numériques indiquent aussi la présence d'une phase intermédiaire, plus compliquée, entre les colonnes et les plaquettes[14]. Nous l'appelons phase « mélange ».

b Influence du réseau

Tout comme son compagnon classique, le modèle de dimères quantique est très sensible au type de réseau sur lequel il vit, ainsi qu'à la dimensionnalité. Le diagramme de phase que nous avons présenté est, mis à part pour la phase « mélange », commun à tous les modèles de dimères sur réseaux bipartis. Celui-ci est par contre très différent sur les réseaux non-bipartis, comme le réseau triangulaire. La différence principale est que le point RK ne sera pas critique, et fera partie d'une phase dite liquide topologique $\mathbb{Z}_2$ elle aussi intéressante. La dimensionnalité joue un rôle important. Par exemple sur un réseau biparti en dimension $d > 2$, les phases colonnes et échelles sont préservées mais la phase plaquette est remplacée par une phase liquide RVB possédant la symétrie $U(1)$. Il y a aussi une (ou plusieurs) phase(s) mélange(s), dont les caractéristiques sont mal connues.

c Retour sur le voisinage du point RK

Le point critique RK sépare une phase plaquette, dont les hauteurs sont en moyenne de pente (par unité de longueur) nulle, d'une phase échelles dont les hauteurs ont une pente maximale. Il est cependant quelque peu artificiel[15, 16, 17, 18], car hautement instable vis à vis d'éventuelles perturbations. Il est en effet montré dans les références [15, 16, 17] que cette image est modifiée pour une large classe de perturbations. De nouvelles phases cristallines apparaissent alors, et celles-ci possèdent des pentes intermédiaires. Notons x un paramètre typique du Hamiltonien qui permet de passer d'une phase à l'autre. A la limite thermodynamique, la pente $\nu(x)$ va interpoler continûment et de façon croissante entre $\nu = 0$ et $\nu = \nu_{\max}$. Le résultat surprenant est que cette fonction $\nu(x)$ réalise un escalier de Cantor^a. Dans ces phases exotiques, les monomères ne sont plus confinés algébriquement (II.28) mais logarithmiquement. On dit, de manière légèrement impropre, que les monomères sont « déconfinés ». Le phénomène que nous venons de présenter est appelé *déconfinement de Cantor*.

Le fait que la transition entre la phase plaquettes et la phase échelles soit du second ordre peut paraître surprenant. En effet les deux phases brisent des symétries différentes et la théorie de Landau prédit une transition du premier ordre. Les points critiques comme le point RK , appelés aussi point critiques déconfinés, violent cette théorie. Le déconfinement de Cantor est un des mécanismes qui permet de le faire.

III.2 Entropie d'intrication et entropie de Shannon

III.2.1 Décomposition de Schmidt

Considérons la géométrie d'un cylindre infini coupé en deux, comme montré sur la figure III.4. Nous appelons « sites frontière » les sites qui touchent à la fois des liens dans A et dans B . Ils sont représentés par des cercles rouges sur la figure. Nous associons ensuite une variable de spin σ_j à chaque site frontière : $\sigma_j = \uparrow$ si le site est occupé par un dimère dans A , $\sigma_j = \downarrow$ s'il

a. Un escalier de Cantor est une fonction continue croissante dont la dérivée est nulle presque partout.

est occupé par un dimère dans B . Nous notons alors

$$|i\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\rangle \quad (\text{III.15})$$

la configuration totale des sites frontière.

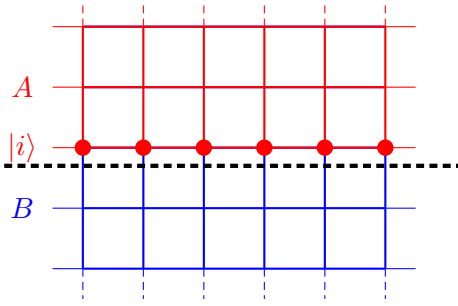


FIGURE III.4 – Bipartition du réseau, sur l'exemple d'un cylindre infini coupé en deux parties. Le sous-système A correspond aux liens rouges, B aux liens bleus. Les disques rouges sont les sites frontières. Nous décidons qu'ils appartiennent à A . Chaque site frontière peut être ou bien occupé par un dimère dans A , ou bien occupé par un dimère dans B . $|i\rangle$ représente la configuration totale des sites frontières.

Soient maintenant $\mathcal{E}_i^A$ (resp. $\mathcal{E}_i^B$) l'ensemble des configurations de dimères dans A (resp. B) compatibles avec l'état $|i\rangle$ à la frontière. Du fait de la contrainte de coeur dur, ils sont d'intersection vide :

$$\mathcal{E}_i^A \cap \mathcal{E}_{i'}^B = \emptyset \quad , i \neq i' \quad (\text{III.16})$$

Chaque configuration c peut s'écrire comme

$$c = a \cup b \quad , a \in \mathcal{E}_i^A \quad , b \in \mathcal{E}_i^B, \quad (\text{III.17})$$

et l'énergie se décompose comme

$$E(c) = E_A(a) + E_B(b). \quad (\text{III.18})$$

Ceci nous permet d'écrire l'état RK comme :

$$|RK\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}}} \sum_i \left[\sum_{a \in \mathcal{E}_i^A} e^{-E_A(a)/2} |a\rangle \right] \times \left[\sum_{b \in \mathcal{E}_i^B} e^{-E_B(b)/2} |b\rangle \right]. \quad (\text{III.19})$$

En définissant un nouvel ensemble d'état RK normalisé dans A et dans B

$$|RK_i^A\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^A}} \sum_{a \in \mathcal{E}_i^A} e^{-\frac{1}{2}E_A(a)} |a\rangle, \quad (\text{III.20})$$

$$|RK_i^B\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^B}} \sum_{b \in \mathcal{E}_i^B} e^{-\frac{1}{2}E_B(b)} |b\rangle, \quad (\text{III.21})$$

$$\text{avec} \quad \mathcal{Z}_i^\Omega = \sum_{\omega \in \mathcal{E}_i^\Omega} e^{-E_\Omega(\omega)} \quad (\Omega = A, B), \quad (\text{III.22})$$

il vient

$$|RK\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |RK_i^A\rangle |RK_i^B\rangle, \quad (\text{III.23})$$

avec

$$p_i = \frac{\mathcal{Z}_i^A \mathcal{Z}_i^B}{\mathcal{Z}}. \quad (\text{III.24})$$

L'équation (III.23) n'est rien d'autre que la décomposition de Schmidt de l'état RK, l'orthogonalité étant garantie par l'équation (III.16). Les $\{p_i\}$ sont les valeurs propres de la matrice densité réduite :

$$\rho_A = \sum_i p_i |RK_i^A\rangle \langle RK_i^A|. \quad (\text{III.25})$$

On obtient donc de cette façon

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln \left(\sum_i p_i^n \right). \quad (\text{III.26})$$

Le calcul de l'entropie d'intrication se réduit donc à la recherche de certaines probabilités classiques dans le système de dimères bidimensionnel. Nous allons voir au prochain paragraphe comment calculer exactement ces probabilités.

III.2.2 Matrice de transfert et chaîne de spin correspondante

Les probabilités que nous recherchons peuvent se calculer simplement dans un formalisme de matrice de transfert. Dans la limite du cylindre infini, celle-ci est dominée par la plus grande valeur propre λ_m . Si l'on note $|\Omega\rangle$ le vecteur propre correspondant,

$$\mathcal{T}^h \underset{h \rightarrow \infty}{\sim} \lambda^h |\Omega\rangle \langle \Omega|. \quad (\text{III.27})$$

La matrice de transfert est ainsi dominée par ce vecteur propre, et p_i est donné par

$$p_i = \frac{\langle a | \mathcal{T}^{h/2} | i \rangle \langle i | \mathcal{T}^{h/2} | b \rangle}{\langle a | \mathcal{T}^h | b \rangle} \quad (\text{III.28})$$

$$= |\langle i | \Omega \rangle|^2. \quad (\text{III.29})$$

$|a\rangle$ et $|b\rangle$ sont les configurations que l'on a imposées en bas et en haut du cylindre. Le point crucial est que les configurations frontières de spin $|i\rangle$ sont en bijection avec les configurations de dimères sur la ligne du dessus. Ceci est toujours vrai pour des dimères sur réseau biparti, mais pas en général. On verra au prochain chapitre qu'il faudra faire autrement pour des dimères sur réseau triangulaire. Dans notre cas (dimères sur réseau carrés et hexagonal), il est possible d'exprimer directement cette matrice de transfert en terme d'opérateurs de fermions. On a par

exemple sur réseau hexagonal

$$\mathcal{T} = \prod_{k \in K} \left(1 + e^{ik} d_k^\dagger d_k \right) \quad (\text{III.30})$$

$$d_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L e^{-ikj} c_j^\dagger \quad (\text{III.31})$$

$$K = \left\{ \frac{(2m+1)\pi}{L}, m = -L/2, L/2+1, \dots, L/2-1 \right\}, \quad (\text{III.32})$$

et le vecteur propre dominant s'écrit comme

$$|\Omega\rangle = \left(\prod_{k, |k| < 2\pi/3} d_k^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{III.33})$$

Cependant, cela n'est pas la méthode la plus pratique en général. Il est en effet souvent judicieux de voir la matrice de transfert comme l'exponentielle d'un Hamiltonien

$$\mathcal{T} = e^{a\mathcal{H}}, \quad (\text{III.34})$$

et de considérer une certaine limite anisotrope $a \rightarrow 0$, qui ne change pas les propriétés à longue distance. Le problème se ramène donc à diagonaliser un Hamiltonien. Par exemple pour des dimères sur réseau hexagonal on obtient le Hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^L \left(c_{j+1}^\dagger c_j + 2c_j^\dagger c_j + c_{j-1}^\dagger c_j \right). \quad (\text{III.35})$$

C'est – à une transformation de Jordan-Wigner près – une chaîne de spins. On vérifie facilement que tous ses vecteurs propres sont strictement identiques aux vecteurs propres de $\mathcal{T}$. En général ce n'est pas exactement le cas, mais les propriétés universelles qui nous intéressent vont être préservées. Il est avantageux de prendre une telle limite car le Hamiltonien qui en résulte est souvent un peu plus simple^b. Citons quelques limites hamiltoniennes connues de modèles statistiques bidimensionnels

- Au modèle d'Ising bidimensionnel, correspond la chaîne d'Ising en champ transverse.
- Au modèle à 6-vertex, correspond la chaîne XXZ.
- Au modèle à 8 vertex, correspond la chaîne XYZ.

Par la suite nous allons utiliser de préférence le langage des chaînes de spins. Le calcul de p_i fera ainsi intervenir le fondamental $|\psi\rangle$ de la chaîne, plutôt que le vecteur propre dominant $|\Omega\rangle$ de la matrice de transfert.

III.2.3 Résumé de la correspondance

Rappelons le résultat que nous avons obtenu. L'entropie d'intrication d'un cylindre infini coupé en deux s'exprime simplement comme

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i, \quad (\text{III.36})$$

b. Le modèle de dimères est un cas un peu exceptionnel où ce n'est pas le cas.

où les p_i sont reliées aux composantes du fondamental $|\psi\rangle$ d'une chaîne de spin par

$$p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2. \quad (\text{III.37})$$

Cette correspondance nous permet d'effectuer sans encombres l'étape **II** de la figure III.1, et nous l'utiliserons de manière intensive par la suite. Elle est illustrée à la figure III.5

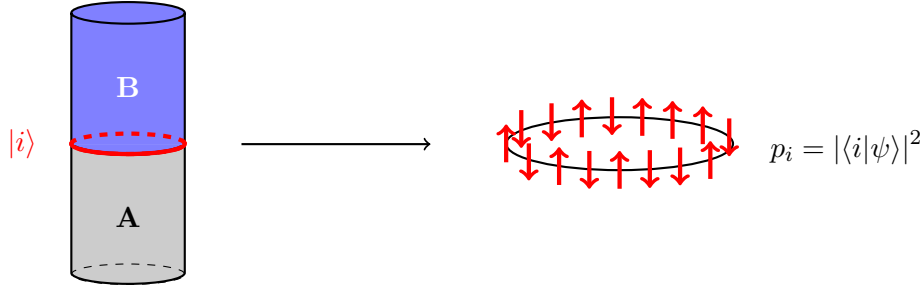


FIGURE III.5 – Illustration de la correspondance importante établie dans ce chapitre : $S(2d - \text{RK}) = S^{\text{Shannon}}(\text{chaîne de spins 1d})$

Avant d'exploiter cette correspondance, quelques remarques sont nécessaires

- Étant donné que les p_i sont les valeurs propres de la matrice densité réduite, la correspondance que nous avons établie est aussi valable pour l'entropie de Rényi :

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln(\text{Tr } \rho^n) = \frac{1}{1-n} \ln\left(\sum_i p_i^n\right). \quad (\text{III.38})$$

- En voyant les p_i comme des probabilités classiques (facteurs de Boltzmann) du système bidimensionnel, on voit que le paramètre n de Rényi agit de manière similaire à une température. Il est alors tentant de considérer des probabilités modifiées

$$p_i \rightarrow p_i(n) = \frac{(p_i)^n}{Z_n} \quad , \quad Z_n = \sum_i p_i^n, \quad (\text{III.39})$$

et de s'intéresser à l'entropie de Shannon d'un tel jeu de probabilités modifiées

$$\tilde{S}_n = - \sum_i p_i(n) \ln p_i(n). \quad (\text{III.40})$$

Les deux entropies sont en fait très similaires, et reliées par la relation

$$\tilde{S}_n = (1 - n \partial_n) \ln Z_n = (1 - n \partial_n) [(1 - n) S_n]. \quad (\text{III.41})$$

Ainsi, la plupart des résultats qui s'appliquent à l'entropie de Rényi peuvent être transcrits dans le langage de cette entropie de Shannon modifiée. Le premier article **{1}** met plus l'accent sur $\tilde{S}_n$, alors que **{2}** et **{5}** se focalisent sur l'entropie de Rényi S_n .

- Malgré cette correspondance, l'évaluation de l'entropie d'intrication reste exponentiellement difficile en la circonférence L du cylindre. Sauf situation exceptionnelle il ne sera pas possible de l'évaluer exactement. Deux angles d'attaque sont possibles, l'un numérique (diagonalisations exactes, fermions libres quand c'est possible), et l'autre par le biais de la théorie des champs.
- L'entropie d'intrication est indépendante de la base, alors que l'entropie de Shannon l'est. Ceci pourrait laisser penser que l'entropie de Shannon n'est qu'un moyen d'accéder à l'entropie d'intrication pour une certaine classe de fonctions d'onde. Nous allons au contraire essayer de démontrer que ce n'est pas le cas, notamment en ce qui concerne les propriétés universelles encodées dans une fonction d'onde donnée.
- Nous avons détaillé la correspondance sur des fonctions d'onde construites à partir de modèles de dimères, mais celle-ci peut être étendue à pratiquement n'importe quel modèle statistique. On peut penser à un modèle de vertex par exemple, ou bien même au modèle d'Ising.
- On s'attend à ce que nos deux entropies suivent une loi d'aire, c'est à dire qu'elles vont se comporter comme $S(L) \sim a \times L$ pour $L \gg 1$. On attend aussi le même comportement pour les entropies de Rényi.

III.3 Résultats pour le boson libre

Dans cette section nous allons nous intéresser à des fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson dont les propriétés à longue distance sont décrites par un boson libre, théorie conforme dont la charge centrale vaut $c = 1$. Le système est décrit à longue distance par un champ de hauteur gaussien

$$S[h] = \frac{\kappa}{4\pi} \int dx d\tau (\nabla h)^2 \quad (\text{III.42})$$

$$Z = \int \mathcal{D}[h] \exp(-S[h]). \quad (\text{III.43})$$

κ est la rigidité, et le champ de hauteur h est compactifié sur un cercle de rayon r : $h \equiv h + 2\pi r$. Les modèles statistiques bidimensionnels correspondants sont les suivants

- Modèles de dimères sur réseau biparti, avec éventuellement des interactions^c.
- Modèle à six-vertex sur réseau carré. Pour ce modèle la chaîne de spins correspondante est bien connue. Il s'agit de la chaîne d'Heisenberg anisotrope, aussi appelée chaîne XXZ :

$$H = \sum_j \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right) - h \sum_j \sigma_j^z. \quad (\text{III.44})$$

Δ est le paramètre d'anisotropie. Cette chaîne peut aussi être étudiée analytiquement, par des techniques d'ansatz de Bethe. Cependant, ces méthodes sont assez lourdes à mettre en oeuvre et il est probable que le problème que l'on cherche à résoudre (trouver toutes

c. Nous n'avons effectué aucune vérification numérique sur des modèles de dimères avec interactions[19, 20], mais les résultats analytiques que nous avons obtenu s'y appliquent.

les composantes de cette fonction d'onde dans la base des spins d'Ising) soit difficile. Nous avons plutôt utilisé des techniques numériques dites de « diagonalisations » exactes, basées sur l'algorithme de Lanczos. Signalons cependant qu'au point $\Delta = 0$, la chaîne peut s'exprimer comme des fermions libres, et que le modèle est alors très similaire aux dimères sur réseau hexagonal.

Bien que la correspondance ait été expliquée dans le cas du cylindre infini, nous allons aussi nous intéresser à la géométrie d'une bande infinie. À partir de maintenant nous allons étudier en détail l'entropie de Rényi S_n pour n réel strictement positif.

III.3.1 Deux points particuliers

En plus du point $n = 1$, où l'entropie de Rényi se réduit à l'entropie d'intrication, cette entropie possède deux points spéciaux, du moins en ce qui concerne le problème qui nous intéresse.

- Pour $n \rightarrow \infty$, l'entropie de Rényi se réduit à

$$S_\infty = -\ln |\langle i_{\max} | \psi \rangle|^2 = -\ln p_{\max}, \quad (\text{III.45})$$

où $p_{\max}$ correspond à la configuration de spin $|i_{\max}\rangle$ de plus grande probabilité (éventuellement dégénérée). Dans le langage des fonctions de partition, cette entropie s'exprime comme

$$S_\infty = -\ln \left(\frac{Z_{\max}^A Z_{\max}^B}{Z} \right). \quad (\text{III.46})$$

- Pour $n = 1/2$, on a

$$S_{1/2} = 2 \ln \left(\sum_i \langle i | \psi \rangle \right) = 2 \ln \left(\left[\sum_i \langle i | \right] | \psi \rangle \right) = 2 \ln (\langle \text{free} | \psi \rangle), \quad (\text{III.47})$$

où l'état $|\text{free}\rangle$ – non normalisé ici – est la superposition de tous les états possibles dans la base d'Ising. Naturellement, on a utilisé ici le fait que toutes les composantes de la fonction d'onde du fondamental sont positives^d. En termes de fonctions de partition,

$$S_{1/2} = 2 \ln \left(\frac{Z_{\text{free}}^A Z_{\text{free}}^B}{Z} \right). \quad (\text{III.48})$$

Dans les deux cas, le calcul se ramène à des rapports de fonctions de partition, avec une certaine condition au bord à la frontière entre A et B . Comme nous allons le voir par la suite, il nous sera parfois possible d'importer directement des résultats connus pour comprendre ces deux points.

III.3.2 Lois d'échelle pour l'entropie

Discutons maintenant les lois d'échelle que l'on peut attendre pour l'entropie S_n . Nous avons déjà mentionné à plusieurs reprises que l'entropie devait suivre une loi d'aire, mais nous savons depuis Kitaev, Preskill, Levin et Wen que les corrections sous-dominantes à l'entropie sont

d. Ceci est garanti par le théorème de Perron-Frobenius.

potentiellement universelles, et donc plus intéressantes que le terme dominant. Dans tous les cas considérés, on observe le comportement suivant, pour $L \rightarrow \infty$:

$$S_n = a_n L + l_n \ln L + s_n + o(1). \quad (\text{III.49})$$

Essayons de comprendre les termes sous-dominants, en nous appuyant sur les deux cas particuliers $n = 1/2$ et $n = \infty$, où l'entropie est simplement donnée par le (logarithme d'un) rapport de fonctions de partition. A ce point il nous faut distinguer entre la bande infinie et le cylindre.

- Pour une bande infinie, les fonctions de partition font intervenir des coins d'angle $\pi/2$. La formule de Cardy et Peschel prédit que ces coins contribuent pour un facteur logarithmique à l'énergie libre. Plus particulièrement pour un coin d'angle θ , la variation universelle d'énergie libre ($F = -\ln Z$) correspondante est donnée par

$$\Delta F = \frac{c}{24} \left(\frac{\theta}{\pi} - \frac{\pi}{\theta} \right) \ln L. \quad (\text{III.50})$$

Nous allons voir que ce n'est pas nécessairement la seule contribution logarithmique, mais cet argument nous permet d'ores et déjà de justifier la présence du terme $l_n \ln L$ dans l'équation (III.49). Notons aussi qu'il est raisonnable d'espérer observer un tel terme sur le réseau, malgré d'inévitables contributions non universelles à l'entropie. Le petit raisonnement heuristique suivant aide à s'en convaincre. Imaginons que l'on fait subir une transformation d'échelle $L \mapsto \alpha \times L$ à notre système critique. Une telle transformation fictive ne doit pas changer les propriétés à longue distance du système. Si l'on injecte αL dans l'équation (III.49), on voit immédiatement que l_n reste inchangé, alors que a_n et s_n sont modifiés comme suit :

$$a_n \mapsto \alpha a_n \quad s_n \mapsto s_n + l_n \ln \alpha. \quad (\text{III.51})$$

a_n est dimensionné et n'a de toutes façons aucune chance d'être universel. L'identification de contributions universelles à s_n est plus délicate, mais parfois possible^e.

- Pour un cylindre infini, la frontière entre les deux sous-systèmes A et B est lisse, et il n'y pas de coins. On s'attend donc à trouver $l_n = 0$. Cela signifie que le terme s_n ne peut plus être modifié par notre transformation fictive $L \rightarrow \alpha L$, et que s_n a de bonnes chances d'être universel. Nous allons voir que $s_{1/2}$ et s_∞ sont en fait reliés à des « facteurs g » universels, mis en avant par Affleck et Ludwig[22].

III.3.3 Cylindre infini et dimères

Calcul de l'entropie Nous allons discuter en détail cette situation, qui se trouve être la plus simple. Nous allons prendre l'exemple de la chaîne XX (très similaire aux dimères sur réseau hexagonal). La chaîne de spins correspondante peut s'exprimer, via une transformation de Jordan-Wigner, comme un Hamiltonien de fermions libres

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \left(c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1} \right), \quad (\text{III.52})$$

e. On peut par exemple accéder à des différences $s_n - s'_n$ entre constantes universelles, en faisant des différences entre quantités ayant le même terme dominant a_n et la même contribution logarithmique l_n .

avec les conditions aux limites suivantes sur les fermions $c_{L+1}^\dagger = (-1)^{\hat{N}} c_1^\dagger$. L'opérateur $\hat{N} = \sum_j c_j^\dagger c_j$ compte le nombre de fermions et est une quantité conservée. Nous notons donc $\hat{N} = N$. Plaçons nous pour simplifier dans un cas où N est pair. Cette chaîne est diagonalisée par l'ansatz

$$d_m^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L e^{-i(2m+1)\frac{\pi}{L}j} c_j^\dagger \quad , \quad m = -L/2, \dots, L/2 - 1. \quad (\text{III.53})$$

En notant $k = (2m+1)\frac{\pi}{L}$ le Hamiltonien se réécrit

$$H = - \sum_k \epsilon_k d_k^\dagger d_k \quad , \quad \epsilon_k = \cos(k/2). \quad (\text{III.54})$$

Le fondamental de la chaîne s'obtient simplement en remplissant tous les états d'énergie négative, c'est à dire tous les états d'impulsion $|k| < \pi/2$. Notons Ω cet ensemble. Le nombre de fermions est alors $\hat{N} = L/2$, et la densité de fermions $\rho = \frac{N}{L} = 1/2$. Le fondamental est donné par

$$|\psi\rangle = \left(\prod_{k \in \Omega} d_k^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{III.55})$$

$|0\rangle$ est le vide des fermions réels $c_j|0\rangle = 0 \quad \forall j$. Pour une configuration de spin donnée, notons $x_1, \dots, x_N$ les positions des spins up. Alors la configuration de spin s'écrit comme suit dans la base des fermions :

$$|i\rangle = c_{x_1}^\dagger c_{x_2}^\dagger \dots c_{x_N}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{III.56})$$

et la probabilité recherchée est donnée par

$$p_i = p(x_1, \dots, x_N) = \langle 0 | c_{x_1} \dots c_{x_N} d_{k_1}^\dagger \dots d_{k_N}^\dagger | 0 \rangle. \quad (\text{III.57})$$

Par application du théorème de Wick, nous obtenons finalement un déterminant de Vandermonde

$$p_i = \left| \det_{j\ell} \left(\langle 0 | c_{x_j} d_{k_\ell}^\dagger | 0 \rangle \right) \right|^2 \quad (\text{III.58})$$

$$= \left(\frac{1}{L} \right)^N \left| \det_{j\ell} \left(e^{-ix_j k_\ell} \right) \right|^2 \quad (\text{III.59})$$

$$= \left(\frac{1}{L} \right)^N \prod_{1 \leq j < \ell \leq N} 4 \sin^2 \left[\frac{\pi}{L} (x_j - x_\ell) \right]. \quad (\text{III.60})$$

A partir de ce résultat, le calcul numérique exact de l'entropie est aisé ; ils suffit de générer toutes les configurations de spins permises à la frontière, de calculer les p_i correspondants, et d'en déduire l'entropie. Notons cependant que le nombre de configurations possibles (C_L^N) est exponentiel en la taille du système. On vérifie aussi facilement que l'équation (III.60) est aussi valable pour les dimères sur réseau hexagonal, mais cette fois à remplissage $\rho = N/L = 1/3$. Le remplissage peut être changé en imposant une certaine condition au bord à l'infini en bas du cylindre par exemple.

Résultats numériques Présentons maintenant des simulations numériques d'entropie, en focalisant pour l'instant sur l'entropie d'intrication (figure III.6). Nous avons étudié des dimères sur réseau hexagonal et carré. La chaîne XX peut être vue comme un modèle de dimères sur réseau hexagonal à remplissage $\rho = 1/2$.

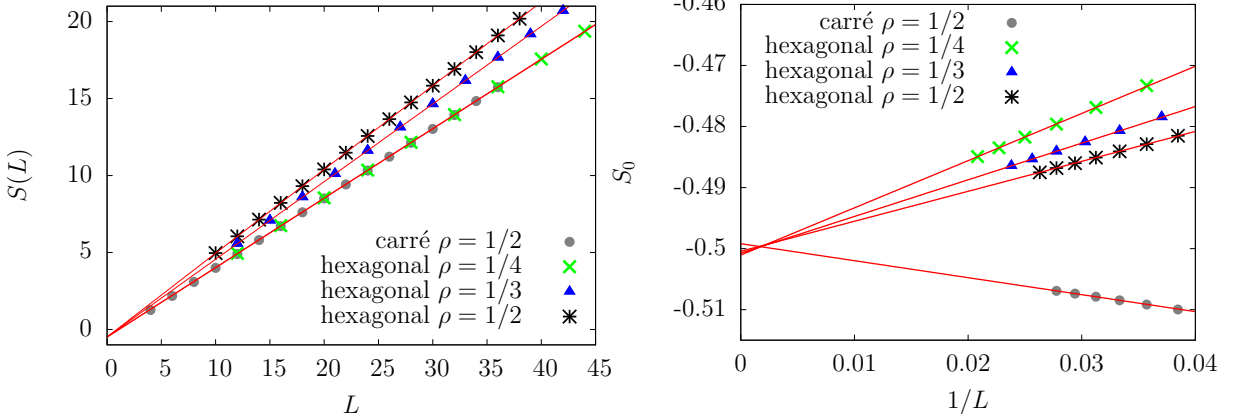


FIGURE III.6 – *A gauche* : entropie d'intrication en fonction de la circonférence L du cylindre pour différents modèles dans la même classe d'universalité. *A droite* : constante sous-dominante évaluée par un ajustement $aL + b$ pour deux tailles consécutives, en fonction de L . On observe de manière convaincante que toutes ces courbes ont $-1/2$ pour ordonnée à l'origine.

Le résultat que l'on observe est le suivant. L'entropie suit la loi

$$S = aL + s + \mathcal{O}(1/L). \quad (\text{III.61})$$

a dépend du modèle considéré, et ne nous intéresse pas. Nous obtenons par contre $s \simeq -1/2$ indépendamment du modèle et du remplissage. s est un exemple de constante sous-dominante universelle, que l'on peut calculer par des méthodes de théorie conforme. Avant de le faire, intéressons nous d'abord à l'entropie de Rényi en général. En répétant la même procédure que pour l'entropie d'intrication, on observe le même type de lois d'échelle, mais la constante sous-dominante change avec le paramètre n . On devine la formule suivante

$$s_n = -\frac{1}{2} \frac{\ln n}{n-1}. \quad (\text{III.62})$$

Nous avons aussi étudié l'entropie de Shannon modifiée $\tilde{S}_n = (1 - n\partial_n) \ln(Z_n)$. De l'équation (III.62), on déduit que le terme sous-dominant doit être

$$\tilde{s}_n = (1 - n\partial_n)((1 - n)s_n) = \frac{1}{2} \ln n - \frac{1}{2}. \quad (\text{III.63})$$

Voir la figure III.7 pour une vérification numérique.

Il est important de retrouver ce résultat par des arguments plus analytiques, afin de confirmer l'universalité d'une telle quantité. Plusieurs méthodes sont possibles. Nous allons tout d'abord

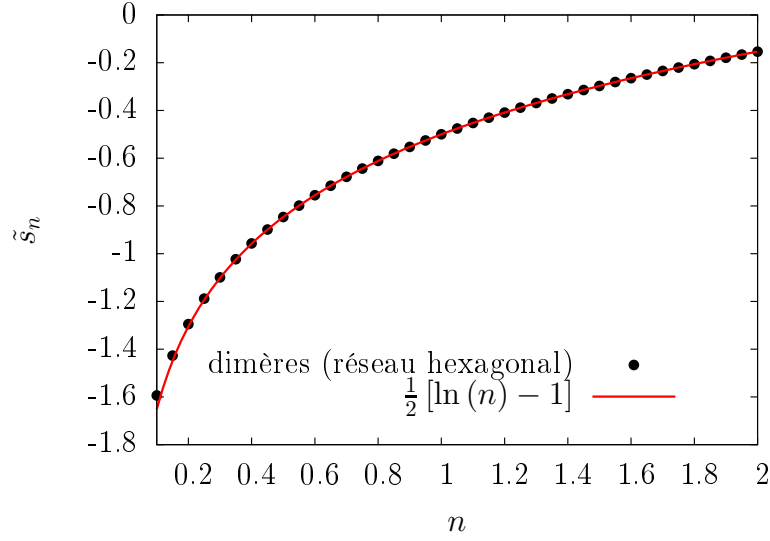


FIGURE III.7 – Extraction numérique de la constante sous-dominante de l’entropie modifiée pour diverses valeurs de n . Les points noirs sont les simulations numériques, et la courbe rouge la prédiction de l’équation (III.63).

commencer par exploiter la formule simple (III.60) que nous avons obtenue pour les probabilités p_i .

Gaz de Dyson-Gaudin La formule (III.60) admet une interprétation électrostatique élégante que nous allons détailler ici. Posons $z_j = e^{i\frac{2\pi}{L}x_j}$. Les $\{z_j\}$, de module 1, vivent de plus sur un polygone régulier à L côtés. On peut ainsi voir p_i comme un facteur de Boltzmann :

$$p_i = p(\{x\}) = p(\{z\}) = \exp \left(-2 \sum_{1 \leq j < \ell \leq N} \ln |z_j - z_\ell| \right). \quad (\text{III.64})$$

Celui-ci est associé à un gaz de N particules vivant aux sommets d’un polygone régulier à L côtés, et qui se repoussent selon les lois de l’électrostatique bidimensionnelle. L’énergie d’interaction est

$$E(\{z\}) = - \sum_{1 \leq j < \ell \leq N} \ln |z_j - z_\ell|, \quad (\text{III.65})$$

et la température inverse est $\beta = 2$. Voir la figure III.8 pour une représentation graphique.

La thermodynamique d’un tel gaz a été étudiée par Gaudin[23]. C’est une discrétisation d’un fameux gaz – dit de Dyson – où les N particules ne sont pas contraintes à vivre aux sommets d’un polygone régulier, mais simplement sur le cercle unité. Ce gaz, originellement étudié dans le contexte des matrices aléatoires^f, peut être vu comme une limite $L \rightarrow \infty$ à N fixé du gaz qui

f. Pour une matrice aléatoire $N \times N$ appartenant au groupe des matrices unitaires et N grand, la probabilité

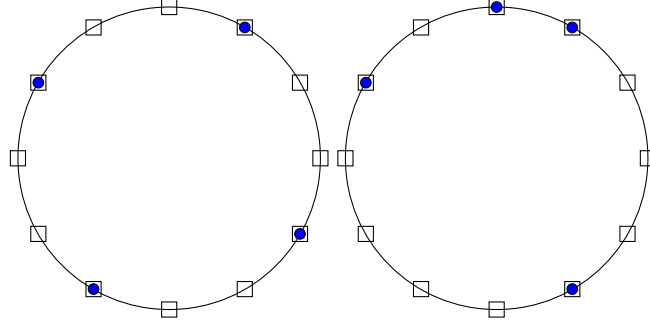


FIGURE III.8 – Gaz de particules chargées qui se repoussent selon les lois de l'électrostatique bidimensionnelle. Ici $L = 12$ sites et $N = 4$ particules. Le remplissage est donc $\rho = N/L = 1/3$. *A gauche* : les particules sont les plus éloignées les unes des autres. C'est la configuration la plus probable, 3 fois dégénérée. *A droite* : une configuration prise au hasard.

nous intéresse. Gaudin s'est en particulier intéressé à la fonction de partition du système

$$Z(\beta) = \sum_{\{z\}} e^{-\beta E(\{z\})} = \sum_i p_i^{\beta/2}, \quad (\text{III.66})$$

et est parvenu à calculer exactement celle-ci pour $\beta = 2n$, où n est un entier satisfaisant $n < L/(n-1)$. Le résultat est

$$Z(\beta = 2n) = \sum_i p_i^n = \frac{(Nn)!}{N! L^{N(n-1)} (n!)^N}, \quad (\text{III.67})$$

et nous permet de déduire l'entropie de Rényi pour n entier et $2 \leq n \leq 1/\rho$. Le résultat à $n = 1$ n'est d'aucune utilité car $Z(\beta = 2) = 1$ par construction, et l'on obtient une forme indéterminée pour $S = S_1$. Dans le cas contraire l'entropie de Rényi est donnée par

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln \left(\sum_i p_i^n \right) = \frac{1}{1-n} \ln \left(\frac{(\rho L n)!}{(\rho L)! L^{\rho L(n-1)} (n!)^{\rho L}} \right). \quad (\text{III.68})$$

En appliquant la formule de Stirling pour $L \rightarrow \infty$ à ρ fixé, on obtient que le terme sous-dominant est une constante qui vaut

$$s_n = -\frac{1}{2} \frac{\ln n}{n-1}. \quad (\text{III.69})$$

C'est le résultat attendu. Notons les choses suivantes :

- Il est important de garder à l'esprit que l'équation (III.67) n'est pas valable pour n non entier. Le prolongement analytique de cette formule est donc probablement très difficile. Par contre, les résultats numériques indiquent que l'équation (III.69) est en fait valable pour n non entier, $n \leq 1/\rho$.

conjointe que ses valeurs propres valent $z_1, \dots, z_N$ est le facteur de Boltzmann associé à la configuration $z_1, \dots, z_N$ du gaz de Dyson. Ainsi, les valeurs propres se repoussent.

- Il est aussi possible d'évaluer la fonction de partition à $\beta = 1$, ce qui correspond à $n = 1/2$. Le résultat se trouve en écrivant explicitement la somme sur toutes les configurations – à la Gaudin –, ou bien en remarquant que l'état $|\text{free}\rangle$ peut s'écrire efficacement dans la base des fermions^g. On obtient

$$Z(\beta = 1) = \prod_{j=1}^{N/2} \cot \frac{(2j-1)\pi}{2L}, \quad (\text{III.70})$$

dont on déduit facilement $s_{1/2} = -\ln 2$, compatible avec l'équation (III.69).

- Bien que la formule de Gaudin (III.67) ne soit pas valable pour entier $n > 1/\rho$, le terme sous-dominant reste correct. Nous allons cependant voir que ceci n'est plus vrai au delà de $n = 1/\rho^2$. Nous mettons volontairement cette transition de côté pour l'instant ; nous l'étudierons en III.3.7.

Bosonisation Nous allons maintenant chercher à décrire la limite continue du Gaz de Dyson-Gaudin. Pour $L \rightarrow \infty$ à densité ρ fixée, les charges électriques se répartissent continûment sur le cercle, en suivant une certaine distribution $\rho(\theta)$. θ est l'angle sur le cercle. L'expression de l'énergie électrostatique (III.65) devient

$$E[\rho] = -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \rho(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} \rho(\theta') d\theta' \ln \left| 2 \sin \left(\frac{\theta - \theta'}{2} \right) \right|. \quad (\text{III.71})$$

Définissons maintenant un champ bosonique $\phi(\theta)$ qui mesure le « nombre » de charges dans l'intervalle $[0, \theta]$, normalisé à 2π :

$$\phi(\theta) = 2\pi \int_0^\theta \rho(\sigma) d\sigma. \quad (\text{III.72})$$

L'énergie peut se réécrire comme une fonctionnelle de ϕ , après deux intégrations par parties

$$E[\phi] = \frac{1}{64\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\theta' \left[\frac{\phi(\theta) - \phi(\theta')}{\sin(\frac{\theta - \theta'}{2})} \right]^2. \quad (\text{III.73})$$

Il est alors possible de développer le champ en modes

$$\phi = 2\pi \sum_{k=1}^{\infty} \left(x_k e^{ik\theta} + \bar{x}_k e^{-ik\theta} \right), \quad (\text{III.74})$$

ce qui permet de réécrire l'énergie comme

$$E[\phi] = E[\{x_k, \bar{x}_k\}_k] = 2\pi^2 \sum_{k=1}^{\infty} k |x_k|^2. \quad (\text{III.75})$$

g. $|\text{free}\rangle = \prod_{j=1}^L (1 + c_j^\dagger) |0\rangle = \prod_{k>0} (1 + i \cot(k/2) d_{-k}^\dagger d_k^\dagger) |0\rangle$

La fonction de partition $\mathcal{Z}(\beta)$ s'obtient alors en réalisant l'intégrale fonctionnelle sur les poids de Boltzmann

$$\mathcal{Z}(\beta) = \int [\mathcal{D}\phi] e^{-\beta E[\phi]} \quad (\text{III.76})$$

$$= \int \prod_k dx_k d\bar{x}_k e^{-2\pi^2 \beta \sum_{k=1}^{\infty} k |x_k|^2} \quad (\text{III.77})$$

$$= \prod_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\pi \beta k} \quad (\text{III.78})$$

Bien entendu, ce produit vaut 0 stricto-sensu, et doit être régularisé. Habituellement, on utilise pour ce faire la fonction zêta de Riemann $\zeta(s) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-s}$, prolongée analytiquement au plan complexe^h. On a

$$-\ln Z(\beta) = \sum_{k=1}^{\infty} \ln(\pi \beta) + \sum_{k=1}^{\infty} \ln k. \quad (\text{III.79})$$

La régularisation s'obtient en faisant les substitutions

$$\sum_{k=1}^{\infty} 1 \rightarrow \lim_{s \rightarrow 0} \sum_{k=1}^{\infty} k^{-s} \rightarrow \zeta(0) = -\frac{1}{2} \quad (\text{III.80})$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \ln k \rightarrow -\lim_{s \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial s} \left(\sum_{k=1}^{\infty} k^{-s} \right) \rightarrow -\zeta'(0) = \frac{1}{2} \ln(2\pi) \quad (\text{III.81})$$

On a finalement

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sqrt{\frac{\beta}{2}}, \quad (\text{III.82})$$

et l'on retrouve bien notre résultat pour l'entropie de Rényi

$$s_n = \frac{1}{1-n} \ln \mathcal{Z}(\beta = 2n) = \frac{1}{2} \frac{\ln n}{1-n}. \quad (\text{III.83})$$

III.3.4 Arguments analytiques généraux

Points spéciaux et entropie d'Affleck-Ludwig L'étude des deux points spéciaux $n = 1/2$ et $n = \infty$ est particulièrement simple dans le cas du cylindre, et nous allons donc commencer par eux.

- Pour $n = 1/2$, l'entropie de Rényi est donnée par

$$R_{n=1/2} = 2 \ln (\langle \text{free} | \psi \rangle) = 2 \ln \mathcal{Z}_{\text{free}}. \quad (\text{III.84})$$

$\mathcal{Z}_{\text{free}}$ est la fonction de partition d'un demi-cylindre infini avec condition au bord libre sur les spins du bas. Nous avons déjà discuté une telle quantité au chapitre II. La contribution universelle d'un tel rapport de fonctions de partitions est un facteur g d'Affleck et

h. Un argument un peu plus complet est présenté dans l'article {1}.

Ludwig[22]. La condition au bord libre sur les spin renormalise vers Neuman à la limite continue. On trouve

$$s_{n=1/2} = 2 \ln g_N. \quad (\text{III.85})$$

Un tel facteur g a déjà été calculé pour un champ libre compactifié[36], ce qui nous permet de déduire :

$$s_{1/2} = \ln R - \ln 2. \quad (\text{III.86})$$

- Considérons maintenant $n \rightarrow \infty$. Dans ce cas l'entropie de Rényi infinie est donnée par

$$S_\infty = -\ln p_{\max} = -\ln \left(\frac{(\mathcal{Z}_{\max})^2}{\mathcal{Z}} \right). \quad (\text{III.87})$$

$\mathcal{Z}_{\max}$ est la fonction de partition sur un demi-cylindre infini, avec la configuration $|i_{\max}\rangle$ en bas du demi-cylindre. $\mathcal{Z}$ est la fonction de partition d'un cylindre infini. C'est de nouveau un facteur g d'Affleck et Ludwig. Nous allons voir par la suite que la configuration de spin (de dimères) correspond à une configuration particulièrement plate du champ de hauteur. Une telle condition aux bords va donc renormaliser vers Dirichlet. Le facteur g correspondant est aussi bien connu[36], et l'on obtient finalement

$$s_\infty = \ln R. \quad (\text{III.88})$$

Nous allons voir au paragraphe suivant que l'on peut aussi évaluer s_n pour n quelconque à partir de ces facteurs g . Le raisonnement pour y parvenir sera cependant plus compliqué.

Entropie de Rényi comme rapport de fonctions de partition Nous allons ici retrouver nos résultats précédents en adoptant un point de vue euclidien en $1 + 1$ dimensions. A des distances suffisamment longues, le modèle de dimères est décrit par un champ de hauteur libre et compactifié $h(x, \tau)$. La fonction de partition s'écrit

$$\mathcal{Z} = \int [\mathcal{D}h] \exp(-S[h]), \quad (\text{III.89})$$

et l'action du système est gaussienne

$$S[h] = \frac{\kappa}{4\pi} \int dx d\tau (\nabla h)^2, \quad h \equiv h + 2\pi r. \quad (\text{III.90})$$

Rappelons que κ est la rigidité, r le rayon de compactification. r et κ ne sont pas indépendants, et tout résultat physique s'exprime en fonction du paramètre de Luttinger $R = \sqrt{2\kappa}r$. $R = 1$ pour les dimères. Plaçons la frontière en $\tau = 0$. Les configurations microscopiques $|i\rangle$ auxquelles on s'intéresse vont être remplacées par les configurations du champ de hauteur à la frontière :

$$|i\rangle \longrightarrow |\phi(x)\rangle = |h(x, \tau = 0)\rangle. \quad (\text{III.91})$$

Afin d'évaluer la probabilité $p[\phi]$ nous allons décomposer le champ de hauteur en deux parties :

$$h(x, \tau) = h_\phi(x, \tau) + \delta h(x, \tau). \quad (\text{III.92})$$

h_ϕ est une fonction harmonique qui satisfait la condition aux limites $h_\phi(x, \tau = 0) = \phi(x)$; on l'appelle parfois la partie « classique » . δh est la partie « quantique » qui vérifie une condition au bord de type Dirichlet : $\delta h(x, \tau = 0) = 0$. Le fait que l'action soit gaussienne a une conséquence bien connue : les deux parties vont se découplerⁱ

$$S[h] = S[h_\phi] + S[\delta h]. \quad (\text{III.93})$$

On obtient alors

$$p[\phi] = \frac{\int [\mathcal{D} \delta h] e^{-S[h_\phi] - S[\delta h]}}{\int [\mathcal{D} \delta h] [\mathcal{D} h_\phi] e^{-S[h_\phi] - S[\delta h]}} \quad (\text{III.94})$$

$$= \exp(-S[h_\phi]) \frac{\mathcal{Z}^D}{\mathcal{Z}} \quad (\text{III.95})$$

$\mathcal{Z}^D$ est la fonction de partition du cylindre entier avec une « ligne de défaut » Dirichlet en $\tau = 0$. On peut aussi la voir comme le carré d'une fonction de partition d'un cylindre semi-infini avec condition au bord Dirichlet. Élevons maintenant ces probabilités à la puissance n :

$$(p[\phi])^n = \exp(-nS[h_\phi]) \left(\frac{\mathcal{Z}^D}{\mathcal{Z}} \right)^n. \quad (\text{III.96})$$

Le raisonnement repose sur l'observation suivante : $\exp(-nS[h_\phi])$ n'est rien d'autre qu'un poids de Boltzmann associé à un système dont la rigidité est $\kappa' = n\kappa$. Nous allons maintenant garder κ en indice, par souci de lisibilité. Il vient

$$(p_\kappa[\phi])^n = \exp(-S_{n\kappa}[h_\phi]) \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa^D}{\mathcal{Z}_\kappa} \right)^n \quad (\text{III.97})$$

$$= p_{n\kappa}[\phi] \frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D}{\mathcal{Z}_{n\kappa}} \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa^D}{\mathcal{Z}_\kappa} \right)^n. \quad (\text{III.98})$$

En utilisant le fait que les probabilités $p_{n\kappa}$ sont normalisées, on obtient

$$\sum_\phi (p_\kappa[\phi])^n = \frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D}{\mathcal{Z}_{n\kappa}} \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa^D}{\mathcal{Z}_\kappa} \right)^n. \quad (\text{III.99})$$

On en déduit alors l'entropie de Rényi

$$S_n = \frac{1}{1-n} \left[\ln \left(\frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D}{\mathcal{Z}_{n\kappa}} \right) - n \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa^D}{\mathcal{Z}_\kappa} \right) \right]. \quad (\text{III.100})$$

L'évaluation de l'entropie de Rényi se ramène à des rapports de fonctions de partition. Nous avons vu au paragraphe précédent que ces rapports étaient bien connus, et liés aux facteurs g introduits par Affleck et Ludwig[22]. On a[36]

$$g_D^2 = \frac{\mathcal{Z}_\kappa^D}{\mathcal{Z}_\kappa} = \frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{2\kappa r^2}}. \quad (\text{III.101})$$

i. On peut le montrer par intégration par parties.

En injectant cela dans l'équation (III.100), on trouve finalement la constante sous-dominante suivante

$$s_n = \ln R - \frac{1}{2} \frac{\ln n}{n-1}, \quad (\text{III.102})$$

qui généralise à $R \neq 1$ notre résultat précédent. A ce stade, il paraît important d'insister sur les points suivants :

- Nous avons simplement utilisé la nature gaussienne des probabilités dans le raisonnement précédent. Il n'a jamais été supposé que n était un entier. Cette approche est donc assez différente de la méthode la plus répandue, qui passe par des répliques. L'avantage en est que les complications habituelles liées aux surfaces à n feuillets ont été évitées. Ce raisonnement est cependant spécifique au champ libre.
- L'équation (III.100) est probablement l'équation la plus importante de la section III.3. Nous allons voir en particulier qu'elle reste valable pour d'autres bipartitions, comme celle de la bande semi-infinie.
- A ce stade, nous n'avons vérifié l'équation (III.102) qu'au point fermions libres ($R = 1$). Il est important de la vérifier aussi pour d'autres valeurs de R . Nous allons le faire à la sous-section III.3.6.
- Au point von Neumann ($n = 1$), le terme sous-dominant devient

$$s_1 = \ln R - \frac{1}{2}, \quad (\text{III.103})$$

résultat sur lequel on a insisté dans l'article {1}.

Notons finalement que l'équation (III.100) diffère d'un résultat précédent, proposé par Fradkin et Moore[21] initialement pour la bande infinie, et réutilisée plus tard pour le cylindre[24, 25] :

$$S_n^F = \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa}{\mathcal{Z}_\kappa^D} \right). \quad (\text{III.104})$$

Cette expression – obtenue à l'aide de la méthode des répliques – revient à négliger la dépendance à la rigidité dans l'équation (III.100). Le terme sous-dominant qu'elle prédit est

$$s_n^F = \ln R. \quad (\text{III.105})$$

Ce résultat n'est pas compatible avec les simulations numériques présentées sur les dimères, et est incorrect. Cela ne signifie cependant pas que la méthode des répliques échoue à donner le bon résultat, comme nous allons le voir ci-après (III.3.5).

III.3.5 Répliques et livre de la théorie conforme

a Le livre

La quantité $Z_n = \text{Tr } \rho^n = \sum_i p_i^n = \sum_i (\langle i|\psi \rangle^2)^n$ peut être interprétée de la façon suivante, en employant l'astuce des répliques. Pour n entier, Z_n s'exprime comme un rapport de fonctions de partition

$$Z_n = \sum_i p_i^n = \frac{\mathcal{Z}^{(n)}}{(\mathcal{Z}_f)^n}. \quad (\text{III.106})$$

$\mathcal{Z}_f$ est la fonction de partition de la théorie sur un cylindre infini (ou bande infinie dans le cas ouvert). $(\mathcal{Z}_f)^n$ est donc la fonction de partition de n théories conformes identiques et indépendantes, chacune vivant sur son cylindre. $\mathcal{Z}^{(n)}$ est la fonction de partition de n cylindres infinis identiques, mais auxquels on a imposé la même configuration commune $|i\rangle$ à la frontière entre A et B . Le rapport de fonctions de partition (III.106) peut aussi s'écrire

$$\sum_i p_i^n = \sum_i \langle i|\psi\rangle^{2n} \quad (\text{III.107})$$

$$= \frac{\mathcal{Z}_{\text{livre}}^{(2n)}}{(\mathcal{Z}_f)^n} \quad (\text{III.108})$$

Dans ce point de vue, on a « plié » par la pensée chacun des cylindres au numérateur de l'équation (III.106), à l'interface entre A et B . Chaque cylindre infini est plié en un demi cylindre infini, et son double. A partir de maintenant nous nommerons « feuille » chaque demi-cylindre infini (ou demie bande infinie). $\mathcal{Z}_{\text{livre}}^{(2n)}$ est la fonction de partition de $2n$ feuilles, avec la contrainte que les configurations en bas de chacune des feuilles sont identiques. Les feuilles sont attachées par une reliure, c'est un livre ! Celui-ci est représenté à la figure III.9.

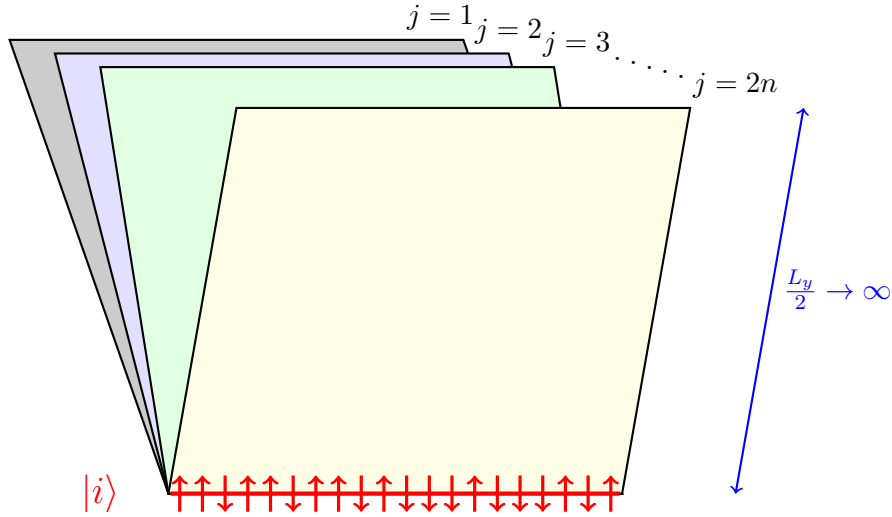


FIGURE III.9 – Représentation imagée du « livre » à $2n$ feuilles. Sur chaque feuille vit une théorie conforme (un boson libre ici). Les configurations de spins $|i\rangle$ de chacune des feuilles sont identiques au niveau de la reliure. L'analogie est quasi-parfaite dans le cas de conditions aux bords ouvertes. Dans le cas fermé il faut de plus imaginer que chaque feuille a des conditions aux limites périodiques le long de l'axe horizontal.

Remarquons les choses suivantes :

- $\mathcal{Z}_f$ peut être vu comme une normalisation : la complexité de l'entropie de Rényi est donc cachée dans le livre.

- Cette interprétation en termes de pliage est souvent utile pour faire des calculs en théorie des champs[31, 32]. Pour le problème qui nous intéresse elle est de plus correcte sur le réseau, comme on peut s'en convaincre en utilisant la matrice de transfert.
- On peut aussi plier par la pensée $(\mathcal{Z}_f)^n$. On a alors la fonction de partition de $2n$ feuilles, ou chaque feuille est identifiée avec son unique double à la frontière. Un tel point de vue peut sembler quelque peu artificiel, mais est parfois utile pour vérifier la cohérence de certains arguments.
- L'interprétation en termes de livre tient aussi si n est demi-entier. Par exemple pour $n = 1/2$ on a un livre possédant une seule page avec la condition au bord Neuman (libre) en bas. Ceci est bien entendu cohérent avec l'analyse présentée en III.3.4.

b Un premier argument analytique

Pour la théorie sous-jacente, la fonction de partition du livre est la fonction de partition d'un champ libre vectoriel $\mathbf{h} = (h_1, h_2, \dots, h_{2n})$ dont les $2n$ composantes sont sujettes à la condition de « collage »

$$h_1 = h_2 = \dots = h_{2n} \quad (\text{III.109})$$

à la frontière entre A et B . Une telle condition est a priori difficile à traiter, et l'on souhaiterait s'en débarrasser. Pour ce faire, il est naturel d'introduire des champs χ_j , combinaisons linéaire des h_j :

$$\chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2n}} \sum_{j=1}^{2n} h_j \quad (\text{III.110})$$

$$\chi_j = \frac{1}{\sqrt{2}} (h_j - h_{j+1}) \quad , \quad j = 2, \dots, 2n \quad (\text{III.111})$$

Les champs différence $\chi_{j>1}$ satisfont une condition au bord de type Dirichlet, alors que le champ « centre de masse » χ_1 reste lui libre. L'action du boson à plusieurs composantes peut s'écrire en termes des nouveaux champs

$$\mathcal{L}[\mathbf{h}] = \frac{\kappa}{4\pi} \sum_{j=1}^{2n} (\nabla h_j)^2 \quad (\text{III.112})$$

$$= \frac{\kappa}{4\pi} \sum_{j=1}^{2n} (\nabla \chi_j)^2 \quad (\text{III.113})$$

En suivant les références [21, 24, 25], nous écrivons donc

$$\mathcal{Z}_{\text{livre}}^{(2n)} = \mathcal{Z}^{ND} (\mathcal{Z}^{DD})^{2n-1}, \quad (\text{III.114})$$

où $\mathcal{Z}^{ND}$ est la fonction de partition sur une feuille avec conditions Neuman à un bord et Dirichlet à l'autre. $\mathcal{Z}^{DD}$ a des conditions de type Dirichlet aux deux bords. Un tel raisonnement est cependant incorrect, car il néglige une complication due à la compactification, que nous discutons ci-après.

c Subtilités dues à la compactification

Le problème peut être compris sur un exemple simple. Imaginons deux champs h_1 et h_2 , compactifiés tous les deux sur un cercle de rayon R :

$$h_1 \equiv h_1 + 2\pi p_1 R \quad (\text{III.115})$$

$$h_2 \equiv h_2 + 2\pi p_2 R \quad (\text{III.116})$$

p_1 et p_2 sont les nombres (entiers) de tours dans l'espace cible associés respectivement aux champs h_1 et h_2 . Formons maintenant un champ somme $\chi_+ = h_1 + h_2$ et un champ différence $\chi_- = h_1 - h_2$. Ces nouveaux champs sont compactifiés comme suit :

$$\chi_+ \equiv \chi_+ + 2\pi q_+ R \quad (\text{III.117})$$

$$\chi_- \equiv \chi_- + 2\pi q_- R \quad (\text{III.118})$$

Cependant, les nombres de tours q_+ et q_- ne sont pas indépendants, car $q_+ + q_- = p_1 + p_2 + p_1 - p_2 = 2p_1$ doit être un entier pair. Ainsi, les nouveaux champs ne sont pas compactifiés de manière indépendante, et les fonctions de partition ne factorisent pas comme supposé dans l'équation (III.114). Ceci explique pourquoi certains des résultats suggérés dans les références [21, 24, 25] sont en réalité incorrects.

d Construction de l'état de bord de la reliure du livre

Il est cependant possible de « réparer » le calcul de [21, 24, 25], et de construire explicitement l'état de bord correspondant à la bordure du livre, sans négliger la compactification. Il faut pour cela tenir compte de toutes les conditions de collage sur les nombres de tours entre les $2n$ pages du livre. Un tel travail a été réalisé récemment par Oshikawa[32], et permet de retrouver nos résultats sur le boson libre. Signalons également [35], encore plus récemment.

III.3.6 Vérifications numériques

Nous avons déjà effectué quelques vérifications numériques de nos résultats précédents. Cependant, ces simulations s'étaient cantonnées à des systèmes de fermions libres (chaîne XX, dimères), et il est important d'effectuer des tests plus contraignants de nos formules. Ici nous focalisons notre attention sur la chaîne de Heisenberg anisotrope (chaîne XXZ). Rappelons notre convention pour le Hamiltonien :

$$H = \sum_j \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right) - h \sum_j \sigma_j^z. \quad (\text{III.119})$$

Δ est le paramètre d'anisotropie, et h un champ magnétique extérieur. Nous recherchons le fondamental de H . L'aimantation par site

$$M = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z \quad (\text{III.120})$$

est une quantité conservée, et il est donc possible de travailler dans un secteur d'aimantation M donné. M sera ainsi une fonction (non triviale) de h . Le fondamental $|\psi\rangle$ de la chaîne peut être calculé par la méthode de diagonalisation de Lanczos. Nous sommes allés jusqu'à des tailles $L \sim 32$ à aimantation nulle, et $L \sim 40$ à aimantation $M = 1/2$. L'évaluation de l'entropie de Shannon se fait ensuite sans difficultés.

Nous nous sommes intéressés en priorité à la phase critique $c = 1$, le liquide de Luttinger. Cette phase s'étend sur une région relativement vaste pour $\Delta > -1$. Le rayon de compactification dépend à la fois de Δ et de M [26, 28]. Dans le secteur d'aimantation nulle, R est relié à Δ par la relation

$$R = \sqrt{2 - \frac{2}{\pi} \arccos \Delta} \quad , \quad -1 < \Delta \leq 1. \quad (\text{III.121})$$

Quand $M \neq 0$ la situation est plus complexe, et R doit être déterminé numériquement en résolvant les équations intégrales obtenues par ansatz de Bethe[26, 28, 29].

a Entropie d'intrication

Commençons par présenter les résultats numériques pour l'entropie d'intrication $S = S_1$. Comme pour les modèles de dimères critiques étudiés précédemment, l'entropie vérifie la loi d'aire $S = aL + s_1 + b/L$. La constante sous-dominante qui nous intéresse est extrapolée à partir de cette loi d'échelle. Elle est tracée sur la figure III.10, en fonction de R .

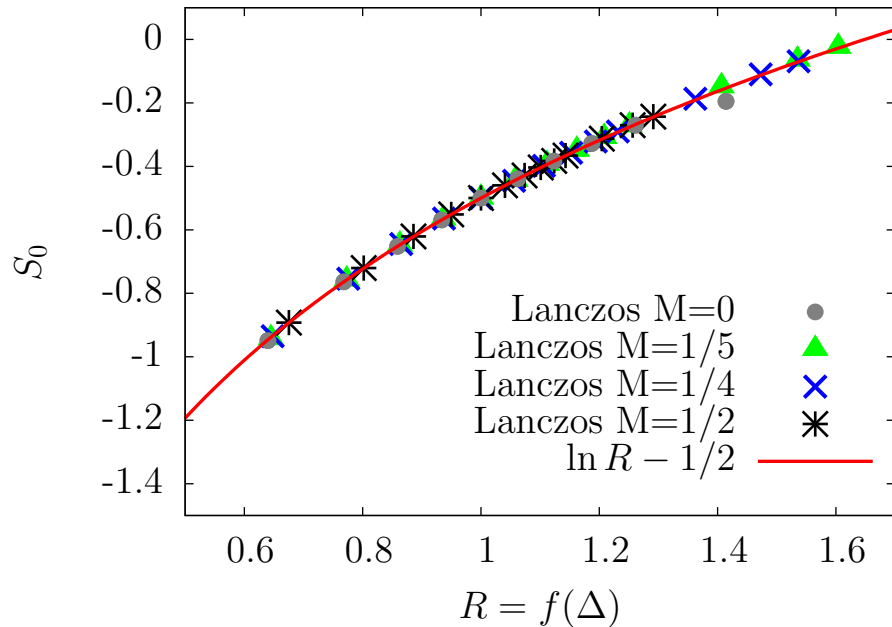


FIGURE III.10 – Constante sous-dominante s_1 de l'entropie de von Neumann pour une chaîne XXZ périodique. Les données numériques sont en excellent accord avec la prédiction analytique.

Les résultats numériques sont en remarquable accord avec notre prédiction analytique $s_1 = \ln R - 1/2$. Signalons que les effets de taille finie augmentent légèrement tout près du point de Heisenberg ($\Delta = 1$, $M = 0$) pour lequel le rayon vaut $R = \sqrt{2}$. Nous attribuons cela aux effets d'opérateurs marginaux présents à ce point où la symétrie $SU(2)$ est restaurée. Ce problème peut habituellement être esquivé en une autre chaîne de spin dite $J_1 - J_2$, voir la sous-section suivante (b). L'évaluation de l'entropie de Shannon semble donc être un moyen très pratique d'accès au rayon de compactification, sans pour autant nécessiter l'implémentation de méthodes numériques plus lourdes, comme le DMRG.

Finissons par quelques commentaires sur le cas massif. Pour $M = 0$ et $\Delta > 1$ le système est dans une phase dite de Néel, caractérisée habituellement par un fondamental deux fois dégénéré. Pour un système de taille finie cette dégénérescence est levée légèrement et le fondamental est approximativement donné par une superposition macroscopique d'états ordonnés. Le résultat pour l'entropie peut être compris en étudiant la limite $\Delta \rightarrow \infty$: le fondamental est alors donné par

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle \right). \quad (\text{III.122})$$

Cet état a pour entropie $S = s_1 = \ln 2$. Le résultat pour la constante sous-dominante est montré dans $\{\mathbf{1}\}$, figure 9. Dans toute la phase $\Delta > 1$, les fluctuations quantiques autour de l'état (III.122) ne génèrent que des contributions extensives, et la constante reste stable à $s_1 = \ln 2$ dans toute la phase. En combinant les résultats dans la phase massive et critique, nous nous attendons donc à ce que la constante sous-dominante de l'entropie saute brusquement de $\ln \sqrt{2} - 1/2$ à $\ln 2$ au point de transition $\Delta = 1$.

b Entropie de Rényi

Nous allons maintenant porter notre attention sur la dépendance en n complète de l'entropie de Rényi. Présentons sans plus attendre le résultat numérique pour la constante sous-dominante. La figure III.11 montre s_n en fonction du paramètre de Rényi pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie $\Delta = -0.4, 0, 0.2, 0.4$. Le point Heisenberg $\Delta = 1$ est remplacé par la chaîne $J_1 - J_2$ au ratio critique $J_2/J_1 \simeq 0.2411$.

On observe que le terme sous-dominant de l'entropie de Rényi suit bien notre prédiction (III.102), mais seulement pour des valeurs de n inférieures à une valeur critique $n = n_c(\Delta)$. On observe par exemple $n_c(\Delta = 1) = 2$, ainsi que $n_c(\Delta = 1) = 4$. Un tel comportement signale une transition de phase, qu'il nous faut comprendre. Nous l'avons déjà mentionnée rapidement lorsque nous discutons le gaz de Dyson-Gaudin, correspondant à $\Delta = 0$.

III.3.7 Transition de phase

a Pourquoi y a-t-il une transition ?

L'équation (III.100) se réduit à une combinaison de facteurs g , et est donc sensible aux effets de bord. Sa dérivation suppose des probabilités gaussiennes. Cependant, elles ne le sont pas strictement au niveau du réseau et d'autres termes sont en général présents. Ils doivent

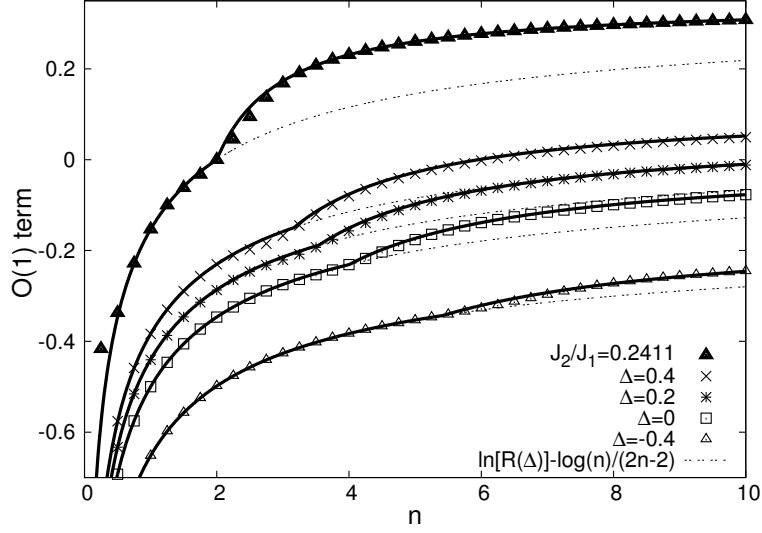


FIGURE III.11 – Constante sous-dominante dans l'entropie en fonction du paramètre de Rényi, ceci pour différentes valeurs de Δ .

respecter à la fois les symétries du réseau et la compactification $h = h + 2\pi r$. En particulier les opérateurs de vertex peuvent jouer un rôle :

$$V_d = \cos\left(\frac{d}{r}h\right). \quad (\text{III.123})$$

Il est connu[27] qu'un tel opérateur va renormaliser à zéro si $d^2 > 2\kappa r^2$. Dans le cas contraire c'est ce terme qui domine, et le champ h va se fixer sur une configuration plate de dégénérescence d . Dans une telle phase les probabilités ne sont plus gaussiennes, et l'équation (III.100) n'a plus de sens. Elle fait intervenir les rigidités κ et $\kappa' = n\kappa$, et l'on s'attend – lorsque $n > 1$ – à ce qu'une transition de phase ait lieu lorsque l'opérateur de vertex le plus pertinent devient marginal en présence d'une rigidité $\kappa' = n\kappa$. D'une certaine manière le fait d'augmenter n peut rendre le système artificiellement massif pour la quantité qui nous intéresse. La valeur critique du paramètre de Rényi est

$$n_c = \frac{d^2}{2\kappa r^2}. \quad (\text{III.124})$$

Signalons aussi qu'une transition dans le volume est a priori attendue pour $d^2 = 4\kappa r^2$. Une telle transition n'influence pas l'équation (III.100). D'une certaine manière la rigidité n'est modifiée qu'au voisinage de la reliure, si l'on reprend l'image du livre. Les feuilles restent critiques quel que soit n .

b Comportement de l'entropie après la transition

Après la transition l'entropie de Rényi va être dominée par les configurations sur lesquelles le champ s'est accroché à l'une des valeurs $|i_{\max}\rangle$. Nous aurons donc

$$S_{n>n_c} \sim \frac{1}{1-n} \ln [d(p_{\max})^n]. \quad (\text{III.125})$$

Le terme sous-dominant sera donc donné par

$$s_{n>n_c} = \frac{1}{1-n} \ln [dg^{2n}], \quad (\text{III.126})$$

où g est le facteur g d'Affleck et Ludwig correspondant à la condition de bord vers laquelle va renormaliser la configuration $|i_{\max}\rangle$. Pour le champ libre il n'y a que deux possibilités : Dirichlet ou Neuman. d dépend par contre du modèle microscopique considéré.

c Vérification numérique : dimères et chaîne XXZ

Les résultats numériques dans la chaîne XXZ à demi-remplissage ont déjà été présentés (figure III.11). d peut être déterminé en étudiant la limite $\Delta \rightarrow \infty$. Les deux configurations $|\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle$ et $|\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle$ deviennent alors les fondamentaux de la chaîne. Ceci montre qu'un opérateur possédant deux minima est présent au niveau microscopique : $d = 2$. Les deux configurations $|i_{\max}\rangle$ sont plates du point de vue de la représentation de hauteur, et le facteur g correspondant sera associé à la condition de bord Dirichlet. Avec $R = 2\kappa r^2$ et $g_D = R^{-1/2}$ nous obtenons finalement la prédiction suivante

$$n_c = 4/R^2 \quad (\text{III.127})$$

$$s_{n<n_c} = \ln R - \frac{1}{2} \frac{\ln n}{n-1} \quad (\text{III.128})$$

$$s_{n>n_c} = \frac{1}{n-1} (n \ln R - \ln 2) \quad (\text{III.129})$$

Une telle expression est bien vérifiée numériquement (III.11). Notons que s_n n'a pas de discontinuité au point de transition n_c . Le même argument reste correct dans la chaîne $J_1 - J_2$, et doit être valide pour n'importe quel liquide de Luttinger possédant le terme « d'umklapp » $\cos(2h/r)$.

Il est aussi possible de jouer sur la dégénérescence d qui intervient dans l'opérateur de vertex le plus pertinent. Pour ce faire revenons au modèle de dimères. Sur réseau carré la configuration la plus probable correspond à tous les sites frontières occupés par des dimères dans A , et une telle configuration n'est pas dégénérée $d = 1$. Sur réseau hexagonal il est possible de changer d en modifiant le remplissage. Par exemple si ρ est l'inverse d'un entier, alors la dégénérescence sera $d = 1/\rho$. Une telle prédiction peut aisément se vérifier numériquement, voir la figure III.12.

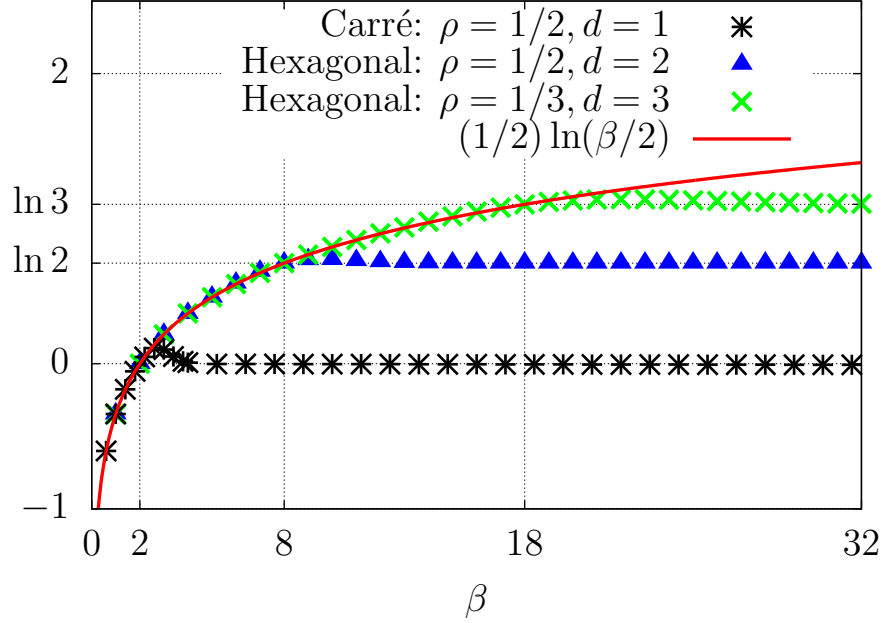


FIGURE III.12 – La transition de phase observée à $n_c = 2$ pour les dimères sur réseau carré à remplissage $1/2$, à $n_c = 8$ pour les dimères sur réseau hexagonal à remplissage $1/2$, et à $n_c = 18$ pour les dimères sur réseau hexagonal à remplissage $1/3$.

III.3.8 Cas ouvert

Forts de notre étude détaillée du cas fermé (le cylindre), nous allons voir que le cas ouvert (la bande) se traite de façon similaire. Nous nous attendons à ce que l'entropie de Rényi suive la loi d'échelle

$$S_n = aL + l_n \ln L + s_n + o(1). \quad (\text{III.130})$$

Le seul terme qui peut être universel dans cette équation est l_n , et c'est lui que nous allons essayer de déterminer par la suite.

a Prédiction analytique

Un certain nombre des résultats que nous avons établis sur le cylindre peuvent être immédiatement appliqués au cas ouvert. C'est le cas de la transition de phase à $n = n_c = d^2/R^2$. C'est aussi vrai de la relation (III.100) avant la transition, et que nous rappelons ici

$$S_n = \frac{1}{1-n} \left[\ln \left(\frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}}{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D} \right) - n \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa}{\mathcal{Z}_\kappa^D} \right) \right]. \quad (\text{III.131})$$

Maintenant tous les $\mathcal{Z}$ sont des fonctions de partition définies sur des bandes infinies.

Avant la transition : Le résultat se déduit immédiatement de la formule de Cardy-Peschel. En effet les contributions logarithmiques à l'énergie libre (donc à l'entropie) ne dépendent que

de la charge centrale, et pas de détails plus fins de la théorie comme le paramètre de Luttinger. On trouve alors le terme logarithmique

$$l_n = -\frac{1}{4} \quad , \quad n < n_c = d^2/R^2. \quad (\text{III.132})$$

C'est le résultat de Fradkin et Moore [21]. Le fait qu'il soit correct n'est pas vraiment une surprise : le terme de Cardy-Peschel ne dépend pas de la rigidité, et l'on peut donc l'oublier dans l'équation (III.131). Signalons aussi que nous avons été légèrement devancés en ce qui concerne l'établissement de ce résultat[35]. La référence [35] rate cependant la transition, que nous allons discuter au prochain paragraphe.

Après la transition Le cas ouvert va ici se révéler plus subtil que le cas fermé. La contribution universelle dans l'entropie de Rényi est encodée dans $p_{\max}$:

$$p_{\max} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{|\langle s | e^{-\tau H} | i_{\max} \rangle|^2}{\langle s | e^{-2\tau H} | s \rangle} \quad (\text{III.133})$$

$$= \frac{Z(\mathbf{U})}{Z(\mathbf{I})} \quad (\text{III.134})$$

$Z(\mathbf{U})$ est la fonction de partition d'une bande semi-infinie avec condition au bord en bas $|i_{\max}\rangle$. Voir la figure III.13.

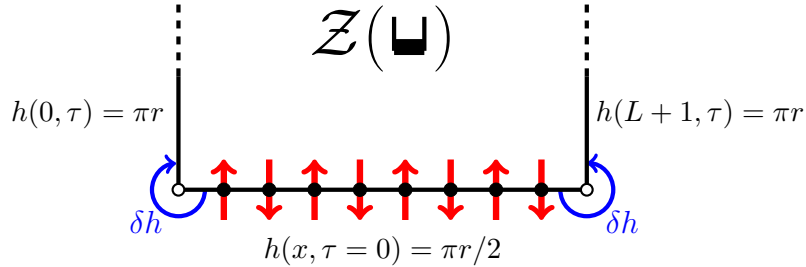


FIGURE III.13 – Shift de hauteur $\delta h = \pi r/2$ pour une bande semi-infinie avec la configuration au bord en bas $|i_{\max}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$.

Le ratio (III.134) est similaire à celui utilisé avant la transition, mais pas exactement identique. Comme précédemment il faut tenir compte de la contribution des coins, qui vont nous fournir un terme $-\frac{1}{4} \ln L$ dans $-\ln p_{\max}$. Cependant, la condition au bord effective à la limite continue ne correspond pas exactement à Dirichlet : il y a un petit shift de hauteur δ entre les arêtes verticales et horizontales de la bande, comme illustré à la figure III.13. Pour tenir compte d'un tel effet, il faut ajouter au champ de hauteur la fonction harmonique

$$h_\delta(x, \tau) = \frac{2\delta}{\pi} \arg(x + i\tau). \quad (\text{III.135})$$

Cette fonction vaut 0 sur le bord horizontal $\tau = 0$, et δ sur le bord vertical. En insérant l'équation (III.135) dans l'action, on trouve la contribution supplémentaire à l'énergie libre :

$$\delta F \sim \frac{\kappa \delta^2}{2\pi^2} \ln L. \quad (\text{III.136})$$

Reste à déterminer la valeur de δ . On peut par exemple utiliser la bosonisation. Les conditions au bord libres sur les spins de bord correspondent à Dirichlet pour le champ libre, et l'on impose $h(x=0, \tau) = h(x=L+1, \tau) = \pi r$ pour s'assurer que les opérateurs de spin s'annulent au bord [33]. La limite continue de la configuration $|i_{\max}\rangle$ correspond à un « accrochage » du champ à l'un des minima du terme $\cos(2h/r)$, dit terme d'umklapp[34]. Ce terme possède deux minima à $h = \pi r/2$ et $h = 3\pi r/2$. Pour ces deux minima la différence de hauteur entre le bord horizontal et le bord vertical est

$$|\delta| = \pi r/2. \quad (\text{III.137})$$

Ce shift peut aussi être calculé exactement au point fermion libre (chaîne XX ou dimère réseau carré), comme expliqué en c. En sommant les contributions de Cardy-Peschel et de l'équation (III.136), nous trouvons finalement le coefficient logarithmique de l'entropie de Rényi.

$$l_n = \frac{n}{n-1} \left(\frac{R^2}{4} - \frac{1}{4} \right) \quad , \quad n > n_c = 4/R^2. \quad (\text{III.138})$$

b Vérifications numériques dans la chaîne XXZ

Nous avons aussi effectué des simulations numériques dans la chaîne XXZ, afin de mettre à l'épreuve nos formules (III.132) et (III.138). Voir aussi [35] pour les données numériques à $n < n_c$. Nos résultats sont présentés à la figure III.14.

Nous observons que le terme l_n s'approche assez nettement de nos prédictions analytiques, même si les effets de taille finie autour de la transition sont très importants. On peut néanmoins obtenir une très bonne estimation de la valeur critique n_c , car les courbes extraites pour des tailles de système différentes se croisent en ce point. Ceci nous pousse à conjecturer que le coefficient du logarithme est lui aussi universel en ce point précis, et ne dépend que du rayon de compactification. Nous n'en avons cependant pas de compréhension théorique pour le moment. A $\Delta = 0$ les calculs numériques sont plus simples, comme expliqué en c. Nous avons donc pu pousser les simulation numériques jusqu'à $L = 40$. Les données redressées (médaillon de la figure III.14) pour plusieurs tailles de systèmes différentes semblent bien converger vers une courbe unique. Ces données indiquent une convergence lente (en $L^{-1/4}$) mais assez convaincante vers une fonction en escaliers. Nous obtenons aussi avec une grande précision

$$l_{n=n_c=1} = -\frac{1}{6}. \quad (\text{III.139})$$

Un tel résultat reste cependant à comprendre analytiquement.

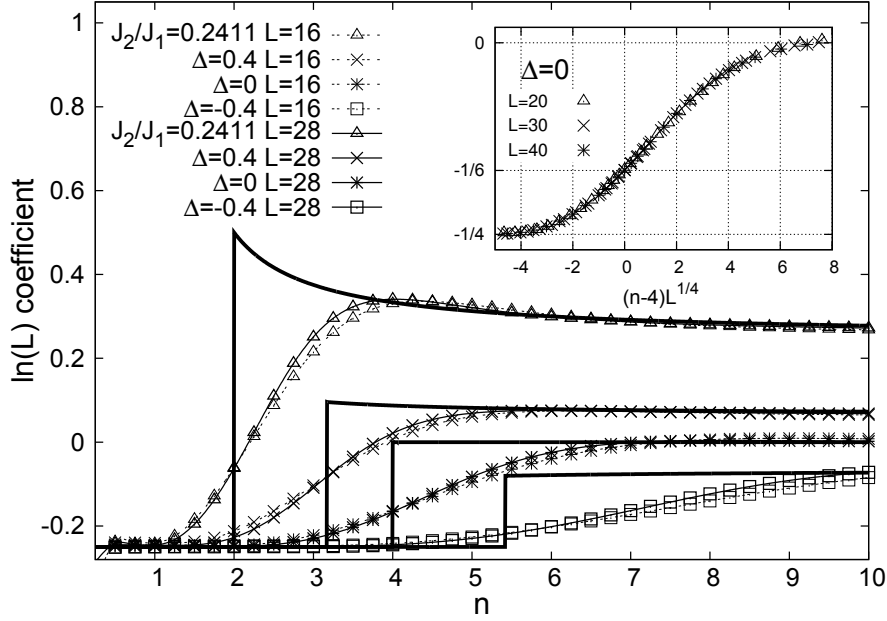


FIGURE III.14 – Terme logarithmique l_n dans l'entropie de Rényi de chaînes XXZ et $J_1 - J_2$. Les données numériques sont extraites par une extrapolation $aL + b \ln L + c + d/L$ pour 4 tailles de système consécutives $L - 6, L - 4, L - 2, L$ ($L = 16$ et $L = 28$ sont considérées ici). Les lignes épaisses sont la prédiction théorique (équations (III.132) et (III.138)). *Médaille* : données redressées $l_{(n-4)L^{1/4}}$ à $\Delta = 0$ au voisinage du point de transition.

c Détails supplémentaires au point fermions libres

Chaîne XX : Au point $\Delta = 0$, p_i est donné par un déterminant de Vandermonde symplectique[30], qu'il est possible de calculer explicitement :

$$p_i = \left(\frac{2}{L+1} \right)^N \left[\det_{1 \leq j, \ell \leq N} \sin \left(\frac{\pi \ell x_j}{L+1} \right) \right]^2 \quad (\text{III.140})$$

$$= \left(\frac{1/2}{L+1} \right)^N \left[\det_{1 \leq j, \ell \leq N} \left(z_j^\ell - z_j^{-\ell} \right) \right]^2 \quad (\text{III.141})$$

$$= \left(\frac{1/2}{L+1} \right)^N \prod_{j=1}^N |z_j - z_j^*|^2 \prod_{1 \leq j < \ell \leq N} |z_j - z_\ell|^2 |z_j - z_\ell^*|^2 \quad (\text{III.142})$$

Comme dans le cas périodique, ces probabilités peuvent s'interpréter comme des facteurs de Boltzmann associés à un système électrostatique. L'énergie d'interaction est donnée à une constante près par

$$E(\{z\}) = - \sum_{1 \leq j < \ell \leq N} \ln |z_j - z_\ell| - \sum_{1 \leq j \leq \ell \leq N} \ln |z_j - z_\ell^*|, \quad (\text{III.143})$$

et la température inverse vaut $\beta = 2$. L'interaction se fait toujours via la loi de Coulomb bidimensionnelle. Les particules (spins up) vivent sur un demi-cercle :

$$z_j = \exp\left(\frac{\pi x_j}{L+1}\right) \quad , \quad x_j \in \{1, 2, \dots, L\}, \quad (\text{III.144})$$

et chaque particule interagit avec sa propre image miroir (z_j^*), les autres ($z_{\ell \neq j}$), ainsi que leurs images miroirs $z_{\ell \neq j}^*$. Un tel gaz est représenté schématiquement à la figure III.15.

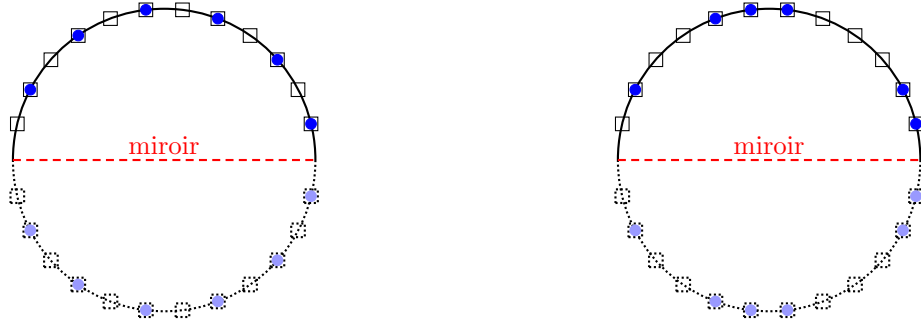


FIGURE III.15 – Gaz de particules interagissant entre elles ainsi qu’avec leur image miroir. Les $L = 12$ sites et $N = 6$ particules bleues se situent au dessus du miroir. *A gauche* : une des 2 configurations $|i_{\max}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$. *A droite* : Une autre configuration, prise au hasard $|i_0\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$.

On peut facilement utiliser la formule (III.140) et l’interprétation subséquente pour calculer $p_{\max}$. Il est intuitivement évident que la configuration la plus probable s’obtient en plaçant les particules le plus loin possible les unes des autres. Dans le langage des spins, une telle configuration (deux fois dégénérée) est donnée à demi-remplissage $N = L/2$ par

$$|i_{\max}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow\rangle \quad \text{ou} \quad |i_{\max}\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots \downarrow\uparrow\rangle, \quad (\text{III.145})$$

et l’on trouve

$$p_{\max} = 2^{-L/2}. \quad (\text{III.146})$$

L’absence de terme logarithmique dans $S_{\infty} = -\ln p_{\max}$ est bien sûr cohérente avec l’analyse précédente, car la contribution due au shift de hauteur va exactement compenser le terme de Cardy-Peschel à $R(\Delta = 0) = 1$.

Dimères sur réseau carré : Le modèle de dimères sur réseau carré a un comportement similaire, bien que nous ne soyons pas parvenu à obtenir une interprétation en termes de gaz sur un cercle. Commençons par déterminer le shift de hauteur. La configuration de probabilité maximale est obtenue en imposant que tous les sites frontières de la figure III.4 soient occupés par des dimères dans A . Cette configuration, contrairement au cas de la chaîne XX, est unique. $p_{\max}$ est alors donné par

$$p_{\max} = \lim_{L_y \rightarrow \infty} \frac{Z(L, L_y/2)^2}{Z(L, L_y)}, \quad (\text{III.147})$$

où $Z(L, h)$ compte le nombre de pavage de dimères sur un réseau carré $L \times h$, et est bien connu depuis Kasteleyn. Après calcul nous trouvons, en posant $\theta_j = \frac{j\pi}{L+1}$

$$p_{\max} = \left[\frac{(1 + \sqrt{2})^{L+1} + (1 - \sqrt{2})^{L+1}}{2\sqrt{2}} \right]^{1/2} \times \prod_{j=1}^{L/2} \left[\cos \theta_j + \sqrt{1 + \cos^2 \theta_j} \right]^{-1} \quad (\text{III.148})$$

En effectuant un développement asymptotique, on montre facilement qu'il n'y a pas de terme logarithmique dans $-\ln p_{\max}$. Ceci signifie que le shift est le même que pour la chaîne XX. Ce shift peut aussi être obtenu en utilisant la correspondance avec le modèle de hauteurs, discuté au chapitre II. Les détails sont présentés à la figure III.16.

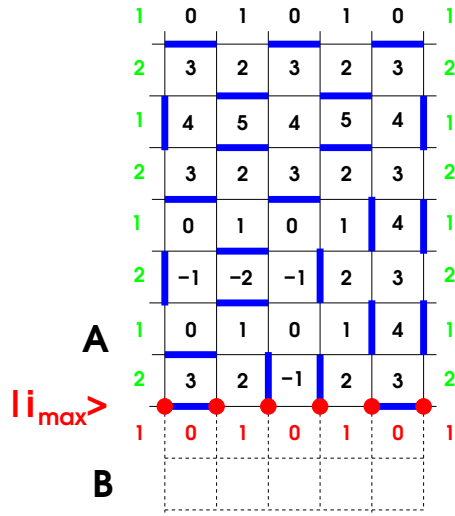


FIGURE III.16 – Configuration $|i_{\max}\rangle$ de probabilité maximale sur réseau carré, ainsi qu'un pavage de dimères compatible dans la région A. Les hauteurs microscopiques sont indiquées sur la figure en unités de $\pi r/2$. La frontière horizontale basse de A a une hauteur moyenne égale à $(0 + 1)/2 = 1/2$ (en rouge). Les frontières verticales ont une hauteur moyenne $(1 + 2)/2 = 3/2$ (en vert). Il y a donc à la limite continue un shift de hauteur $\delta = \pm \pi r/2$ en chacun des coins.

Comme la configuration la plus probable est non-dégénérée, la transition arrive pour la valeur $n_c = d^2/R^2 = 1$ du paramètre de Rényi. La prédiction correspondante pour le terme logarithmique dans l'entropie d'intrication est

$$l_n = \begin{cases} -\frac{1}{4} & , \quad n < 1 \\ 0 & , \quad n > 1 \end{cases} \quad (\text{III.149})$$

Il est amusant de constater que la transition arrive exactement au point von Neumann : un calcul basé sur les répliques (donc valable pour n entier, $n \geq 2$) donne donc un résultat toujours faux, mais le prolongement analytique s'avère néanmoins correct dans la région $n \in]0; 1[$. Nous avons effectué une vérification numérique de l'équation (III.149) pour ce modèle de dimères. Les résultats sont présentés à la figure III.17, et confirment notre analyse.

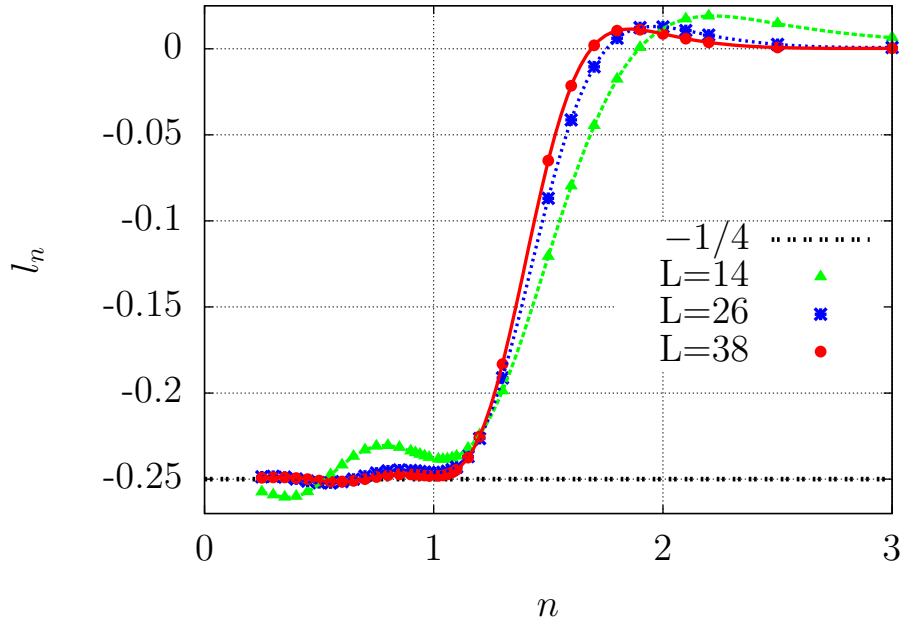


FIGURE III.17 – Extraction numérique du terme logarithmique l_n dans l'entropie de Rényi. Quand $L \rightarrow \infty$, on s'attend à ce que l_n tende vers une fonction en escalier : $l_n = -1/4$ pour $n \leq 1$, et $l_n = 0$ pour $n > 1$.

Signalons finalement une petite différence avec la chaîne XX : $l_{n=n_c}$ semble toujours valoir $-1/4$ et ne diffère donc pas de sa valeur dans la phase $]0; 1[$. La transition ne peut donc pas être déterminée numériquement grâce à un croisement de courbes.

III.4 Modèles minimaux sur l'exemple d'Ising

Après notre étude du boson libre compactifié $c = 1$, il est tentant de s'intéresser à d'autres théories conformes, dont l'action ne peut pas s'écrire aussi explicitement que le champ libre. Nous allons ici considérer les cas des modèles minimaux unitaires, à charge centrale $c < 1$. Un bon exemple est fourni par le modèle d'Ising, mais ce n'est pas le seul que nous allons considérer.

III.4.1 Entropie de Shannon pour elle-même

Nous avons montré que pour une certaine classe de fonctions d'onde critiques, dites de Rokhsar-Kivelson, l'entropie d'intrication pouvait s'exprimer comme l'entropie de Shannon des configurations de spin à la frontière entre A et B . Mais l'on peut aussi s'intéresser à l'entropie de Shannon d'une chaîne de spin en oubliant le lien avec les fonctions d'onde de Rokhsar-Kivelson, ou même quand un tel lien n'est plus vraiment valide. Nous allons considérer l'entropie de

« Rényi-Shannon »

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln \left(\sum_i p_i^n \right) \quad , \quad p_i = |\langle i | \psi \rangle|^2. \quad (\text{III.150})$$

$|\psi\rangle$ va être le fondamental (normalisé) d'une chaîne de spin, ou bien le vecteur propre dominant de la matrice de transfert d'un modèle dans la même classe d'universalité. Nous allons comme précédemment nous intéresser aux lois d'échelle que suit une telle quantité, et rechercher des quantités universelles dans les termes sous-dominants.

Une telle quantité dépend de la base, mais sonde le système dans son ensemble. Il est raisonnable d'espérer que les corrections sous-dominantes vont être universelles, et d'une certaine manière ne plus dépendre de la base. Nous allons voir aussi que l'entropie de Rényi-Shannon est un moyen commode de déterminer une transition de phase quantique.

Notons aussi que l'entropie de Shannon de la chaîne d'Ising correspond aussi à l'entropie d'intrication d'une fonction d'onde *RK*-Ising sur un cylindre infini coupé en deux, mais où l'on a artificiellement « doublé » la frontière. Ce dédoublement est rendu nécessaire par le fait que le modèle d'Ising ne satisfait pas une contrainte de coeur dur, sur laquelle repose l'argument présenté en III.2. Ce point de vue ne va pas nous intéresser ici, voir **{1}** pour de plus amples détails.

III.4.2 Cylindre infini pour Ising : l'échec des répliques

a Réalisation microscopiques

Nous allons ici étudier notre entropie dans le modèle minimal le plus simple que l'on puisse imaginer : le modèle d'Ising. Afin de s'assurer de l'universalité de nos calculs, nous allons en considérer trois réalisations sur réseau :

- La chaîne d'Ising quantique en champ transverse, dont nous avons déjà discuté.
- Le modèle d'Ising classique sur réseau carré.
- Le modèle d'Ising classique sur réseau triangulaire.

Pour ces deux derniers nous allons calculer p_i comme

$$p_i = \frac{\langle G|i \rangle \langle i|D \rangle}{\langle G|D \rangle}, \quad (\text{III.151})$$

où $|G\rangle$ (resp. $|D\rangle$) est le vecteur propre dominant à gauche (resp. droite) de la matrice de transfert. Notons que nous allons diagonaliser ces matrices de transfert très naïvement, en les écrivant dans leur espace de Hilbert total, de dimension 2^L .

b Quelques mots sur la chaîne

C'est sur cette réalisation que nous allons pousser les simulations numériques le plus loin. Rappelons notre convention pour le Hamiltonien

$$H = -\mu \sum_{j=1}^L \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=1}^L \sigma_j^z. \quad (\text{III.152})$$

On impose des conditions aux limites périodiques $\sigma_{L+1}^x = \sigma_1^x$. Ce Hamiltonien est proportionnel au logarithme de la matrice de transfert d'un modèle d'Ising fortement anisotrope sur réseau carré. Il est bien connu qu'un tel modèle est en correspondance avec un modèle de fermions libres. On le montre à l'aide d'une transformation de Jordan-Wigner. Le Hamiltonien qui en résulte peut alors être diagonalisé par une transformation de Bogoliubov. Comme expliqué dans l'annexe de l'article {2}, il est alors possible d'obtenir chaque probabilité comme un déterminant $L \times L$:

$$p_i = |\langle i | \psi \rangle|^2 = p(\sigma_1^z, \sigma_2^z, \dots, \sigma_L^z) = \det M. \quad (\text{III.153})$$

Les éléments de matrice sont donné par

$$M_{j\ell} = \frac{1}{2} + \frac{\sigma_j^z}{2L} \sum_{k \in K} \cos[k(j-l) + 2\theta_k] \quad (\text{III.154})$$

$$K = \left\{ \frac{(2m+1)\pi}{L}, m = 1, \dots, L \right\} \quad (\text{III.155})$$

$$\exp(2i\theta_k) = \frac{1 + \mu \exp(ik)}{\sqrt{1 + 2\mu \cos k + \mu^2}} \quad (\text{III.156})$$

Notons qu'au point critique cette expression se simplifie :

$$M_{j\ell} = \frac{1}{2} \delta_{j\ell} + \frac{(-1)^{j-\ell} \sigma_j^z}{2L \sin \left[\frac{\pi}{L} \left(j - \ell + \frac{1}{2} \right) \right]} \quad (\text{III.157})$$

Il est important de remarquer que les configurations classiques des spins sont mesurées dans la base des états propres de σ^x . Cependant, les entropies dans les deux bases sont reliées par la relation

$$S_n^{(x)}(\mu) = S_n^{(z)}(1/\mu) + \ln 2. \quad (\text{III.158})$$

On peut s'en convaincre en utilisant une transformation de Kramers-Wannier (voir encore {1}).

c Loi d'échelle pour l'entropie de Shannon au point critique

Nous présentons ici nos résultats numériques pour l'entropie de Shannon. Voir la figure III.18.

Comme anticipé celle suit une loi d'aire

$$S_1(L) = aL + s_1 + \mathcal{O}(1/L). \quad (\text{III.159})$$

Chaque modèle microscopique correspond à un a différent. s_1 est par contre indépendant du modèle, et très probablement universel. Pour extraire s_1 avec la plus grande précision possible nous avons calculé l'entropie jusqu'à des tailles^j $L = 44$, et ajusté les données sous la forme

$$S(L) = \sum_{\alpha=-1}^q c_\alpha L^{-\alpha}. \quad (\text{III.160})$$

j. Pour ce faire nous avons utilisé les symétries supplémentaires du problème : invariance par translation, par réflexion, et secteur de parité. Le nombre de configurations se réduit ainsi à $2^L/(4L)$. Chaque déterminant se calcule en un temps $\propto L^3$, si bien que le calcul de l'entropie a pour complexité $\propto L^2 2^L$. Notre plus grande taille, $L = 44$, a nécessité environ 1000 heures de CPU sur une machine parallèle.

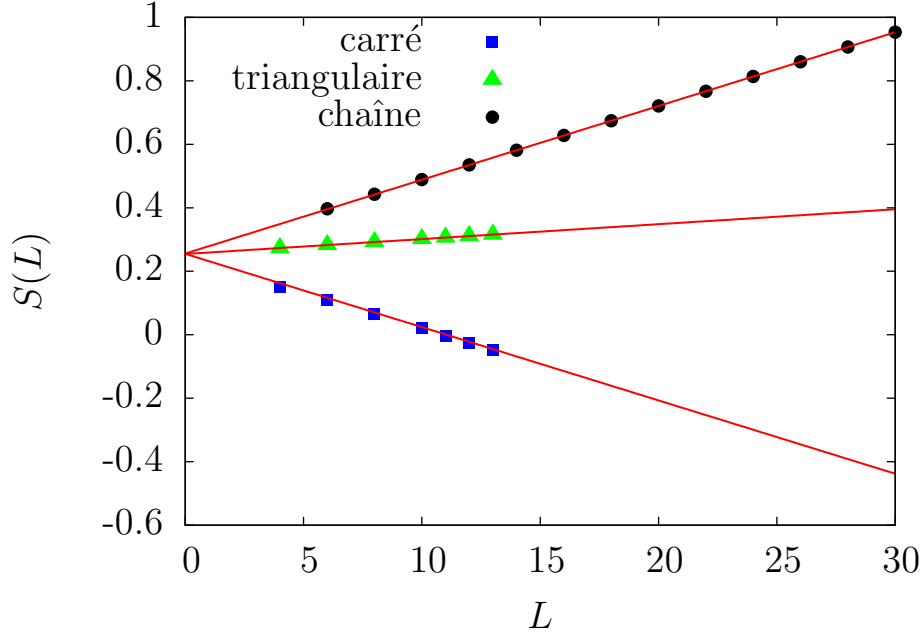


FIGURE III.18 – Entropie de Shannon pour trois réalisations discrètes de la classe d’universalité d’Ising. Les trois suivent bien la loi d’aire, et leurs ordonnées à l’origine sont identiques. On a soustrait un terme linéaire $-0.4 \times L$ à toutes les courbes afin d’améliorer la lisibilité.

Pour différentes valeurs de q entier, $q \leq 5$. Notre meilleure estimation est

$$s_1 \simeq 0.2543925(5). \quad (\text{III.161})$$

Nous ne sommes pas parvenus à comprendre ce nombre, en théorie conforme. Nous allons expliquer par la suite en quoi il est non-trivial.

d Influence de la base

Il est naturel de se demander à quel point la valeur s_1 que nous venons de calculer peut-être influencée par le choix de la base. Nous avons d’ailleurs déjà vu que les entropies de l’équation III.158 diffèrent d’un facteur $\ln 2$ au point critique. Evaluons maintenant l’entropie dans une autre base, dépendant d’un paramètre ξ . On définit les états

$$|\uparrow, \xi\rangle = \cos \xi |\uparrow\rangle_x + \sin \xi |\downarrow\rangle_x \quad (\text{III.162})$$

$$|\downarrow, \xi\rangle = -\sin \xi |\uparrow\rangle_x + \cos \xi |\downarrow\rangle_x \quad (\text{III.163})$$

$\xi = 0$ correspond à la base des états propres des σ^x , et $\xi = \pi/4$ correspond à la base des états propres des σ^z . L’angle ξ permet donc d’interpoler entre ces deux bases. En évaluant numériquement le terme sous-dominant $s_1(\xi)$ de l’entropie, on trouve le résultat suivant :

$$s_1(\xi) = \begin{cases} s_1 & , \quad 0 \leq \xi < \pi/4 \\ s_1 - \ln 2 & , \quad \xi = \pi/4 \end{cases} \quad (\text{III.164})$$

Un tel comportement rappelle ce que nous avons obtenu pour l'intrication géométrique en II.5.1. L'interprétation en est la même : la base des σ^x correspond à un point fixe stable du groupe de renormalisation, et la base des σ^z à un point fixe instable. Ainsi, même si l'entropie de Shannon dépend de la base, son terme sous-dominant n'y est plus vraiment sensible, et ceci renforce l'idée que s_1 est un nombre universel.

e Transition de phase quantique

Nous étudions ici le comportement du terme sous-dominant s_1 , en fonction de μ . Les données numériques, présentées à la figure III.19, sont compatibles avec une fonction en escaliers : $s_1(\mu < 1) = 0$ et $s_1(\mu > 1) = \ln 2$. Ces deux valeurs peuvent être partiellement comprises en étudiant les deux limites $\mu \rightarrow \infty$ et $\mu \rightarrow 0$.

- Pour $\mu \rightarrow 0$ le fondamental est donné par $|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle_z$ et S_1 vaut alors 0.
- Pour $\mu \rightarrow \infty$, on a $|\psi\rangle = 2^{-1/2} (|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle_x + |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle_x)$. L'entropie S_1 vaut alors $\ln 2$.

Dans les deux cas, les fluctuations quantiques qui s'ajoutent lorsque l'on s'écarte de ces limites ne contribuent qu'au terme extensif.

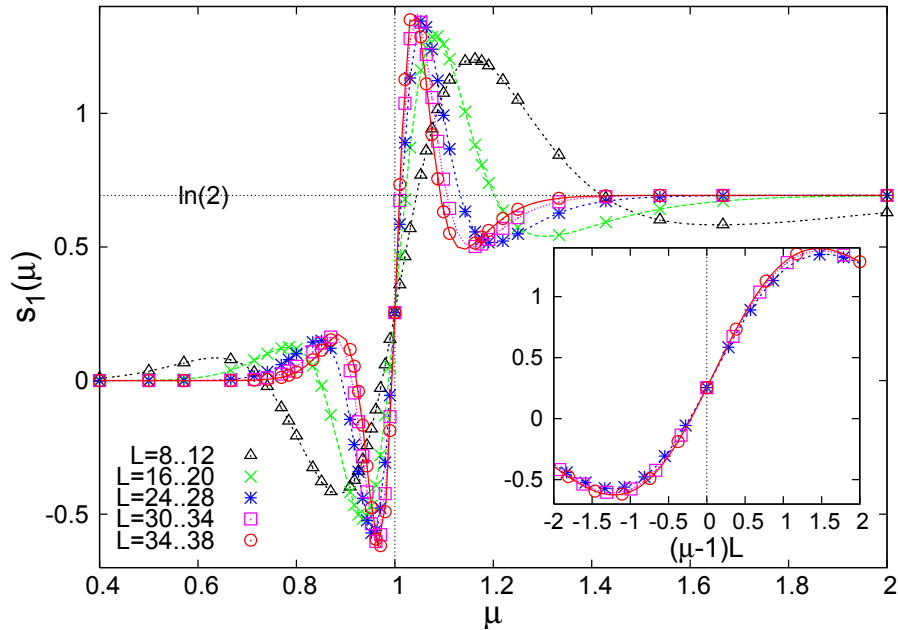


FIGURE III.19 – Constante sous-dominante $s_1(\mu)$ de l'entropie de Shannon en fonction de μ . Le point critique correspond à $\mu = 1$. *Médaille* : données redressées $s_1([\mu - 1]L)$ pour différentes tailles de système.

Ce scénario est confirmé par le médaillon de la figure, où l'on a tracé $s_1([\mu - 1]L)$. On observe que ces données redressées se placent sur la même courbe, pour différentes valeurs de μ et L au voisinage du point critique. Une telle loi d'échelle est attendue : il est bien connu que la longueur de corrélation du modèle d'Ising diverge comme $\xi(\mu) \sim |\mu - 1|^{-1}$.

f Entropie de Rényi au point critique

Nous allons ici extraire numériquement la constante sous-dominante dans l'entropie de Rényi au point critique, et essayer de comprendre analytiquement certains résultats. Ceux-ci sont résumés à la figure III.20.

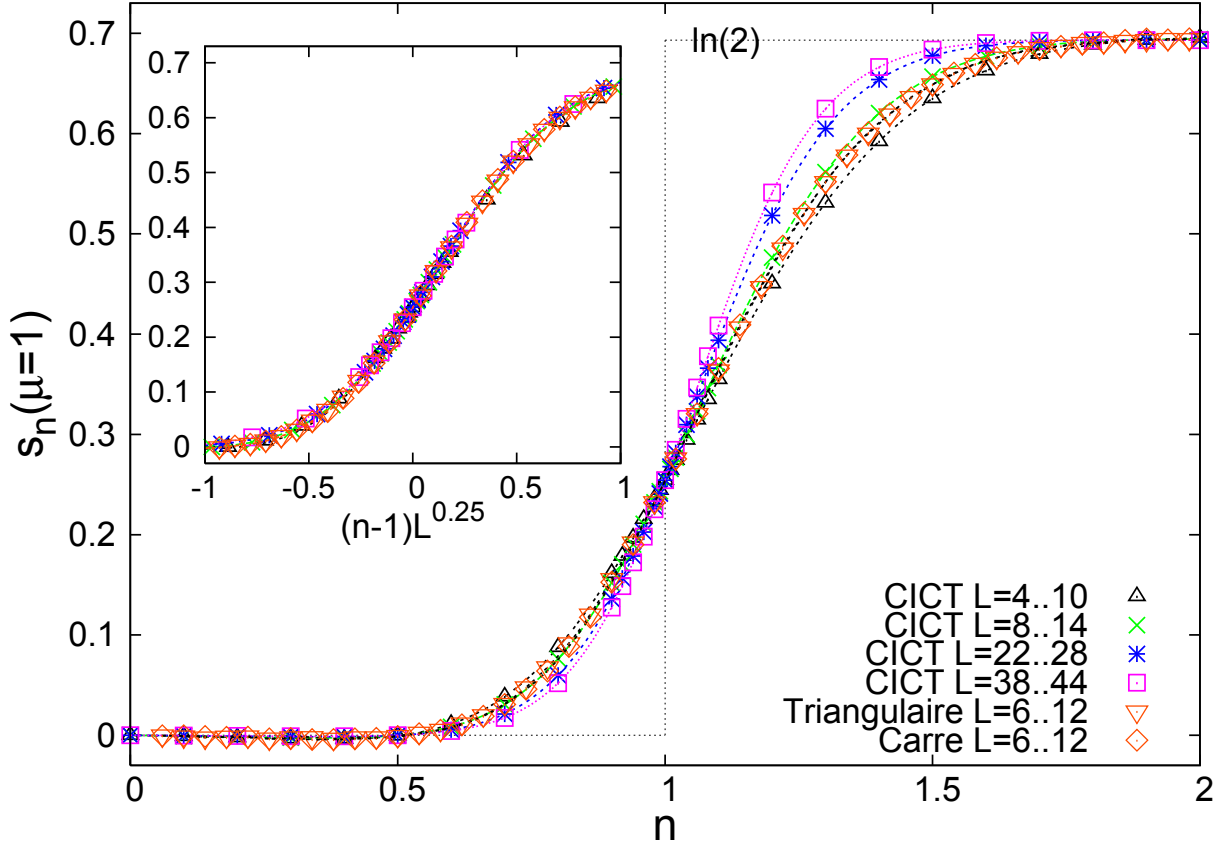


FIGURE III.20 – Constante sous-dominante $r_n(\mu = 1)$ dans l'entropie de Rényi au point critique, pour trois réalisations microscopiques dans la classe d'universalité d'Ising, et différentes tailles de système. *Médaille* : Données redressées en fonction de $(n - 1)L^{1/4}$. Elles semblent toutes se fondre sur une même courbe, ce qui corrobore l'hypothèse d'une transition de phase à $n = 1$.

Le point $n = 1/2$: Cette valeur correspond à un livre d'Ising à une feuille, et peut donc être traité exactement. À ce point l'entropie de Rényi est donnée par

$$S_{1/2}(L) = 2 \ln \left(2^{L/2} \langle \text{free} | \psi \rangle \right) \quad (\text{III.165})$$

$$= 2 \ln ({}_z \langle \uparrow \uparrow \dots \uparrow | \psi \rangle) \quad (\text{III.166})$$

L'état libre dans la base des σ^x correspond à un état où tous les spins sont $\uparrow$ dans la base des σ^z . Le produit scalaire peut alors être obtenu comme un cas particulier des équations (III.153) et (III.157). Le déterminant obtenu est anti-circulant, et peut être calculé exactement. On trouve finalement l'expression suivante pour l'entropie

$$S_{1/2}(L, \mu = 1) = L \ln 2 + 2 \sum_{k=1}^{L/2} \ln \left[\cos \left(\frac{(2k-1)\pi}{4L} \right) \right]. \quad (\text{III.167})$$

La constante sous-dominante s'évalue facilement par la formule d'Euler-Maclaurin, et l'on trouve $s_{1/2} = 0$. On reconnaît bien entendu le facteur g associé à la condition de bord fixe pour Ising $g_{\text{fixe}} = 1$.

Le point $n \rightarrow \infty$: Ce point correspond aussi à un facteur g , mais celui associé à la condition de bord libre $g_{\text{libre}} = 2^{-1/2}$. La constante sous-dominante dans l'entropie devient $s_{\infty} = 2 \ln g_{\text{libre}} = \ln 2$.

Le régime $n \geq 2$: On observe sur la figure III.20 que la constante sous-dominante est dans ce cas très proche de $\ln 2$. Nous avons par exemple obtenu $|s_2 - \ln 2| \simeq 10^{-8}$. Comme pour le liquide de Luttinger, l'entropie de Rényi est dominée dans ce régime par p_{max} . Par exemple dans la base z , et du point de vue du terme sous-dominant

$$S_n^{(z)} \sim \frac{1}{1-n} \ln [p(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle_z)^n]. \quad (\text{III.168})$$

Le terme sous-dominant associé $\{\mathbf{1}\}$ est $s_n^{(z)} = \ln g_{\text{free}} = 0 \ \forall n \geq 2$, d'où l'on déduit $s_n = s_n^{(x)} = \ln 2$. Ceci a d'importantes conséquences : si l'on tente de calculer l'entropie de Rényi en utilisant la méthode des répliques (pour n entier, $n \geq 2$) on va trouver $s_n = \ln 2 \ \forall n$. L'extrapolation pour n quelconque va nous donner[24] $s_1 = \ln 2$, ce qui est incorrect. Les répliques ne sont donc d'aucune aide pour calculer la constante au point Shannon $n = 1$.

Comportement à proximité de $n = 1$: Les résultats en fonction du paramètre n sont assez similaires à ceux de la figure III.19. Les courbes à taille finie interpolent entre 0 et $\ln 2$, avec une pente à $n = 1$ qui augmente avec la taille du système. Les courbes numériques à taille finie se croisent toutes au point $n = 1$, avec une grande précision. Il semble aussi possible de redresser toutes les courbes les unes sur les autres, en traçant la constante sous-dominante en fonction de $(n-1)L^{1/4}$ (voir le médaillon de la figure III.20). Le fait que tous les modèles microscopiques se fondent sur une même courbe est une indication forte que celle-ci est universelle. Signalons toutefois que la barre d'erreur sur l'exposant $\sim L^{1/4}$ est particulièrement grande et difficile à estimer. On ne peut donc pas formellement exclure que nos données numériques convergent très lentement vers une courbe limite continue.

Pour résumer, il semble que la constante sous-dominante au point critique ne puisse prendre que trois valeurs :

$$s_n(\mu = 1) = \begin{cases} 0 & , \ n < 1 \\ 0.2543925(5) & , \ n = 1 \\ \ln 2 & , \ n > 1 \end{cases} \quad (\text{III.169})$$

Tout se passe donc comme si le paramètre n de Rényi agissait comme une perturbation pertinente au sens du groupe de renormalisation. Pour $n > 1$ l'entropie est attirée par l'état de bord correspondant à $n \rightarrow \infty$, ici fixe. Pour $n < 1$ l'entropie est au contraire attirée par l'état de bord correspondant à $n = 1/2$, ici libre. Le point $n = 1$ est de ce point de vue exactement marginal, et donc plus compliqué. Un tel comportement contraste très fortement avec celui du boson libre, pour lequel nous avons obtenu une courbe qui dépend continûment de n . Un calcul analytique de la constante au point Shannon serait souhaitable, mais le fait que les répliques ne peuvent pas marcher rend l'étude de ce point d'autant plus difficile. Toutes nos tentatives sont restées pour l'instant infructueuses.

III.4.3 Quelques mots sur les modèles RSOS

Les modèles RSOS (pour « restricted solid on solid ») sont des modèles statistiques sur réseau qui généralisent le modèle d'Ising, et réalisent toute la série des modèles minimaux unitaires à leur point critique. Un modèle RSOS pour un entier $k \geq 2$ sur un réseau carré est la donnée de configurations de hauteur h_j en chacun des sites (noeuds) j du réseau (voir la figure III.21 à gauche). Les configurations microscopiques de hauteurs sont des configurations d'entiers $h_j \in \{1, \dots, k\}$ sur chacun des sites. L'on impose la « restriction » supplémentaire

$$|h_j - h_{j'}| = 1 \quad \text{si } j \text{ et } j' \text{ sont des sites plus proches voisins.} \quad (\text{III.170})$$

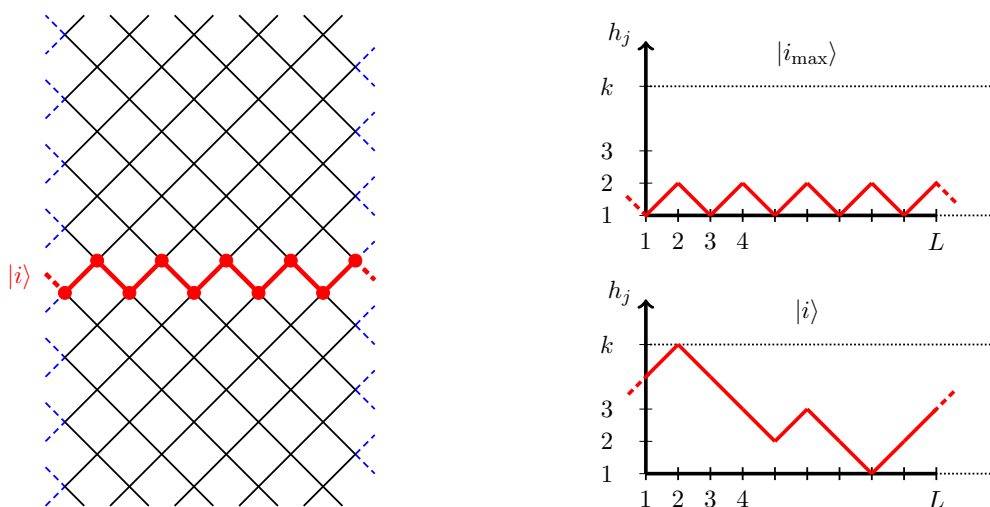


FIGURE III.21 – *A gauche* : Un modèle RSOS sur réseau carré avec conditions aux limites périodiques selon x . Les degrés de libertés (les hauteurs h_j) vivent sur les noeuds j du réseau. Pour deux noeuds j et j' plus proches voisins $|h_j - h_{j'}| = 1$. Les liens en pointillés bleus représentent les conditions aux limites périodiques. *En haut à droite* : configuration des hauteurs à la frontière de probabilité maximale $|i_{\max}\rangle = |1, 2, 1, 2, \dots, 1, 2\rangle$. *En bas à droite* : une configuration de hauteur prise au hasard.

$k = 3$ correspond à Ising. La limite continue au point critique est le modèle minimal rationnel $\mathcal{M}_{k+1,k}$, et l'on peut calculer l'entropie de Rényi par diagonalisations exactes^k. Le comportement du terme sous-dominant est assez similaire au cas d'Ising, avec un croisement des courbes au point $n = 1$ qui signale une singularité. L'entropie prend pour chaque valeur de k une valeur non triviale, les résultats numériques sont résumés à la table III.1. Ces données numériques au

k	$s_1(k)$
2	0
3	0.2543925
4	0.458(2)
5	0.620(5)
6	0.766(5)

TABLE III.1 – Résultats numériques pour le terme sous-dominant dans l'entropie de Shannon des modèles RSOS. Les résultats sont compatibles avec une forme de type $s_1(k) = \ln(ak + b)$.

point von Neumann sont compatibles avec une forme $s_1 = \ln(ak + b)$, mais ces nombres sont probablement au moins aussi difficiles à comprendre que pour le modèle d'Ising.

Bien que nous n'ayons pas mené d'étude détaillée de ces courbes, signalons que la limite $n \rightarrow \infty$ est de nouveau liée à un facteur g d'Affleck-Ludwig. On vérifie en effet que la configuration de probabilité maximale est

$$|i_{\max}\rangle = |1, 2, 1, 2, \dots, 1, 2\rangle. \quad (\text{III.171})$$

Elle est représentée sur la figure III.21, en haut à gauche. Un tel état correspond à la limite continue à la condition de bord invariante conforme qui possède le plus petit facteur g , et est connue pour les modèles RSOS. On obtient

$$s_{\infty}(k) = -\ln \left[2 \left(\frac{2}{k(k+1)} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{\pi}{k+1} \right) \sin \left(\frac{\pi}{k} \right) \right]. \quad (\text{III.172})$$

Il semble donc que tous les modèles minimaux peuvent difficilement être étudiés par les répliques. Encore une fois le paramètre de Rényi agit comme une perturbation pertinente, qui va faire flotter le système vers une condition au bord invariante conforme.

III.4.4 Autres géométries

Il est aussi possible de s'intéresser à d'autres géométries, en revenant sur l'exemple d'Ising. Nous en présentons très brièvement deux. Contrairement au cylindre, ces géométries possèdent des coins, et les corrections sous-dominantes à la loi d'aire vont plutôt prendre la forme de logarithmes.

k. Un grand merci à Jérôme Dubail et Andreas Läuchli pour leurs rapides simulations numériques, et les discussions éclairantes qui s'en sont suivies.

a Cas ouvert

Le cas ouvert pour la chaîne d'Ising a été étudié dans une lettre récente[35]. Il y a été observé un comportement similaire au nôtre{2} pour le terme logarithmique. En notant $F_n = -\ln(\sum_i p_i^n)$ et f_n le terme sous-dominant logarithmique, on obtient

$$f_n = \begin{cases} -n/8 & , \quad n < 1 \\ 0 & , \quad n = 1 \\ 3n/8 & , \quad n > 1 \end{cases} \quad (\text{III.173})$$

Bien entendu, la valeur 0 à $n = 1$ est fixé par la normalisation des probabilités. La valeur du terme sous-dominant à l'entropie de Shannon est $-\partial f_n / \partial n|_{n=1}$, et est encore un nombre non trivial. Dans la phase $n > 1$, f_n est attirée par la condition au bord associée à $n \rightarrow \infty$. Dans la phase $n < 1$ elle est attirée par la condition au bord associée à $n = 1/2$.

Les calculs numériques[35] ont été réalisés dans la base des états propres des σ_j^x , c'est à dire la « bonne » base du point de vue de la théorie continue. L'entropie dans la « mauvaise » base (σ_j^z) n'est plus reliée simplement à l'autre, comme pour le cylindre (équation (III.158)). Passons outre cette difficulté et évaluons l'entropie dans la mauvaise base. On obtient alors un résultat similaire : le terme sous-dominant logarithmique devient

$$\tilde{f}_n = \begin{cases} 3n/8 & , \quad n < 1 \\ 0 & , \quad n = 1 \\ -n/8 & , \quad n > 1 \end{cases} \quad (\text{III.174})$$

Par rapport à l'équation (III.173), le rôle des deux conditions de bord ont été inversés.

b Entropie de Shannon d'une sous-chaîne

Un autre possibilité afin de générer des bords est d'étudier l'entropie de Shannon restreinte à une partie A de la chaîne de spin, de taille L_A . Par exemple, on peut considérer l'entropie de Shannon d'une région de taille finie L_A plongée dans une chaîne infinie $L \rightarrow \infty$. Pour une chaîne d'Ising les éléments de la matrice dont il nous faut calculer le déterminant sont particulièrement simples

$$M_{j\ell} = \frac{1}{2}\delta_{j\ell} + \frac{(-1)^{j-\ell}\sigma_j^z}{2\pi(j-\ell+\frac{1}{2})}, \quad (\text{III.175})$$

et le calcul numérique de l'entropie de Shannon est aisé. Nous obtenons de nouveau une loi d'échelle du type

$$S_n = aL_A + l_n \ln L_A + \mathcal{O}(1), \quad (\text{III.176})$$

et nous extrayons numériquement le coefficient l_n du logarithme. Le résultat viole une fois de plus les répliques, comme on peut l'observer à la figure III.22.

Certains des aspects de cette courbe peuvent être compris, comme nous allons le voir.

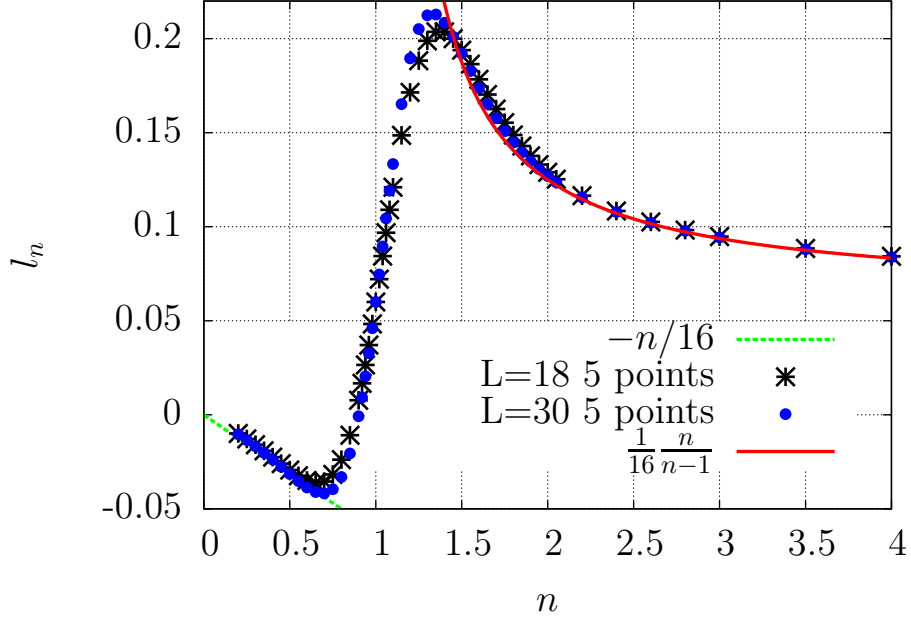


FIGURE III.22 – Terme logarithmique dans l’entropie de Rényi pour deux tailles $L = 18$ et $L = 30$.

Le régime $n > 1$: Dans cette région, nous observons que l’entropie de Rényi, en ce qui concerne son terme logarithmique, est dominée par $p_{\max}$:

$$S_n \sim \frac{1}{1-n} \ln p_{\max}^n = -\frac{n}{n-1} \ln p_{\max}, \quad (\text{III.177})$$

et $p_{\max}$ est donné par le déterminant

$$p_{\max} = p(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle_z) = \det_{j,\ell} \left(\frac{1}{2} \delta_{j\ell} + \frac{(-1)^{j-\ell}}{2\pi [j-\ell + \frac{1}{2}]} \right). \quad (\text{III.178})$$

Un tel déterminant est dit de Toeplitz, ses éléments de matrice dépendent uniquement de $j-\ell$. Il est souvent possible d’obtenir les asymptotiques de tels déterminants¹. Celui qui nous intéresse a d’ailleurs déjà été étudié[37, 38]. Le terme logarithmique dans $-\ln p_{\max}$ vaut $l_{\infty} = \frac{1}{16}$. Dans toute la région nous avons donc

$$l_n = \frac{1}{16} \frac{n}{n-1} \quad , \quad n > 1. \quad (\text{III.179})$$

1. Les éléments de matrice peuvent être interprétés comme les coefficients de Fourier d’une certaine fonction, que l’on appelle en général *symbole* : $A_{j-\ell} = A_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(q) e^{-inq} dq$. Si le symbole est suffisamment régulier, n’a pas de zéros ni de singularités, la version forte du théorème de Szëgo permet d’obtenir un développement asymptotique du déterminant. Certains types de singularités peuvent être traités dans le cadre général de la conjecture de Fisher-Hartwig, et c’est le cas ici pour $p_{\max}$. Voir la référence [37] pour le développement asymptotique, et [38] pour la preuve.

Signalons aussi que le terme logarithmique n'est présent qu'au point critique, et peut être retrouvé par des arguments de théorie conforme. $p_{\max}$ est donné à la limite continue par le rapport de deux fonctions de partitions

$$p_{\max} = \frac{\mathcal{Z}_{\text{b.l.}}}{\mathcal{Z}}, \quad (\text{III.180})$$

représentées à la figure III.23.



FIGURE III.23 – Fonctions de partition de l'équation III.180. *A gauche* : Fonction de partition d'un système infini avec un bord libre au milieu, de taille L_A . Il y a deux angles 2π de Cardy-Peschel aux deux extrémités. *A droite* : Fonction de partition d'un système infini sans bord.

Au numérateur, il faut tenir compte de la contribution (au sens de Cardy-Peschel) de deux angles 2π , situés aux deux extrémités. En terme d'énergie libre $-\ln \mathcal{Z}$, ils contribuent pour un terme $2 \times \frac{c}{16} \ln L$. On retrouve bien $l_\infty = c/8 = 1/16$.

Le régime $n < 1$: Ce régime est plus difficile à appréhender aussi bien analytiquement que numériquement. Il requiert donc une analyse plus poussée, que nous n'avons pas effectuée.

Voisinage de $n = 1$: On observe à la figure III.22 que la pente au voisinage de ce point augmente avec les tailles de systèmes considérées. Nous avons aussi observé qu'il était possible de placer les courbes les unes sur les autres, quand elles sont tracées en fonction de $(n - 1)L^{1/2}$, au voisinage de $n = 1$. Un tel comportement implique que s_n doit être discontinue en $n = 1$ à la limite thermodynamique. Signalons que l'entropie prend aussi une valeur particulière au point Shannon. Notre meilleure estimation numérique est

$$l_1 \simeq 0.060019(5). \quad (\text{III.181})$$

III.5 Conclusion

Nous allons maintenant résumer les résultats, et les discuter quelque peu. Pour ce faire, il nous faut faire la distinction entre le cas du boson libre et celui des modèles minimaux.

Boson libre : Nous avons étudié en détail l'entropie d'intrication de fonction d'onde de Rokhsar-Kivelson et identifié les contributions universelles à celle-ci, en utilisant diverses méthodes analytiques et numériques. Ce sujet a attiré l'attention de plusieurs groupes depuis l'article de Fradkin et Moore[21]. En plus de nos travaux {1} et {5}, citons aussi[24, 25, 32, 35]. On peut maintenant considérer que les choses sont assez bien comprises. Les points suivants méritent d'être mis en évidence :

- Nous avons établi que l'entropie d'intrication de fonctions d'onde critiques bidimensionnelles était donnée par l'entropie de Shannon d'une chaîne de spin. Une telle correspondance n'est pas seulement utile pour effectuer des simulations numériques. Elle permet aussi d'obtenir quelques résultats exacts, et de mieux comprendre le lien avec les théories conformes qui décrivent ces fonctions d'onde à la limite continue.
- Pour des fonctions d'onde de dimères quantiques et leurs généralisations, nous avons obtenu analytiquement et numériquement la contribution sous-dominante universelle à l'entropie de Rényi dans la géométrie du cylindre

$$s_n = \ln R - \frac{1}{2} \frac{\ln n}{n-1}. \quad (\text{III.182})$$

Une telle expression est intéressante car elle fait à la fois apparaître le rayon de compactification (un paramètre fin de la théorie sous-jacente), et une dépendance hautement non triviale en n . Ce paramètre de Rényi peut aussi être vu comme un moyen de se déplacer sur la ligne critique du liquide de Luttinger. Une telle méthode pour déformer une fonction d'onde tout en préservant sa criticité mériterait d'être étendue à d'autres systèmes éventuellement plus compliqués.

- Dans le langage des chaînes de spins, l'entropie de Shannon est un moyen commode de mesurer le rayon de compactification. Celui-ci peut en effet être extrait en étudiant cette entropie pour quelques tailles consécutives de la chaîne. Cette méthode est donc particulièrement adaptée aux diagonalisations exactes.
- Nous avons aussi mis en évidence une transition de phase dans l'entropie de Rényi, qui a pour effet de faire cristalliser le système au bord. Elle est due à un opérateur de vertex qui devient pertinent à la frontière. Une telle transition se produit *dans une même fonction d'onde* : d'une certaine manière, élever à une certaine puissance les composantes de la fonction d'onde aide à révéler les différents types d'ordres en compétition.
- Les résultats que nous avons présenté peuvent facilement être généralisés au cas d'un cylindre ou d'une bande ayant un rapport d'aspect L_y/L_x fini. En effet, le raisonnement menant à l'importante équation (III.100) reste toujours valable dans ce cas.

Ising et modèles minimaux : Motivés par ces succès et en oubliant le lien avec le point de vue bidimensionnel, nous avons étudié l'entropie de Shannon correspondant à d'autres chaînes de spins, comme Ising. Les résultats ne sont pas aussi aboutis que pour le boson libre, et certaines choses importantes restent à comprendre. Nous avons pu cependant mettre en évidence un certain nombre de comportements intéressants, semble-t-il caractéristiques des modèles minimaux :

- A la différence du cas $c = 1$, le système n'est critique qu'en un point, et changer le paramètre de Rényi va avoir un effet très différent sur l'entropie. Tout se passe en effet comme si n était une perturbation pertinente au bord. Par exemple pour le modèle d'Ising, $n > 1$ va faire flotter le système vers l'état de bord fixe, et $n < 1$ va faire flotter le système vers l'état de bord libre. Le comportement de l'entropie sur ces intervalles peut alors se comprendre en utilisant des résultats connus sur les « facteurs g ». Nous avons vérifié qu'un tel comportement était générique, en l'appliquant à d'autres géométries (bande, sous-chaîne, ...) et d'autres modèles statistiques (RSOS).
- Dans cette interprétation, la situation semble beaucoup plus compliquée au point exactement marginal $n = 1$. L'entropie prend à chaque fois une valeur non triviale, que nous n'avons pas pu déterminer. L'approche habituelle pour calculer de tels nombres en théorie des champs utilise la méthode dite des répliques. Nous avons cependant montré qu'une telle méthode n'avait aucune chance de résoudre ce problème. Nous avons aussi établi que ces nombres étaient bien universels. Leur calcul représente un important défi à l'instant présent.

Pour finir, signalons que nous n'avons étudié (du point de vue de l'entropie de Shannon) que des systèmes unidimensionnels. Il serait intéressant d'étendre certains de nos résultats à des systèmes en dimension supérieure, critique ou possédant une autre forme d'ordre cachée. On peut par exemple s'intéresser à des échelles de spin, ou à des systèmes qui possèdent un ordre topologique.

Bibliographie

- [1] Holzhey C, Larsen F and Wilczek F, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, 1994 Nucl. Phys. B **424** 443
- [2] Vidal G, Latorre J. I, Ricao E and Kitaev A, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, 2002 Phys. Rev. Lett **90** 227902
- [3] Calabrese P and Cardy J *Entanglement entropy and quantum field theory*, 2004 J. Stat. Mech P06002
- [4] Korepin V. E *Universality of Entropy Scaling in One Dimensional Gapless Models*, 2004 Phys. Rev. Lett **92** 096402
- [5] Moessner R and Raman S, *Quantum dimer models* arXiv :0809.3051 (2008)
- [6] Rokhsar D. S and Kivelson S. A, *Superconductivity and the Quantum Hard-Core Dimer Gas*, 1988 Phys. Rev. Lett **61** 2376
- [7] Anderson P. W. *The Resonating Valence Bond State in La₂CuO₄ and Superconductivity*, 1987 Science **235** 1196
- [8] Fazekas P and Anderson P. W. *On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet*, 1974 Philos. Mag. **30** 23
- [9] Kivelson S. A, Rokhsar D. S and Sethna J. P. *Superconductivity and the Quantum Hard-Core Dimer Gas*, 1987 Phys. Rev. B **35** 8865
- [10] Castelnovo C, Chamon C, Mudry C and Pujol P, *From quantum mechanics to classical statistical physics : Generalized Rokhsar-Kivelson Hamiltonians and the Stochastic Matrix Form decomposition*, 2005 Ann. Phys **318** 316
- [11] Sachdev S, *Spin-Peierls ground states of the quantum dimer model : A finite-size study*, 1989 Phys. Rev. B **40** 5204
- [12] Leung P. W, Chiu K.C and Runge K. J *Columnar dimer and plaquette resonating-valence-bond orders in the quantum dimer model*, 1996 Phys. Rev. B **54** 12938
- [13] Syljuasen O.F *Plaquette phase of the square-lattice quantum dimer model : Quantum Monte Carlo calculations*, 2006 Phys. Rev. B **73** 245105
- [14] Ralko A, Poilblanc D and Moessner R *Generic Mixed Columnar-Plaquette Phases in Rokhsar-Kivelson Models*, 2008 Phys. Rev. Lett **100** 037201
- [15] Fradkin E, Huse D. A, Moessner R, Oganessian V and Sondhi S. L, *Bipartite Rokhsar-Kivelson points and Cantor deconfinement*, 2004 Phys. Rev. B **69** 224415

- [16] Vishwanath A, Balents L and Senthil T, *Quantum criticality and deconfinement in phase transitions between valence bond solids*, 2004 Phys. Rev. B **69** 224416
- [17] Papanikolaou S, Raman K. S. and Fradkin E, *Devil's staircases, quantum dimer models, and stripe formation in strong coupling models of quantum frustration*, 2007 Phys. Rev. B **75** 094406
- [18] Isakov S. V, Fendley P, Ludwig A. W. W, Trebst S and Troyer M, *Dynamics at and near conformal quantum critical points*, 2011 Phys. Rev. B **83** 125114
- [19] Alet F, Jacobsen J. L, Misguich G, Pasquier V, Mila F and Troyer M, *Interacting Classical Dimers on the Square Lattice*, 2005 Phys. Rev. Lett **94** 235702
- [20] Alet F, Ikhlef Y, Jacobsen J. L, Misguich G and Pasquier V, *Classical dimers with aligning interactions on the square lattice*, 2006 Phys. Rev. E **74** 041124
- [21] Fradkin E and Moore J. E, *Entanglement Entropy of 2D Conformal Quantum Critical Points : Hearing the Shape of a Quantum Drum*, 2006 Phys. Rev. Lett **97** 050404
- [22] Affleck I and Ludwig A, *Universal noninteger ground-state degeneracy in critical quantum systems*, 1991 Phys. Rev. Lett **67** 161
- [23] Gaudin M, *Gaz coulombien discret à une dimension*, 1973 J. Phys (France) **34** 511
- [24] Hsu B, Mulligan M, Fradkin E and Kim E-A *Universal entanglement entropy in two-dimensional conformal quantum critical points*, 2009 Phys. Rev. B **79** 115421
- [25] Fradkin E, *Scaling of entanglement entropy at 2D quantum Lifshitz fixed points and topological fluids*, 2009 J. Phys. A :Math. Theor. **42** 504011
- [26] Giamarchi T, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford University Press, New York, 2004).
- [27] Coleman S, *Quantum sine-Gordon equation as the massive Thirring model*, 1975 Phys. Rev. D **11** 2088
- [28] Cabra D. C, Honecker A, Pujol P, *Magnetization plateaux in N-leg spin ladders*, 1998 Phys. Rev. B **58** 6241
- [29] Bogoliubov N. M, Izergin A. G and Korepin V. E , 1986 Nucl. Phys. B **275** 687
- [30] Krattenthaler C, *Advanced Determinant Calculus* arXiv math/9902004 (1999)
- [31] Oshikawa M and Affleck I, *Boundary conformal field theory approach to the critical two-dimensional Ising model with a defect line* , 1997 Nucl. Phys. B **495** 533
- [32] Oshikawa M, *Boundary Conformal Field Theory and Entanglement Entropy in Two-Dimensional Quantum Lifshitz Critical Point* arXiv :1007.3739 (2010)
- [33] Eggert S and Affleck I, *Magnetic impurities in half-integer-spin Heisenberg antiferromagnetic chains*, 1992 Phys. Rev. B **46** 10866
- [34] Affleck I, *Quantum Impurity Problems in Condensed Matter Physics* Les Houches, Session LXXXIX (2008).
- [35] Zaletel M. P, Bardarson J. H and Moore J. E *Logarithmic Terms in Entanglement Entropies of 2D Quantum Critical Points and Shannon Entropies of Spin Chains*, 2011 Phys. Rev. Lett **107** 020402

- [36] Fendley P, Saleur H and Warner N, *Exact solution of a massless scalar field with a relevant boundary interaction*, 1994 Nucl. Phys. B **430** 577
- [37] Franchini F and Abanov A. G, *Asymptotics of Toeplitz determinants and the emptiness formation probability for the XY spin chain*, 2005 J. Phys. A :Math. Gen **38** 5069
- [38] Deift P, Its A and Krasovsky I, *Asymptotics of Toeplitz, Hankel, and Toeplitz+Hankel determinants with Fisher-Hartwig singularities*, 2011 Ann. of Math **174** 1243

CHAPITRE IV

En dehors de l'équilibre : la trempe quantique

IV.1 Présentation

IV.1.1 Qu'est-ce qu'une trempe quantique ?

Commençons par définir une trempe quantique (« quantum quench » en anglais). Soit un système quantique gouverné par un Hamiltonien H_λ , qui dépend d'un paramètre de contrôle physique λ . On peut penser par exemple pour λ à un champ magnétique extérieur, à l'intensité d'un laser, etc. Le système, à très basse température, est initialement préparé dans le fondamental $|\lambda\rangle$ de ce Hamiltonien :

$$|\psi(t \leq 0)\rangle = |\lambda\rangle. \quad (\text{IV.1})$$

A l'instant $t = 0^+$, on décide de changer soudainement la valeur de ce paramètre de contrôle $\lambda \rightarrow \lambda' \neq \lambda$, si bien que le Hamiltonien devient $H_{\lambda'}$. On appelle une telle action *trempe quantique*^a. L'état dans lequel se trouvait le système $|\psi(t \leq 0)\rangle = |\lambda\rangle$ n'a aucune raison d'être un état propre de $H_{\lambda'}$. Le système est donc mis hors d'équilibre, et il est intéressant de se demander comment va évoluer la fonction d'onde

$$|\psi(t > 0)\rangle = \exp(itH_{\lambda'}) |\lambda\rangle. \quad (\text{IV.2})$$

Il est difficile de pouvoir modifier les paramètres du Hamiltonien dans les systèmes traditionnels de matière condensée. A de rares exceptions près, ces paramètres sont plutôt des inconnues du modèle, dont il faut ensuite déterminer les valeurs expérimentalement. Une telle étude peut donc sembler quelque peu académique. Cependant, d'impressionnants progrès expérimentaux réalisés dans des systèmes d'atomes froids ont changé la donne [1]. Il est maintenant possible de construire des systèmes quantiques sans dissipation ou presque, et possédant une large gamme de paramètres modifiables à volonté.

a. Dans son acception courante, la trempe désigne un « traitement thermique qui permet d'obtenir à température ambiante, grâce au refroidissement rapide d'un produit métallurgique ou du verre, soit une structure stable à chaud, soit une structure dérivée de cette dernière » (Larousse). Dans ce cas, le paramètre de contrôle λ est bien évidemment la température.

La trempe quantique pose aussi des questions intéressantes, qui remontent aux fondements mêmes de la mécanique quantique. L'évolution de la fonction d'onde est unitaire, et le système ne peut pas converger – du moins au sens strict – vers un état d'équilibre. Ce comportement, qui contraste fortement avec la trempe classique, a été observé expérimentalement[2]. Beaucoup d'efforts ont été consacrés ces dernières années pour comprendre si le système ne pouvait pas tout de même « thermaliser », en un sens plus faible. La manière dont le système arrive finalement dans une forme d'équilibre dépend de nombreux facteurs, comme la *dimensionnalité*, le *désordre*, les *conditions initiales*, mais aussi l'*intégrabilité*. La compréhension de l'influence de ces facteurs est actuellement un sujet majeur d'études, tant théoriques qu'expérimentales[3, 4, 5, 6].

IV.1.2 Fidélité

Il est naturel de se demander quelle peut-être la probabilité d'observer le système dans le fondamental du Hamiltonien « trempé » $|\lambda'\rangle$, juste après la trempe. Celle-ci est donnée par

$$f(\lambda, \lambda') = |\langle \lambda | \lambda' \rangle|^2. \quad (\text{IV.3})$$

Une telle quantité est appelée *fidélité*, elle permet de quantifier à quel point le fondamental d'un système change quand on modifie le paramètre de contrôle λ . La fidélité est utile pour détecter une transition de phase quantique. Plus précisément, la susceptibilité

$$\chi(\lambda) = \left. \frac{\partial^2 f(\lambda, \lambda')}{\partial \lambda^2} \right|_{\lambda'=\lambda} \quad (\text{IV.4})$$

diverge au voisinage d'un point critique, avec un exposant caractéristique de la classe d'universalité correspondante[7].

Le mot fidélité sert aussi parfois à désigner une autre observable, cette fois-ci dépendant du temps. Nous allons l'étudier en détail par la suite, mais sous le nom d'*écho de Loschmidt*, afin d'éviter toute confusion. Cet écho $\mathcal{L}(t)$ est défini comme le recouvrement de la fonction à temps $t > 0$ avec la fonction d'onde à l'instant 0 :

$$\mathcal{L}(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \lambda | e^{itH_{\lambda'}} | \lambda \rangle|^2. \quad (\text{IV.5})$$

C'est une observable de choix lorsque l'on souhaite étudier l'évolution temporelle d'un système quantique après une trempe.

IV.1.3 Trempe locale et trempe globale

Pour nos besoins ultérieurs, il nous faut aussi insister sur la distinction entre les trempes globales et les trempes locales :

- Trempe globale : λ est un paramètre global du Hamiltonien. Le système est donc modifié « partout » même si cette modification peut être éventuellement faible.
- Trempe locale : la trempe a un effet localisé à une partie seulement du système considéré. On peut par exemple penser au retournement d'un (ou de quelques) spins.

Un exemple particulier de trempe locale est fourni par ce que nous allons appeler le « découpage-collage » qui consiste simplement à réunir deux systèmes A et B auparavant déconnectés (ou bien couper un système en deux). Imaginons un système $A \cup B$ décrit par le Hamiltonien

$$H_{A \cup B} = H_A + H_B + \lambda H_{A,B}^{\text{int}}. \quad (\text{IV.6})$$

H_A et H_B commutent, et $H_{A,B}^{\text{int}}$ contient donc toutes les interactions (à courte portée) entre les deux sous-systèmes A et B . La trempe découpage-collage consiste simplement à faire passer λ de 0 à 1.

IV.2 Fidélité bipartie

Inspiré par ces trempes découpage-collage, il est tentant de s'intéresser à une version « statique » du même problème. La fonction d'onde que l'on a considérée au temps $t < 0$ est dans un état factorisé :

$$|\psi(t < 0)\rangle = |A \otimes B\rangle, \quad (\text{IV.7})$$

et le système évolue au temps $t > 0$ avec le Hamiltonien $H_{A \cup B}$. Ce Hamiltonien possède un fondamental $|A \cup B\rangle$ qui n'est bien évidemment pas dans un état factorisé. On s'intéresse ici au recouvrement (ou produit scalaire)

$$|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2. \quad (\text{IV.8})$$

C'est un cas particulier de fidélité : si l'on pense par exemple à une chaîne de spins, le paramètre que l'on a modifié dans le Hamiltonien correspond aux termes d'interaction entre A et B . Toujours dans le langage des trempes, ce recouvrement peut-être interprété comme la probabilité d'observer le système dans l'état $|A \cup B\rangle$ – fondamental de la chaîne totale – immédiatement après la trempe. Nous nommerons cette quantité « fidélité bipartie » par la suite^b. Nous allons voir que cette (nouvelle) quantité possède de très fortes similarités avec l'entropie d'intrication, en particulier en ce qui concerne les propriétés de loi d'échelle. Pour des raisons pratiques nous introduisons aussi une version logarithmique de cette fidélité

$$\mathcal{F}_{A,B} = -\ln |\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2, \quad (\text{IV.9})$$

que nous nommons fidélité bipartie logarithmique. On utilisera par la suite l'abréviation LBF (« Logarithmic bipartite fidelity »). Cette quantité est nulle si le produit scalaire vaut 1, et est d'autant plus grande que celui-ci est petit. La notation $\mathcal{F}$ est choisie car la LBF n'est en fait rien d'autre qu'une énergie libre en temps euclidien, comme on va le voir par la suite. Présentons tout d'abord quelques unes des motivations qui peuvent pousser à étudier une telle quantité.

- La LBF est simple conceptuellement, car c'est un produit scalaire.
- La LBF ressemble à l'entropie d'intrication. Comme cette dernière, elle nous renseigne sur les corrélations quantiques qui se propagent le long de la bipartition. Même si elle ne possède pas les propriétés de l'entropie du point de vue « information quantique », elle a

b. Le mot bipartie est rajouté car notre quantité est inspirée de l'entropie de von Neumann, parfois aussi appelée entropie d'intrication bipartie. L'idée de bipartition (couper le système en deux) est cruciale.

intuitivement le même comportement. En effet si l'intrication est faible, alors $|A \otimes B\rangle$ a des chances de « ressembler » à $|A \cup B\rangle$, et la LBF sera faible. Inversement un système intriqué aura une LBF élevée.

- Comme pour l'entropie, étudier la LBF nécessite simplement de connaître la fonction d'onde pour différentes tailles de systèmes. On ne travaille donc pas directement sur le Hamiltonien.
- Il est raisonnable d'espérer qu'une telle quantité pourrait (au moins en principe) être mesurée expérimentalement.
- La LBF se prête assez naturellement aux calculs, aussi bien analytiques (théorie des champs) que numériques (fermions libres, DMRG, Monte-Carlo, et peut-être même ansatz de Bethe...).

Notre stratégie d'étude va être la suivante. L'entropie d'intrication encode naturellement – et probablement mieux que toute autre quantité – les caractéristiques universelles d'une fonction d'onde donnée. Parmi ses succès, on peut citer le comportement d'échelle universel pour des systèmes 1d critiques[8, 9, 10], ainsi que la détection de l'ordre topologique[11, 12]. L'entropie s'est donc imposée comme un outil très pratique dans ce contexte. L'introduction d'une observable différente (la LBF), pour être digne d'intérêt, se doit de reproduire aux moins partiellement les résultats obtenus avec l'entropie d'intrication. C'est donc ce que nous allons essayer de faire dans cette section.

IV.2.1 Loi d'échelle et catastrophe d'orthogonalité

Intéressons nous à un modèle quantique à courte portée, défini sur un réseau en dimension quelconque d . Si l'on note L une longueur caractéristique du système, celui-ci a un « volume » d'ordre $\sim L^d$. Le système est découpé en deux morceaux macroscopiques A et B . Alors la « surface » de l'interface entre A et B va être d'ordre $\sim L^{d-1}$. Supposons de plus que la phase possède une longueur de corrélation ξ . On s'attend alors à ce que les deux états $|A \cup B\rangle$ et $|A \otimes B\rangle$ soient très similaires, loin de la frontière séparant A de B . Ce n'est pas le cas dans un volume ξL^{d-1} , proche de la frontière. La taille de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ est typiquement exponentielle en le volume du système :

$$\dim \mathcal{H} \sim \exp(\alpha L^d). \quad (\text{IV.10})$$

On a par exemple $\alpha = \ln(2s + 1)$ pour un système comportant des spins s . En dénombrant naïvement les composantes qui se ressemblent dans $|A \cup B\rangle$ et $|A \otimes B\rangle$, on s'attend à ce que le produit scalaire se comporte comme

$$|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \underset{L \rightarrow \infty}{\approx} \exp(-2\alpha \xi L^{d-1}). \quad (\text{IV.11})$$

Ainsi, mis à part en dimension $d = 1$, il y a catastrophe d'orthogonalité^c : le produit scalaire tend typiquement vers 0 à la limite thermodynamique. Nous allons revenir sur cela par la suite. Notons aussi que le même argument appliqué à deux états pris au hasard dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ donnerait un produit scalaire en $\sim \exp(-\alpha' L^d)$.

c. par référence à la célèbre catastrophe d'orthogonalité d'Anderson[13].

Il est pratique d'interpréter ce résultat en terme d'intégrale de chemin. En effet, le fondamental $|0\rangle$ d'un Hamiltonien quantique peut être vu comme le résultat d'une évolution infinie en temps euclidien :

$$e^{-\tau H}|s\rangle \underset{\tau \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\tau E_0}|0\rangle\langle 0|s\rangle. \quad (\text{IV.12})$$

E_0 est l'énergie du fondamental de H , et l'on a de plus supposé que $\langle s|0\rangle \neq 0$. En utilisant cette relation, on peut alors exprimer le produit scalaire qui nous intéresse comme un rapport de fonctions de partition :

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{Z_{A,B}(\tau)}{\sqrt{Z_{A \otimes B}(\tau) Z_{A \cup B}(\tau)}}. \quad (\text{IV.13})$$

Ces fonctions de partitions s'expriment en temps imaginaire comme

$$Z_{A,B}(\tau) = \langle s | e^{-\tau(H_A + H_B)} e^{-\tau(H_A + H_B + H_{A \cup B}^I)} | s \rangle \quad (\text{IV.14})$$

$$Z_{A \otimes B}(\tau) = \langle s | e^{-2\tau(H_A + H_B)} | s \rangle \quad (\text{IV.15})$$

$$Z_{A \cup B}(\tau) = \langle s | e^{-2\tau(H_A + H_B + H_{A \cup B}^I)} | s \rangle \quad (\text{IV.16})$$

Voir la figure IV.1 pour un exemple en dimension $d = 2$.

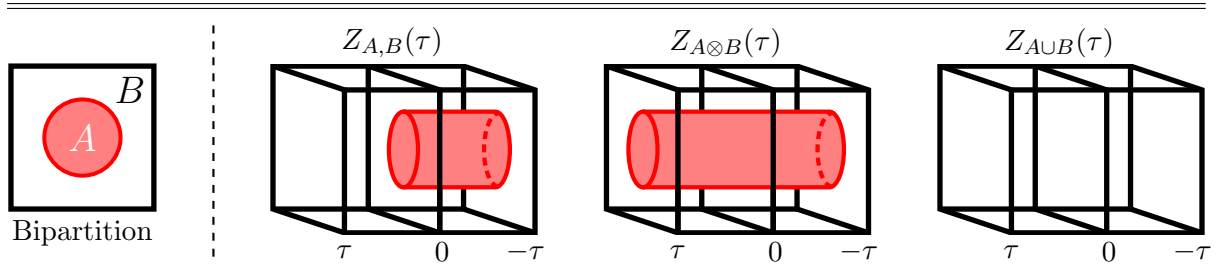


FIGURE IV.1 – *A gauche* : exemple de bipartition du système quantique en dimension $d = 2$. *A droite* : les trois fonctions de partition euclidiennes $Z_{A,B}(\tau)$, $Z_{A \otimes B}(\tau)$ et $Z_{A \cup B}(\tau)$ en dimension $d + 1 = 3$. La région A est coloriée en rouge quand les deux sous-systèmes sont déconnectés.

En terme d'énergies libres $f = -\ln Z$, l'équation (IV.13) peut se réécrire

$$\boxed{\mathcal{F}_{A,B} = 2f_{A,B} - f_{A \otimes B} - f_{A \cup B}}. \quad (\text{IV.17})$$

Cette équation va être très importante par la suite. Elle nous permet d'ores et déjà de prédire de manière heuristique le comportement de la LBF. Chaque énergie libre admet typiquement un développement asymptotique de la forme

$$f(L) = f_{d+1}L^{d+1} + f_d L^d + f_{d-1}L^{d-1} + o(L^{d-1}). \quad (\text{IV.18})$$

En injectant ce développement dans l'équation (IV.17), on se rend compte que les deux termes en L^{d+1} et L^d sont annihilés par la combinaison linéaire. On retrouve ainsi l'équation (IV.11) :

$$\mathcal{F}_{A,B} = aL^{d-1} + o(L^{d-1}). \quad (\text{IV.19})$$

C'est la même loi d'aire que vérifie l'entropie d'intrication[14]. Évidemment ce raisonnement est heuristique ; il n'est a priori pas valide dans le cas critique ou quand la correspondance avec un modèle statistique en dimension $d + 1$ possède un problème de signe par exemple. En effet dans ce cas $e^{-\tau H}$ ne peut plus être interprété comme la matrice de transfert d'un modèle de physique statistique à poids de Boltzmann positifs et locaux. Nous allons voir par la suite que des corrections logarithmiques sont possibles.

IV.2.2 Systèmes unidimensionnels critiques

Considérons tout d'abord le cas le plus simple, c'est à dire un système quantique en dimension $d = 1$. L'équation (IV.19) prédit que la LBF sature quand la taille du système tend vers l'infini. Ce fait peut facilement se vérifier dans une chaîne de spins générique. La situation devient plus intéressante quand la longueur de corrélation diverge, et le système devient aussi critique. Dans ce cas, et comme expliqué dans le chapitre introductif, la théorie des champs décrivant le modèle statistique en dimension $d + 1 = 2$ est invariante conforme. Ceci va nous permettre d'établir un certain nombre de résultats analytiques.

Commençons par considérer la bipartition la plus simple : le système total de taille L est coupé en deux parts égales de taille $L/2$, comme sur la figure IV.2.

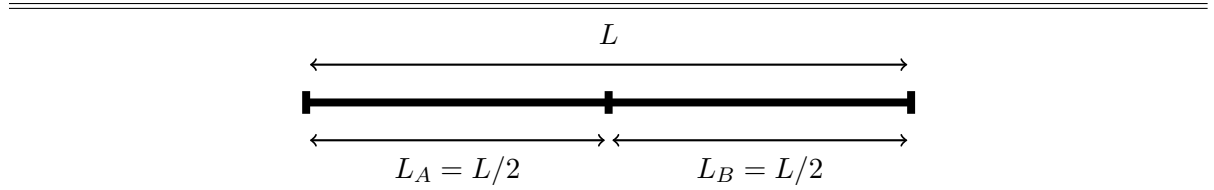


FIGURE IV.2 – Une chaîne de spins de L sites coupée en deux chaînes de longueur égale $L_A = L_B = L/2$.

a Loi d'échelle globale : un premier exemple

Prenons la chaîne de spins critique la plus simple à laquelle on puisse penser, la chaîne XX. Comme discuté précédemment, cette chaîne est équivalente à un modèle de fermions pouvant sauter à gauche ou à droite

$$H_{A \cup B} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \left(c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1} \right) - h \sum_{j=1}^L \left(c_j^\dagger c_j - 1/2 \right). \quad (\text{IV.20})$$

H_A s'obtient facilement en remplaçant L par L_A dans l'équation précédente, et H_B se déduit de façon similaire. Tous ces Hamiltoniens se diagonalisent par transformée de Fourier. Par exemple

pour $H_{A \cup B}$ on introduit

$$d_m^\dagger = \left(\frac{2}{L+1} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^L \sin \left(\frac{m\pi j}{L+1} \right) c_j^\dagger \quad , \quad m = 1, \dots, L. \quad (\text{IV.21})$$

Ces opérateurs vérifient (comme les $c_j, c_j^\dagger$) les relations de commutation canoniques $\{d_m, d_k^\dagger\} = \delta_{mk}$ et $\{d_m, d_k\} = \{d_m^\dagger, d_k^\dagger\} = 0$. Le Hamiltonien s'écrit alors comme

$$H_{A \cup B} = \frac{Lh}{2} + \sum_{m=1}^L \epsilon_m d_m^\dagger d_m \quad , \quad \epsilon_m = -h - \cos \left(\frac{m\pi}{L+1} \right), \quad (\text{IV.22})$$

et son fondamental s'écrit comme une mer de Fermi partiellement remplie

$$|A \cup B\rangle = \left(\prod_{m=1}^n d_m^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{IV.23})$$

$|0\rangle$ est le vide des fermions « réels », $c_j|0\rangle = 0 \quad \forall j$. $n = \langle \sum_j c_j^\dagger c_j \rangle$ est le nombre de fermions dans la mer, et dépend de h . n est une quantité conservée, et correspond à un certain secteur d'aimantation dans le langage des spins. Supposons pour simplifier que n est pair et notons

$$\rho = n/L \quad (\text{IV.24})$$

la densité de fermions. Par exemple, à champ magnétique nul ($h = 0$), la mer de Fermi est à moitié remplie et ainsi $\rho = 1/2$. On peut alors répéter la même procédure pour les sous-systèmes A et B , et écrire aussi $|A \otimes B\rangle$ comme une mer de Fermi :

$$|A \otimes B\rangle = \left(\prod_{m=1}^n f_m^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{IV.25})$$

Par application du théorème de Wick, le produit scalaire qui nous intéresse peut alors s'exprimer comme un déterminant :

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \det_{1 \leq i, j \leq n} \left(\langle d_i f_j^\dagger \rangle \right) \quad (\text{IV.26})$$

$$= \det_{1 \leq i, j \leq n} (M_{ij}) \quad (\text{IV.27})$$

En posant $\theta_i = \frac{i\pi}{L/2+1}$ et $\phi_j = \frac{j\pi}{L+1}$, les éléments de matrice sont donnés par

$$M_{ij} = \begin{cases} (-1)^i \frac{1}{\sqrt{(L/2+1)(L+1)}} \frac{\sin \theta_i \sin (j\pi/2 + \phi_j/2)}{\cos \theta_i - \cos \phi_j} & , \quad 1 \leq i \leq n/2 \\ (-1)^j \frac{1}{\sqrt{(L/2+1)(L+1)}} \frac{\sin \theta_{i-n/2} \sin (j\pi/2 + \phi_j/2)}{\cos \theta_{i-n/2} - \cos \phi_j} & , \quad n/2 \leq i \leq n \end{cases} \quad (\text{IV.28})$$

Ce déterminant est en fait une variante d'un déterminant fameux, dit de Cauchy. Comme expliqué dans l'annexe A, il est possible de l'évaluer explicitement

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \frac{\prod_{i=1}^{n/2} \left[\sin^2 \theta_i \prod_{j=i+1}^{n/2} (\cos \theta_i - \cos \theta_j)^2 \right] \prod_{j=1}^n \sin \left(\frac{j\pi + \phi_j}{2} \right) \prod_{1 \leq i < j \leq n}^{(i-j) \text{ pair}} (\cos \phi_i - \cos \phi_j)}{2^{-n/2} [(L+1)(L/2+1)]^{n/2} \prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n (\cos \theta_i - \cos \phi_j)} \quad (\text{IV.29})$$

Il est alors possible d'étudier le développement asymptotique de cette formule. Voir de nouveau l'annexe A pour plus de détails. On obtient

$$\boxed{|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} \text{cste} \times L^{-\delta_\rho}, \quad \text{ou bien} \quad \mathcal{F}_{A,B} = \delta_\rho \times \ln L + \mathcal{O}(1).} \quad (\text{IV.30})$$

L'exposant dépend du remplissage et est donné par la formule

$$\delta_\rho = \frac{1}{8} + \frac{1}{2} \left(\rho - \frac{1}{2} \right)^2. \quad (\text{IV.31})$$

Nous allons voir que cet exposant peut se comprendre par des arguments de théories conformes. Signalons finalement que nous sommes parvenus à évaluer le terme constant à 1/2 remplissage. On obtient le joli résultat suivant

$$|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\pi^{1/8} \exp \left(\frac{3}{8} + \frac{K}{\pi} - \frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \right)}{G^{9/2}} \left(\frac{\Gamma(\frac{1}{4})}{\Gamma(\frac{3}{4})} \right)^{1/2} \times L^{-1/8}. \quad (\text{IV.32})$$

G est la constante de Glaisher-Kinkelin, K la constante de Catalan, Γ la fonction gamma d'Euler, et ζ la fonction zêta de Riemann. Bien entendu, une telle constante ne peut pas être universelle.

b Loi d'échelle globale et formule de Cardy-Peschel

Faisons tout d'abord comme si le facteur $(\rho - 1/2)^2$ n'était pas présent (ou plaçons nous au remplissage moitié $\rho = 1/2$). En utilisant la correspondance avec un modèle statistique à deux dimensions, ils nous faut calculer les énergies libres dans les trois géométries représentées sur la figure IV.3. Comme précédemment, les termes de surface et de ligne sont éliminés par la combinaison linéaire. Cependant, un résultat classique de théorie conforme, dû à Cardy et Peschel[15], prédit l'existence de contributions logarithmiques si la frontière du domaine comporte des angles/coins. Pour un simple coin d'angle θ , cette contribution est donnée par :

$$\Delta f_{\text{coin}} = \frac{c}{24} \left(\frac{\theta}{\pi} - \frac{\pi}{\theta} \right) \ln L. \quad (\text{IV.33})$$

En observant la figure IV.3 on se rend compte qu'il peut y avoir des angles à l'infini ($\tau = \pm\infty$). Leurs contributions seront de nouveau annihilées par la combinaison linéaire. Il reste cependant

un autre angle de $\theta = 2\pi$ dans la géométrie $f_{A,B}$ (représenté par un point rouge sur la figure) qui n'a pas d'équivalent dans les autres. Par application directe des formules (IV.33) et (IV.17), on s'attend donc à ce que la LBF ait pour terme dominant

$$\mathcal{F}_{A,B} \sim \frac{c}{8} \ln L. \quad (\text{IV.34})$$

Ceci semble expliquer les résultats obtenus sur le réseau pour la chaîne XX à demi-remplissage ($c = 1$). Notons cependant que le raisonnement précédent n'est valable que si la condition au bord invariante conforme est la même partout. Dans le cas contraire, d'autres contributions peuvent s'ajouter au terme de Cardy-Peschel. Nous allons voir par la suite que le deuxième terme de l'équation (IV.31) peut s'expliquer par un subtil changement de condition au bord.

La théorie conforme prédit donc (moyennant toujours la même condition au bord) que la catastrophe d'orthogonalité observée dans la chaîne XX est en fait universelle. L'exposant est donné par une fraction de la charge centrale, qui indexe la classe d'universalité dans laquelle se trouve le modèle sur réseau que l'on a considéré.

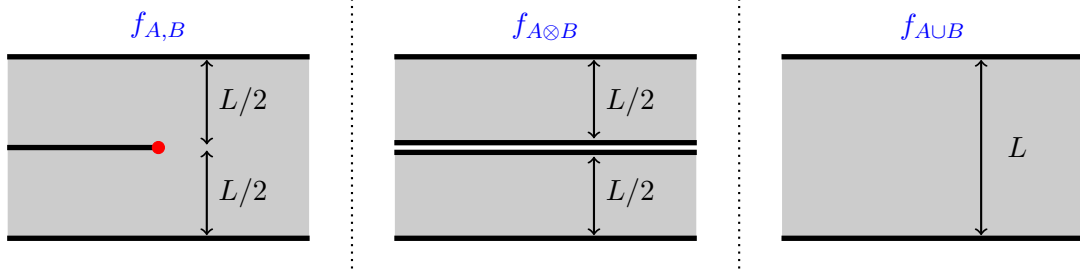


FIGURE IV.3 – Énergies libres $f_{A,B}$, $f_{A \otimes B}$ et $f_{A \cup B}$ nécessaires au calcul de la LBF à $1 + 1$ dimensions. La seule contribution non triviale provient de la singularité de type Cardy-Peschel avec angle $\theta = 2\pi$ dans la géométrie $f_{A,B}$ (point colorié en rouge sur la figure).

c Détecter un point critique quantique

Nous avons vu que pour un système quantique 1d massif, la fidélité doit tendre vers une constante, mais qu'il survient une catastrophe d'orthogonalité $\langle A \cup B | A \otimes B \rangle \sim L^{-\delta > 0}$ pour les systèmes critiques. On s'attend à ce que la LBF soit à même de détecter un point critique quantique. Une observable pertinente du système se doit de le faire, et il est donc important de vérifier que c'est bien le cas. Un bon exemple est fourni par la chaîne d'Ising en champ transverse h , dont nous avons déjà parlé aux chapitres précédents. Rappelons notre convention pour le Hamiltonien :

$$H = - \sum_{j=1}^{L-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - h \sum_{j=1}^L \sigma_j^z. \quad (\text{IV.35})$$

Au point critique $h = h_c = 1$, le système est décrit par une théorie conforme à $c = 1/2$, et ce point sépare une phase ferromagnétique d'une phase paramagnétique. Il existe aussi une correspondance exacte entre la chaîne XX à remplissage $\rho = 1/2$ et deux chaînes d'Ising indépendantes de tailles moitiés, si tant est que les conditions aux bords sont libres[16]. Cela signifie que la LBF satisfait la relation exacte

$$\mathcal{F}^{(XX)}(L) = 2\mathcal{F}^{(\text{Ising})}(L/2, h = 1). \quad (\text{IV.36})$$

Cette relation reste d'ailleurs valable quand on coupe le système en parts inégales, à condition que ces parts soient de longueurs L_A et L_B paires. Les formules (IV.30) et (IV.31) avec $\rho = 1/2$ s'appliquent donc aussi à cette chaîne d'Ising. Pour d'autres valeurs du champ transverse, la LBF peut se calculer comme un déterminant $L \times L$, et les résultats numériques sont présentés à la figure IV.4.

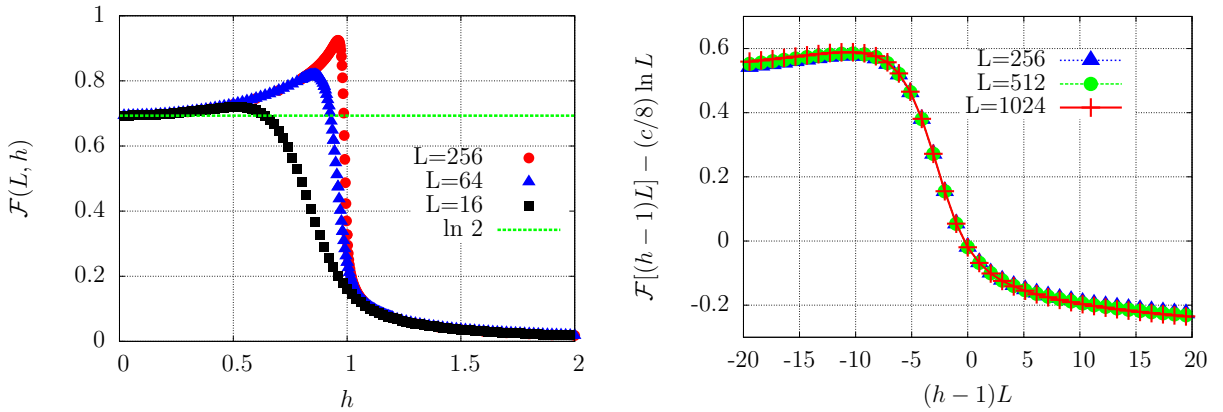


FIGURE IV.4 – Résultats numériques pour la LBF dans une chaîne d'Ising en champ transverse. *A gauche* : LBF pour des tailles de système $L = 16, 64, 256$ en fonction de h . On observe clairement la divergence de la pente au voisinage du champ transverse critique $h = h_c = 1$. *A droite* : Courbes réduites $\mathcal{F}_{\text{red}} = \mathcal{F}(L/\xi) - \frac{c}{8} \ln L = \mathcal{F}(L(h-1)) - \frac{c}{8} \ln L$ pour des tailles de système $L = 256, 512, 1024$. Aux effets de taille finie près, celles-ci se superposent bien les unes sur les autres.

La transition est clairement mise en évidence sur la figure IV.4 (à gauche), même pour des tailles relativement modestes. On peut en effet observer que la pente diverge pour des tailles de plus en plus grandes au voisinage de $h = 1$. Il est bien connu que la longueur de corrélation diverge comme

$$\xi \sim \frac{1}{|h - 1|} \quad (\text{IV.37})$$

au voisinage du point critique. Il est donc possible de superposer sur une même courbe les LBF pour différentes tailles, en les mettant sous la forme réduite

$$\mathcal{F}_{\text{red}} = \mathcal{F}(L/\xi) - \frac{c}{8} \ln L = \mathcal{F}(L(h-1)) - \frac{c}{8} \ln L. \quad (\text{IV.38})$$

Ceci confirme la divergence de la pente au voisinage du point critique. Le comportement de la LBF peut se comprendre en dehors du point critique en considérant les deux cas limites $h \rightarrow 0$ et $h \rightarrow \infty$:

- $h \rightarrow \infty$: Le fondamental de la chaîne totale est simplement donné par l'état « ferromagnétique » $|A \cup B\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle_z$. Le fondamental de la chaîne déconnectée $|A \otimes B\rangle$ est identique, et la LBF vaut donc simplement $\mathcal{F}(h \rightarrow \infty) = 0$.
- $h \rightarrow 0$: Le fondamental de la chaîne totale est alors donné par la superposition $|A \cup B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle_x + |\downarrow\downarrow \dots \downarrow\rangle_x)$. $|A\rangle$ (resp. $|B\rangle$) est donné par le même état pour les $L/2$ premiers (resp. derniers) spins, et l'on trouve $\mathcal{F} = \ln 2$.

Il est aussi amusant de constater que même si la LBF diverge au point critique avec L , cette divergence est pour la chaîne d'Ising en $(1/16) \ln L$, et la LBF au point critique pour les tailles considérées ici est en fait significativement plus petite que $\ln 2$. Voir une illustration sur la figure IV.4 à gauche.

d Influence du rapport d'aspect

Nous avons compris au paragraphe précédent le terme dominant de la LBF, du moins en l'absence d'opérateurs de changement de condition aux bords. Un résultat similaire est bien connu en ce qui concerne l'entropie d'intrication[8, 9, 10] :

$$S_{A,B} \sim \frac{c}{6} \ln L. \quad (\text{IV.39})$$

Il est ainsi naturel de se demander si l'entropie et la LBF ne sont pas reliées par une relation simple ($S = \frac{4}{3}\mathcal{F}$), au moins pour les systèmes critiques unidimensionnels. Nous allons voir que ce n'est pas le cas si l'on s'intéresse à un système coupé en un endroit quelconque. Introduisons le rapport d'aspect

$$x = \frac{L_A}{L}, \quad (\text{IV.40})$$

et étudions les lois d'échelles dans la limite $L \rightarrow \infty$, à x fixé.

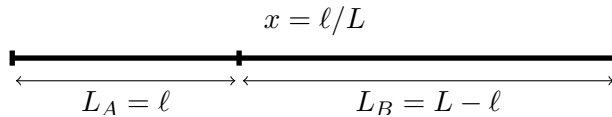


FIGURE IV.5 – Géométrie à taille finie que l'on considère ici. $x = L_A/L = \ell/L$ est le rapport d'aspect.

Pour un tel système, représenté à la figure IV.5, le terme dominant de l'entropie d'intrication est donné par [10] :

$$S_{A,B} = \frac{c}{6} \ln \left(\frac{L}{\pi} \sin \pi x \right) + \text{cte} + o(1). \quad (\text{IV.41})$$

Le calcul de la LBF dans une telle géométrie ne se déduit plus simplement de la formule de Cardy-Peschel, mais en est une généralisation simple. Il nous faut comme précédemment calculer trois énergies libres (voir la figure IV.6).

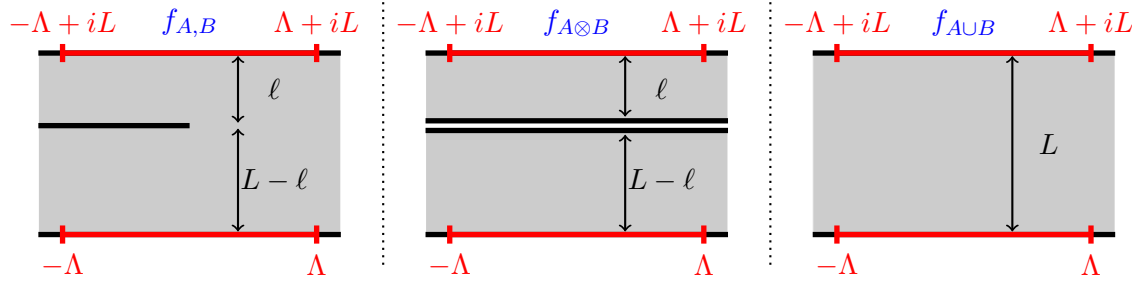


FIGURE IV.6 – Énergies libres nécessaires au calcul de la LBF pour un système à taille finie de rapport d'aspect $x = \ell/L$. Le calcul se fait via des intégrales sur les segments rouges $[-\Lambda, \Lambda]$ et $[-\Lambda + iL, \Lambda + iL]$, où Λ sert de régulateur.

Il n'est pas possible (et n'a pas beaucoup de sens) de calculer une énergie libre en théorie conforme, car celle-ci est habituellement non universelle, et dépendant du cut-off ultraviolet que l'on doit choisir. Par contre, il est possible d'accéder aux variations de cette énergie libre, via le tenseur énergie-impulsion, une des quantités fondamentales de la théorie. C'est ce que nous allons faire maintenant.

Calcul analytique : Soit $w = x + iy$ la coordonnée d'un point quelconque dans une des trois géométries de la figure IV.6. La frontière inférieure a pour ordonnée $y = 0$ et la frontière supérieure $y = L$. Portons notre attention plus spécifiquement sur la géométrie $f_{A,B}$ que nous nommerons à partir de maintenant « pantalon ». Considérons la transformation infinitésimale qui à chaque point w à l'intérieur du pantalon associe $w \mapsto w + i\delta l$, et agit comme l'identité à l'extérieur du pantalon. Cette transformation laisse L inchangé mais change ℓ en $\ell + \delta\ell$. La variation d'énergie libre correspondant à cette transformation peut s'écrire à l'aide de la composante T_{yy} du tenseur énergie-impulsion :

$$\delta f_{A,B} = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \delta f_{A,B}^{(\Lambda)} \quad (\text{IV.42})$$

$$\delta f_{A,B}^{(\Lambda)} = \frac{\delta\ell}{2\pi} \left[\int_{-\Lambda}^{\Lambda} \langle T_{yy} \rangle dx - \int_{-\Lambda+iL}^{\Lambda+iL} \langle T_{yy} \rangle dx \right] \quad (\text{IV.43})$$

On a des expressions similaires pour $f_{A \otimes B}$ et $f_{A \cup B}$. Chacun des termes $f_{A,B}, f_{A \otimes B}, f_{A \cup B}$ est infini, mais nous allons voir que la combinaison linéaire, qui définit la LBF, est par contre finie

$$\delta \mathcal{F}_{A,B} = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left(2\delta f_{A,B}^{(\Lambda)} - \delta f_{A \otimes B}^{(\Lambda)} - \delta f_{A \cup B}^{(\Lambda)} \right). \quad (\text{IV.44})$$

Pour accéder au tenseur énergie impulsion dans la géométrie du pantalon, la méthode éprouvée consiste à trouver la transformation conforme qui envoie le demi-plan supérieur sur la géométrie du pantalon, et à utiliser le fait que $\langle T(z) \rangle = 0$ dans le demi-plan complexe supérieur $\mathbb{H} = \{z \in \mathbb{C}, \text{Im}(z) > 0\}$. La géométrie du pantalon est suffisamment simple pour trouver une telle transformation, qui se trouve être de type Schwarz-Christoffel :

$$w(z) = \int^z du \frac{\alpha u}{(u - u_1)(u + u_2)}, \quad (\text{IV.45})$$

où u_1 et u_2 sont des nombres réels positifs.

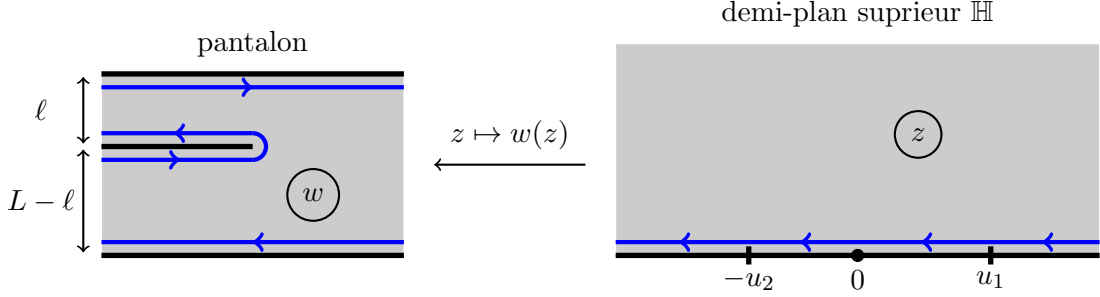


FIGURE IV.7 – Représentation schématique de la transformation conforme. *A droite* : la ligne bleue $\Gamma = \{a + i0^+, a \in \mathbb{R}\}$ est parcourue dans le sens des a décroissants dans le demi-plan $\mathbb{H}$. *A gauche* : le pantalon est l'image de $\mathbb{H}$ par $w(z)$. La ligne bleue est $w(\Gamma)$, parcourue elle aussi dans le sens des a décroissants.

Sur la figure IV.7, $z = 0$ correspond au point de rebroussement ($w'(z) = 0$), et l'on a besoin de deux pôles en $z = u_2$ et $z = -u_1$, où u_1 et u_2 sont deux nombres réels positifs. Après intégration il vient

$$w(z) = \frac{\alpha u_1}{u_1 + u_2} \ln(z - u_1) + \frac{\alpha u_2}{u_1 + u_2} \ln(z + u_2) + \text{cste.} \quad (\text{IV.46})$$

Chaque logarithme contribue pour une partie imaginaire $i\pi$ quand son argument devient négatif. Il nous faut donc demander $\alpha = L/\pi$ et $u_1/u_2 = (L - \ell)/\ell = (1 - x)/x$. Restent deux paramètres libres. On peut par exemple fixer $u_2 = 1$ et régler la constante d'intégration de manière à ce que $\text{Re}(w(z = 0)) = 0$. On obtient alors

$$w(z) = \frac{L}{\pi} \left[x \ln(z + 1) + (1 - x) \ln \left(z \frac{x}{1 - x} - 1 \right) \right]. \quad (\text{IV.47})$$

Ce raisonnement peut habituellement être adapté pour traiter diverses autres géométries^d. On utilise maintenant la loi de transformation du tenseur énergie impulsion

$$\langle T(w) \rangle = \langle T(z) \rangle - \frac{c}{12} \left(\frac{dw}{dz} \right)^{-2} \{w(z), z\}, \quad (\text{IV.48})$$

où $\{w(z), z\}$ est la dérivée Schwarzienne de la fonction $w(z)$:

$$\{w(z), z\} = \frac{w'''(z)}{w'(z)} - \frac{3}{2} \left(\frac{w''(z)}{w'(z)} \right)^2. \quad (\text{IV.49})$$

d. Typiquement, on aura autant de pôles que de sauts de partie imaginaire, et autant de zéros que de points de rebroussement.

Étant donné que $T_{yy} = T(w) + \bar{T}(\bar{w})$, on obtient en posant $f(z) = \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-1} \{w(z), z\}$

$$\frac{\delta f_{A,B}^{(\Lambda)}}{\delta x} = \frac{12\pi L}{c} \left[\int_{w^{-1}(\Lambda)}^{w^{-1}(-\Lambda)} f(z) dz - \int_{w^{-1}(\Lambda+iL)}^{w^{-1}(-\Lambda+iL)} f(z) dz \right]. \quad (\text{IV.50})$$

La deuxième intégrale se déduit simplement de la première en changeant x en $1-x$. La variation d'énergie libre est beaucoup plus simple à calculer dans les deux autres géométries. Par exemple, la transformation conforme qui envoie le demi-plan $\mathbb{H}$ sur une bande infinie de largeur ℓ est $w_0(z) = (\ell/\pi) \ln z$. Après calcul de la dérivée schwarzienne on trouve $\langle T(w) \rangle = -\frac{\pi^2 c}{24\ell^2}$. On en déduit ainsi

$$\frac{\delta f_{A \cup B}^{(\Lambda)}}{\delta x} = 0 \quad (\text{IV.51})$$

$$\frac{\delta f_{A \otimes B}^{(\Lambda)}}{\delta x} = 2\Lambda \frac{\pi c}{24} \left(\frac{1}{(1-x)^2} - \frac{1}{x^2} \right) \quad (\text{IV.52})$$

Finalement, en réalisant la combinaison linéaire (IV.44), les termes proportionnels au cutoff Λ s'annihilent comme il se doit et on obtient :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{A,B}}{\delta x} = \frac{c}{6} \left[\frac{x(2-x)}{2(1-x)^2} \ln x - \frac{1-x^2}{2x^2} \ln(1-x) + \frac{1-2x}{4x(1-x)} \right]. \quad (\text{IV.53})$$

Après intégration il vient

$$\mathcal{F}_{A,B}(x, L) = \frac{c}{8} \left[\ln L + \frac{3-3x+2x^2}{3(1-x)} \ln x + \frac{2-x+2x^2}{3x} \ln(1-x) \right] + \text{cste}, \quad (\text{IV.54})$$

où l'on a ajusté la constante d'intégration pour tenir compte du terme global $(c/8) \ln L$. Elle ne dépend plus donc ni de x , ni de L . Cette expression est bien symétrique sous l'échange $x \rightarrow 1-x$, mais semble très différente du résultat pour l'entropie. Ces deux fonctions sont en fait numériquement très proches. L'équation (IV.54) est le résultat central du papier **{5}**. La fonction que l'on vient de calculer doit être universelle, et est contrôlée uniquement par la charge centrale c de la théorie conforme sous-jacente. Nous l'avons vérifiée dans une chaîne XXZ, pour différentes valeurs du paramètre d'anisotropie Δ . Les résultats numériques sont présentés à la figure IV.8.

Au point $\Delta = 0$, le Hamiltonien se réduit à des fermions libres, et la LBF est donnée par un déterminant de taille $(L/2) \times (L/2)$. Il est ainsi possible d'étudier de très grands systèmes. Nous sommes allés jusqu'à des tailles $L = 4096$. Les données sont en excellent accord avec la prédiction analytique, bien que la convergence ne soit pas très rapide. Pour des valeurs différentes de Δ , il faut utiliser des techniques numériques un peu plus sophistiquées, comme le DMRG. Ces simulations ont été réalisées par Fabien Alet. L'accord est très bon pour $\Delta = 0.5$, mais se détériore significativement à $\Delta = 1$. Un tel comportement est en fait assez générique ce point marque la fin de la ligne critique à $c = 1$, et certains opérateurs marginaux rajoutent des corrections logarithmiques qui perturbent les résultats à taille finie. S'en débarrasser implique d'aller à des tailles de systèmes déraisonnables. Il serait cependant intéressant de pousser plus loin l'analyse, et d'étudier l'effet de ces opérateurs marginaux en CFT, comme il a été fait récemment pour l'entropie[17].

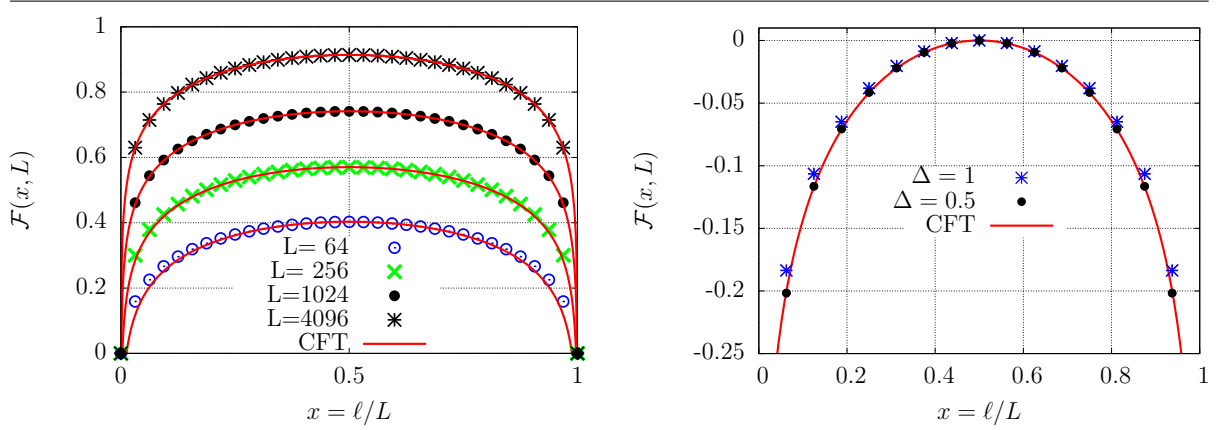


FIGURE IV.8 – *A gauche* : LBF calculée numériquement au point $\Delta = 0$ (fermions libres) et pour des tailles $L = 64, 256, 1024, 4096$. Les points noirs représentent les valeurs numériques, tandis que les courbes rouges sont les prédictions de la théorie conforme (équation (IV.54)). On voit que l'accord numérique/analytique s'améliore quand L augmente. L'empilement régulier de ces courbes les unes au dessus des autres reflète le terme d'échelle global $(c/8) \ln L$. *A droite* : LBF calculée numériquement pour $\Delta = 0.5$ (points noirs) et $\Delta = 1$ (étoiles bleues), et pour une taille $L = 512$. On observe un bon accord à $\Delta = 0.5$, mais il se détériore au point Heisenberg $\Delta = 1$. Je remercie Fabien Alet pour ces calculs numériques DMRG.

IV.2.3 Systèmes unidimensionnels critiques II : effets de bord

Nous avons déjà beaucoup insisté sur le fait que les résultats de **{5}** présentés à la section précédente ne sont pas valables si la condition au bord invariante conforme n'est pas la même partout. Habituellement le plus simple pour les simulations numériques est de laisser les degrés de liberté au bord libres. D'une part ce n'est pas toujours possible, et d'autre part il n'est pas toujours évident de déterminer vers quelle condition au bord invariante conforme la condition que l'on a imposée sur le réseau va flotter. Par exemple, nous allons voir que pour une simple chaîne XX (et plus généralement pour XXZ), il n'est pas possible d'éviter un changement de condition au bord à la limite continue si l'on désire changer le remplissage. C'est l'objet de la prochaine sous-section. Ensuite nous allons montrer comment le calcul de théorie conforme peut-être adapté pour tenir compte de ces effets.

a Effet du remplissage pour le liquide de Luttinger

Essayons de déterminer naïvement la charge centrale d'une chaîne XX sous champ magnétique, par exemple en regardant le comportement de l'énergie du fondamental avec la taille du système

$$E_0(L) = \text{cste} - \sum_{m=1}^{\rho L} \cos\left(\frac{m\pi}{L+1}\right). \quad (\text{IV.55})$$

Le niveau de Fermi se situe à $k_F \sim \rho\pi$, et la vitesse de Fermi est donnée par $v_F = \sin k_F$. On peut comme d'habitude accéder aux asymptotiques de $E_0(L)$ en appliquant la formule d'Euler-Maclaurin :

$$E_0(L) = \alpha L + \beta - \frac{\pi v_F}{24L} [1 - 12(\rho - 1/2)^2] + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (\text{IV.56})$$

Le terme $12(\rho - 1/2)^2$ est assez inattendu, car la charge centrale de ce modèle est bien connue pour valoir $c = 1$. Il est d'ailleurs présent pour toute relation de dispersion satisfaisant $\frac{d\epsilon}{dk}|_{k=0} = 0$. Ce résultat peut-être compris en suivant la démarche de Zagoskin et Affleck[18]. Choisissons tout d'abord précisément le niveau de Fermi, pour un système de taille finie. Une convention naturelle est de le placer entre le dernier moment occupé et le premier vide :

$$k_F = \pi \frac{\pi(n + 1/2)}{L + 1} = \pi \frac{\rho L + 1/2}{L + 1}. \quad (\text{IV.57})$$

En dehors du remplissage moitié $\rho = 1/2$, la symétrie particule-trou n'est pas strictement valable sur le réseau :

$$\epsilon(k_F) - \epsilon(k_n) \neq \epsilon(k_{n+1}) - \epsilon(k_F), \quad (\text{IV.58})$$

et ceci a des conséquences importantes à la limite continue. Le niveau de Fermi à taille finie peut s'écrire

$$k_F = \rho\pi + \pi \frac{\delta(k_F)}{L} + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (\text{IV.59})$$

Zagoskin et Affleck appellent $\delta(k_F)$ « phase shift » et montrent qu'il change la condition effective au bord pour les degrés de liberté à basse énergie^e. La dimension de l'opérateur bcc correspondante est donnée par

$$h = \frac{1}{2} \left[\frac{\delta(k_F)}{\pi} \right]^2. \quad (\text{IV.60})$$

Dans notre chaîne de fermions le calcul du shift est immédiat à partir de l'équation (IV.57), et l'on obtient :

$$h = \frac{1}{2} \left(\rho - \frac{1}{2} \right)^2 \quad (\text{IV.61})$$

L'astuce habituelle pour contourner cette difficulté consiste à choisir avec attention la taille de la chaîne et le nombre de fermions. Par exemple, à remplissage $\rho = 1/4$, la symétrie particule-trou peut être restaurée en étudiant des chaînes de longueur $L = 4n + 1$. Ceci permet d'éliminer le terme « anormal » en $12(1/4 - 1/2)^2$, et l'on retrouve une charge centrale $c = 1$, comme il se doit. Malheureusement, cette astuce n'est d'aucune aide dans notre cas, pour une simple raison de parité. Toujours à remplissage $1/4$ si $L_A = 4n_A + 1$ et $L_B = 4n_B + 1$, alors il n'est pas possible d'avoir $L = 4n + 1$. Il nous faut donc tenir compte de l'opérateur b.c.c dont la dimension est donnée par l'équation (IV.61)

e. Notre chaîne XX peut être décrite à basse énergie par des fermions de Dirac que l'on peut ensuite bosoniser. Avec le phase shift les fermions gauches et droits sont reliés à l'origine par $\psi_R(0) = e^{2i\delta(k_F)}\psi_L(0)$.

b Calculs analytiques

Nous montrons ici comment généraliser le calcul conforme précédent afin de tenir compte de possibles changements de conditions aux bords. Le fait de couper le système en deux induit quatre bords. Nous allons considérer par la suite deux géométries particulières que nous noterons (I) et (II). Elles sont représentées à la figure IV.9, et nous allons les étudier séparément.

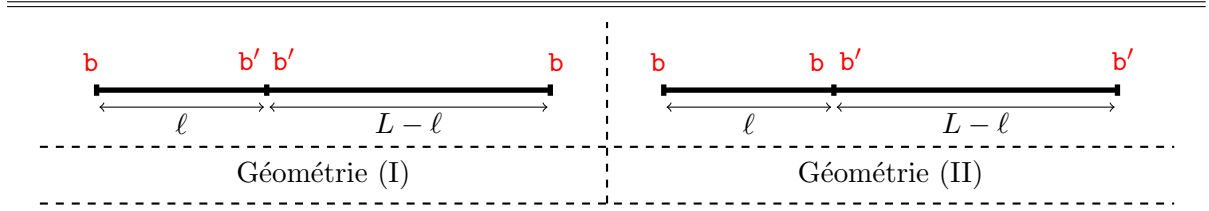


FIGURE IV.9 – Cas considérés avec changement de conditions aux bords.

Géométrie (I) : L'énergie libre non triviale $f_{A,B}$ qu'il nous faut évaluer est montrée à la figure IV.10.

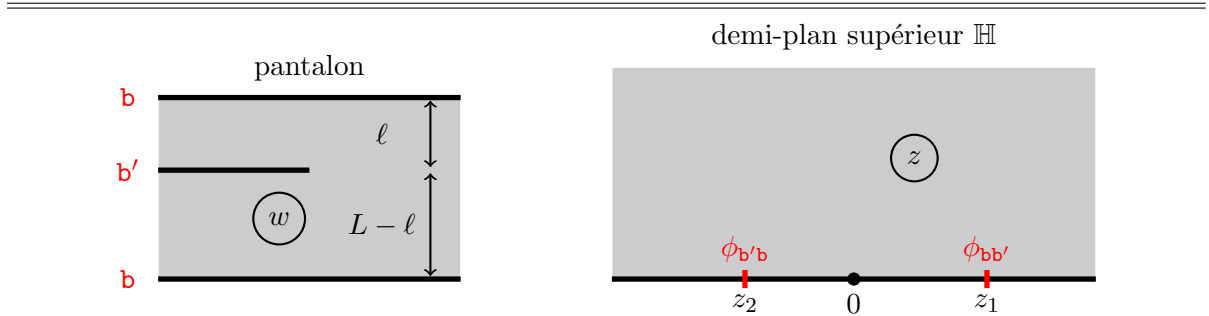


FIGURE IV.10 – Énergie libre du pantalon $f_{A,B}$. Avec $x = \ell/L$, on a ici $z_1 = 1/x - 1$ et $z_2 = -1$. Deux opérateurs de changement de conditions aux bords sont introduit en $z = z_1$ et $z = z_2$.

La variation d'énergie libre du pantalon est maintenant donnée par

$$\delta f_{A,B}^{(\Lambda)} = \frac{\delta \ell}{2\pi} \left[\int_{-\Lambda}^{\Lambda} dx \frac{\langle T_{yy} \phi_{bb'} \phi_{b'b} \rangle}{\langle \phi_{bb'} \phi_{b'b} \rangle} - \int_{-\Lambda+iL}^{\Lambda+iL} dx \frac{\langle T_{yy} \phi_{bb'} \phi_{b'b} \rangle}{\langle \phi_{bb'} \phi_{b'b} \rangle} \right]. \quad (\text{IV.62})$$

Utilisons de nouveau la loi de transformation du tenseur énergie-impulsion

$$T(w) \left(\frac{dw}{dz} \right)^2 = T(z) - \frac{c}{12} \{w(z), z\}. \quad (\text{IV.63})$$

On constate immédiatement que le terme d'anomalie conforme n'est pas influencé par la condition au bord, et va donc contribuer à l'énergie de la même manière qu'à la section précédente :

$$\int_{-\Lambda}^{\Lambda} dx \frac{\langle T_{yy} \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}} \rangle}{\langle \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}} \rangle} = -\frac{c}{12} \int_{w^{-1}(-\Lambda)}^{w^{-1}(\Lambda)} dz f(z) + \int_{w^{-1}(-\Lambda)}^{w^{-1}(\Lambda)} dz \frac{\langle T_{yy}(z) \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}(z_1) \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}(z_2) \rangle}{\langle \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}(z_1) \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}(z_2) \rangle} \left(\frac{dw}{dz} \right)^{-1} \quad (\text{IV.64})$$

Il nous reste donc à calculer le deuxième terme de l'équation précédente. Pour l'évaluer nous utilisons les identités de Ward

$$\langle T(z) \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}(z_1) \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}(z_2) \rangle = \left(\sum_{\alpha=1,2} \left[\frac{h}{(z-z_{\alpha})^2} + \frac{1}{z-z_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial z_{\alpha}} \right] \right) \langle \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}(z_1) \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}(z_2) \rangle. \quad (\text{IV.65})$$

Dans notre cas, les opérateurs b.c.c sont situés en $z_1 = 1/x - 1$ et $z_2 = -1$. On trouve alors

$$\langle \phi_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}(z_1) \phi_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}(z_2) \rangle = |z_2 - z_1|^{-2h} = x^{2h}. \quad (\text{IV.66})$$

$h = h_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} = h_{\mathbf{b}'\mathbf{b}}$ est la dimension de l'opérateur b.c.c. En notant $g(x, \Lambda)$ le deuxième terme de l'équation (IV.64), on obtient

$$g(x, \Lambda) = \int_{w^{-1}(-\Lambda)}^{w^{-1}(\Lambda)} dz \left(\frac{dw}{dz} \right)^{-1} \left[\frac{h}{(z+1)^2} + \frac{h}{(z-\frac{1}{x}+1)^2} + \frac{2hx}{z+1} - \frac{2hx}{(z-\frac{1}{x}+1)} \right] \quad (\text{IV.67})$$

En procédant à la même régularisation que précédemment, on trouve finalement

$$\mathcal{F}_{(\text{I})} = \mathcal{F}_{\mathbf{b}\mathbf{b}'\mathbf{b}\mathbf{b}'} = \frac{c}{8} \left[\ln L + \frac{3 - \frac{48h}{c} - 3x + 2x^2}{3(1-x)} \ln x + \frac{2 - \frac{48h}{c} - x + 2x^2}{3x} \ln(1-x) \right] + \text{cste} \quad (\text{IV.68})$$

La constante dans l'équation précédente pourrait a priori dépendre de L . Ce n'est pas le cas ici car il n'y a pas d'opérateurs b.c.c sur la pointe $w(z=0)$, qui pourrait s'ajouter au terme de Cardy-Peschel. Nous avons aussi vérifié numériquement cette formule dans une chaîne d'Ising en champ transverse, avec des conditions aux bords $\mathbf{b} = +$ et $\mathbf{b}' = -$. Dans ce cas la dimension de l'opérateur est connue pour être $h_{+-} = 1/2$. La figure IV.11 montre un très bon accord des données numériques avec l'équation (IV.68).

Remarquons aussi que ce changement de condition aux bords est suffisant pour complètement inverser l'allure de la fonction à taille finie. Ce phénomène n'est en fait pas si surprenant dans la chaîne d'Ising. En effet si l'on prend la limite $x \rightarrow 0$ (ou $x \rightarrow 1$), Les deux états dont on fait le produit scalaire sont dans des secteurs de parité différents, et la LBF doit tendre vers $+\infty$.

Géométrie (II) : On applique la même méthode qu'au cas (I). Il est possible de dériver une formule similaire à l'équation (IV.68) pour la dépendance en $x = \ell/L$. Focalisons nous cependant sur le terme dominant proportionnel à $\ln L$. On trouve

$$\mathcal{F}_{(\text{II})} \sim \left(\frac{c}{8} + h \right) \ln L. \quad (\text{IV.69})$$

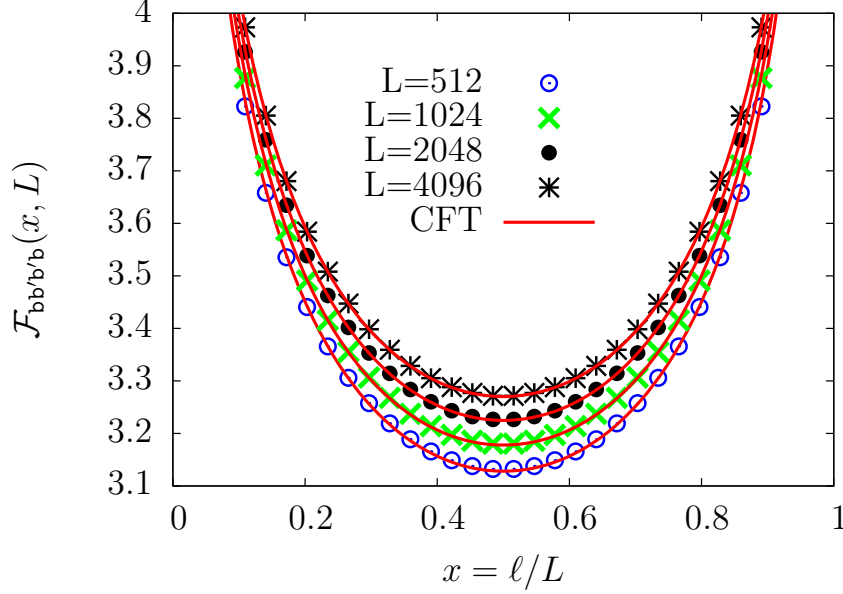


FIGURE IV.11 – Fonction à taille finie pour une chaîne d’Ising avec conditions aux bords $\mathbf{bb'b'b} = + - - +$. Calculs numériques pour des tailles de système $L = 512, 1024, 2048, 4096$. Les courbes rouges sont les prédictions analytiques (équation (IV.68) avec $h = h_{+-} = 1/2$). L’empilement des courbes les unes au dessus des autres reflète le terme d’échelle global en $(c/8) \ln L$.

Il est logique que ce terme soit modifié pour cette géométrie, car un changement de condition au bord intervient sur la pointe. Ce résultat nous permet aussi de comprendre a posteriori le comportement de la LBF pour une chaîne XX à remplissage ρ . En utilisant le résultat de la sous-section a, qui nous donne $h = 1/2(\rho - 1/2)^2$ et en injectant ceci dans l’équation (IV.69), nous retrouvons notre tout premier résultat (IV.30).

IV.2.4 Quelques résultats en dimension supérieure

a Violation de la loi d’aire pour les fermions

Considérons un Hamiltonien de fermions libres, pouvant sauter (à gauche, à droite, en haut ou en bas) sur un réseau carré.

$$H_{A \cup B} = -\frac{1}{2} \sum_{x=1}^{L_x-1} \sum_{y=1}^{L_y-1} \left(c_{x+1,y}^\dagger c_{x,y} + c_{x,y+1}^\dagger c_{x,y} + h.c \right) \quad (\text{IV.70})$$

La bipartition que l’on choisit est représentée sur la figure IV.12. Il est démontré[19, 20] que l’entropie d’un tel système viole la loi d’aire, et que des corrections logarithmiques doivent être rajoutées. Nous allons tâcher de voir si la LBF a un comportement similaire. Pour des raisons de simplicité, plaçons nous à demi-remplissage par la suite.

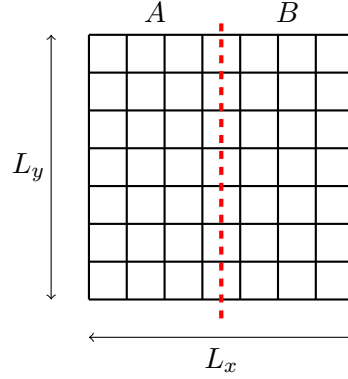


FIGURE IV.12 – Géométrie considérée . On choisit un réseau carré $L_x = L_y = L$ (ici $L = 8$), découpé en deux rectangles $L_x^{(A)} = L_x^{(B)} = L/2$ et $L_y^{(A)} = L_y^{(B)} = L$ de même taille.

Pour L_x et L_y quelconques, H peut-être diagonalisé par l'ansatz :

$$d_{\mathbf{k}}^\dagger = d_{k_x, k_y}^\dagger = \frac{2}{\sqrt{(L_x + 1)(L_y + 1)}} \sum_{x=1}^{L_x} \sum_{y=1}^{L_y} \sin(k_x x) \sin(k_y y) c_{x,y}^\dagger \quad (\text{IV.71})$$

$$k_x = \frac{m_x \pi}{L_x + 1} \quad , \quad m_x = 1, \dots, L_x \quad (\text{IV.72})$$

$$k_y = \frac{m_y \pi}{L_y + 1} \quad , \quad m_y = 1, \dots, L_y \quad (\text{IV.73})$$

Ceci permet de réécrire le Hamiltonien comme

$$H = \sum_{k_x, k_y} -(\cos k_x + \cos k_y) d_{\mathbf{k}}^\dagger d_{\mathbf{k}}. \quad (\text{IV.74})$$

Le fondamental s'obtient en remplissant des niveaux de quasi-impulsion satisfaisant $\epsilon(k_x, k_y) = -(\cos k_x + \cos k_y) \leq 0$. On note FS (« Fermi sea ») l'ensemble des k qui satisfont cette propriété, et par $n = L/2$ leur nombre. On peut faire la même chose pour les sous-systèmes A et B , qui ont pour nombre de fermions respectifs n_A et n_B , avec bien sûr $n_A = n_B$.

$$FS = \{\mathbf{k}'_1, \dots, \mathbf{k}'_n\} \quad (\text{IV.75})$$

$$FS(A) = \{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{n_A}\} \quad (\text{IV.76})$$

$$FS(B) = \{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{n_B}\} \quad (\text{IV.77})$$

Le recouvrement qui nous intéresse peut alors s'exprimer comme

$$\langle A \otimes B | A \cup B \rangle = \langle 0 | \prod_{\mathbf{k} \in FS(A)} d_{\mathbf{k}}^{(A)} \prod_{\mathbf{k} \in FS(B)} d_{\mathbf{k}}^{(B)} \prod_{\mathbf{k}' \in FS} d_{\mathbf{k}'}^\dagger | 0 \rangle, \quad (\text{IV.78})$$

et ce corrélateur se réduit comme d'habitude à un déterminant :

$$\langle A \otimes B | A \cup B \rangle = \det(M_{\alpha\beta})_{1 \leq \alpha, \beta \leq n} \quad (\text{IV.79})$$

$$M_{\alpha, \beta} = \begin{cases} \langle d_{\mathbf{k}_\alpha}^{(A)} d_{\mathbf{k}'_\beta}^\dagger \rangle & , \quad 1 \leq \alpha \leq n_A \\ \langle d_{\mathbf{k}_{\alpha-n_A}}^{(B)} d_{\mathbf{k}'_\beta}^\dagger \rangle & , \quad n_A + 1 \leq \alpha \leq n \end{cases} \quad (\text{IV.80})$$

Les éléments de matrice sont donnés par

$$\begin{aligned} \langle d_{\mathbf{k}}^{(A)} d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle &= \frac{2}{\sqrt{(L_x^{(A)} + 1)(L_x + 1)}} \sum_{x=1}^{L_x^{(A)}} \sin(k_x x) \sin(k'_x x) \delta_{k_y, k'_y} \\ \langle d_{\mathbf{k}}^{(B)} d_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle &= \left(L_x^{(A)} \rightarrow L_x^{(B)} \quad , \quad k'_x x \rightarrow k'_x (x + L_x^{(A)}) \right) \end{aligned} \quad (\text{IV.81})$$

La matrice considérée est en fait diagonale par blocs, chaque bloc indexé par une valeur de k_y . Deux remarques importantes s'imposent à ce point du calcul :

- Le fondamental $|A \cup B\rangle$ est en fait dégénéré, car les énergies à une particule correspondant à $k_x + k_y = \pi$ valent 0. Il y a L états dans ce cas, et il nous en faut choisir $L/2$ de manière à parvenir au remplissage correct $\rho = n/L = 1/2$. Ce problème ne se pose pas pour $|A \otimes B\rangle$
- Les modes k_y que l'on a choisis dans $|A \cup B\rangle$ doivent aussi être occupés pour $|A \otimes B\rangle$. Le produit scalaire vaut sinon 0.

Ceci doit être plus vu comme une pathologie du modèle considéré (la relation de dispersion est trop simple et il y a trop de quantités conservées), que comme une pathologie de la LBF. En tenant compte de ces deux complications, nous obtenons finalement une relation amusante entre la LBF de ce système à $d = 2$ dimensions et la LBF d'une chaîne XX à $d = 1$ dimension

$$\mathcal{F}_{[\text{fermions } 2d]}(L_x = L, L_y = L) = \sum_{j=0}^{L/2} \mathcal{F}_{[\text{XX } 1d]}(p = 2j, L/2, L/2). \quad (\text{IV.82})$$

p est le nombre de fermions dans la chaîne XX, $p = \rho L$, où ρ est le remplissage de la chaîne XX. Ce résultat permet de déduire le comportement de la LBF pour notre système de fermions $2d$, par application directe des formules (IV.30) et (IV.31). Avec $\int_0^1 (1/8 + 1/2(\rho - 1/2)^2) d\rho = 1/6$ on trouve le terme dominant

$$\mathcal{F}_{A,B} = \frac{1}{6} L \ln L + \mathcal{O}(L). \quad (\text{IV.83})$$

La LBF viole donc – tout comme l'entropie[19, 20] – la loi d'aire pour un système de fermions à $2d$. Ce résultat peut facilement se généraliser à des dimensions supérieures, en considérant par exemple un hypercube coupé en deux pavés égaux. On trouve alors un terme dominant en $L^{d-1} \ln L$.

b Ordre topologique

Il serait intéressant que la LBF soit aussi à même de détecter un ordre topologique, dans un système quantique donné. Nous allons présenter ici quelques résultats qui vont dans ce sens.

Revenons à notre modèle de dimères quantiques sur réseau triangulaire, avec fugacité t . Dans la géométrie d'un cylindre infini coupé en deux, nous avons vu dans l'article {7} que la limite $n \rightarrow \infty$ de l'entropie de Rényi déconnectait les deux sous-systèmes A et B . La LBF et S_∞ sont donc égaux pour ce modèle :

$$\mathcal{F}(L) = S_{n=\infty}(L) = - \sum_{k=(2m-1)\pi/L}^{L/2} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k - t \cos k}{\sqrt{t^2 + \sin^2 k + \sin^4 k}} \right). \quad (\text{IV.84})$$

On peut alors vérifier que la LBF contient bien le terme sous-dominant $-\ln 2$, caractéristique du liquide topologique $\mathbb{Z}_2$. Cette égalité entre la LBF et S_∞ est aussi vrai dans d'autres systèmes, comme le modèle de Kitaev, ou les « String-nets » de Levin et Wen. Comme l'entropie de Rényi contient le terme topologique, il en est de même pour la LBF. Notons cependant que l'égalité entre ces deux quantités n'est pas valide en général. Il est cependant raisonnable d'espérer – même si nous ne l'avons pas vérifié – que la LBF permet de déterminer le terme topologique en général.

IV.3 Évolution temporelle suite à une trempe locale

Après notre étude prolongée de la fidélité bipartite, revenons maintenant aux trempes locales. Nous sommes maintenant intéressés par l'évolution temporelle du système, après la trempe

$$|\psi(t)\rangle = \exp(itH_{A \cup B}) |A \otimes B\rangle. \quad (\text{IV.85})$$

Une telle trempe est habituellement assez molle, et l'on peut espérer^f qu'elle va principalement générer des excitations de basse énergie. Si c'est le cas, on peut alors l'étudier par des méthodes de théorie conforme. Nous allons comme précédemment focaliser notre attention sur les effets de taille finie. Cette section est découpée en deux parties.

Dans la première nous présentons la méthode pour calculer analytiquement l'évolution temporelle de l'entropie et l'écho de Loschmidt, du moins quand c'est possible. Notons que cet écho de Loschmidt peut aussi être vu comme une version temporelle de la LBF. C'est pourquoi nous allons utiliser une notation similaire à la LBF pour (le logarithme de) l'écho de Loschmidt :

$$\mathcal{F}(t) = -\ln \mathcal{L}(t) = -\ln |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2. \quad (\text{IV.86})$$

Nous allons en particulier expliquer pourquoi l'évolution du système doit être *périodique*.

Dans la deuxième nous réalisons des vérifications numériques de nos formules, et interprétons physiquement certains résultats inattendus.

f. Motivés entre autres par le fait que le produit scalaire $\langle A \cup B | A \otimes B \rangle$ tend très lentement vers 0.

IV.3.1 Découpage, collage et ping-pong

a Périodicité

Pour une chaîne de spins critique de taille L , la partie de basse énergie du spectre du Hamiltonien H_{AUB} est donnée par

$$E_\alpha = LE_{\text{extensif}} + E_{\text{frontière}} + \frac{\pi v_F}{L} \left(h_\alpha - \frac{c}{24} \right) + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (\text{IV.87})$$

LE_{extensif} est la partie extensive de l'énergie, $E_{\text{frontière}}$ est l'énergie de frontière, v_F est la vitesse de Fermi, et c est la charge centrale. Les h_α sont les dimensions conformes des opérateurs ϕ_α qui apparaissent dans la partie de basse énergie de la théorie. Le point crucial est que tous ces h_α sont essentiellement séparés par des entiers^g. Si l'évolution temporelle est dominée par la partie basse du spectre, alors un phénomène intéressant survient : après un temps $t = 2L/v_F$, toutes les composantes de la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ attrapent la même phase qu'au temps $t = 0$. La fonction d'onde est ainsi périodique. Ce fait peut s'interpréter intuitivement de la manière suivante (voir figure IV.13) :

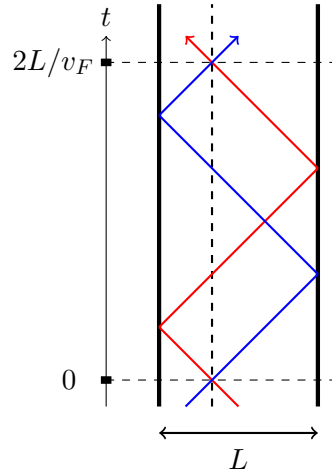


FIGURE IV.13 – L'interprétation en termes de quasi-particules est une manière utile de penser à l'évolution temporelle qui suit une trempe locale à taille finie. Toutes les quasi-particules de la théorie conforme se déplacent à la vitesse v_F . Après un temps $T = 2L/v_F$, on voit que les quasi-particules reviennent à la même position. L'évolution du système est donc périodique.

Les excitations de basse énergie peuvent être vues comme des quasi-particules se déplaçant à la vitesse v_F . Ces particules peuvent aussi rebondir sur les parois comme des balles de ping-pong. Cette image est assurément heuristique, et ne permet pas de prédiction quantitative.

^g. En fait, ceci n'est vrai que pour des états membres d'une même famille conforme, c'est à dire les descendants d'un même opérateur primaire.

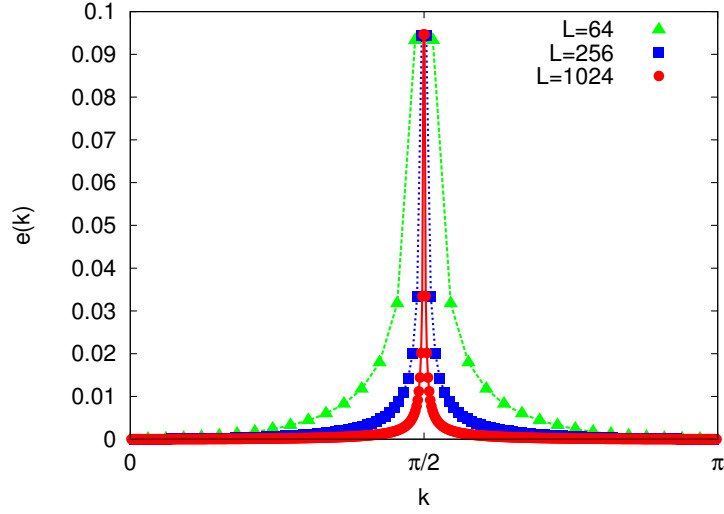


FIGURE IV.14 – « Densité d'excitation » $e(k)$ pour une chaîne XX de taille L coupée en deux parties égales de tailles $L/2$. On peut voir que les excitations du système se concentrent au voisinage du niveau de Fermi $k_F = \pi/2$.

Il est cependant possible de « visualiser » ces particules dans des systèmes de fermions libres. Reprenons notre chaîne XX, coupée en deux parts égales, et notons $f_k^\dagger$ les fermions qui diagonalisent la chaîne coupée en deux. On a

$$|A \otimes B\rangle = \left(\prod_k f_k^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{IV.88})$$

On peut alors s'intéresser à la quantité

$$e(k) = \left| \langle A \cup B | f_k^\dagger f_k | A \cup B \rangle - \langle A \otimes B | f_k^\dagger f_k | A \otimes B \rangle \right|. \quad (\text{IV.89})$$

Le deuxième terme de l'équation précédente est une fonction en escalier : $\langle A \otimes B | f_k^\dagger f_k | A \otimes B \rangle = 1 - \Theta(k - k_F)$. $e(k)$ est utile pour déterminer où se situent les excitations dans l'espace des k , et peut se calculer numériquement pour des tailles finies. Voir la figure IV.14 pour un exemple à remplissage $\rho = 1/2$. On observe, comme attendu, que la plupart des excitations se concentrent au niveau de Fermi $k_F = \pi/2$. Les excitations au niveau de Fermi sont exactement celles décrites par la théorie conforme.

b Trempe locales en théorie conforme

Nous allons nous intéresser ici à la trempe locale, en imposant les deux conditions suivantes

1. On réalise une trempe locale de type découpage-collage.
2. La condition au bord est la même partout.

En général, l'état initial $|A \cup B\rangle$ se décompose comme suit

$$|A \otimes B\rangle = \sum_a \sum_k c_{a,k} |\phi_{a,k}\rangle, \quad (\text{IV.90})$$

où les a indexent les familles conformes, et les k indexent les descendants au sein d'une même famille. Cette décomposition doit en principe nous donner l'évolution temporelle après la trempe, mais le calcul des $c_{a,k}$ est en général difficile. Les hypothèses que nous avons faites (1.) et (2.), impliquent que seule la famille de l'identité a un produit scalaire non nul $c_{a,k}$. En effet H_A et H_B ont tous les deux la même condition aux bords gauches et droites, et donc $|A\rangle$ et $|B\rangle$ correspondent à la famille de l'identité. La fusion de ces deux familles donne à nouveau l'identité. En conclusion, l'évolution temporelle du système doit être périodique à la limite thermodynamique. Nous allons par la suite étudier deux quantités : l'entropie d'intrication (en suivant Calabrese et Cardy[21]), et l'écho de Loschmidt. Nous allons voir que ce dernier se calcule de manière très similaire à la LBF.

c Écho de Loschmidt : méthode

Prenons l'exemple d'une trempe découpage collage à taille finie $L_A = L_B = L/2$. Nous réalisons le calcul de l'écho de Loschmidt en temps imaginaire :

$$\mathcal{L}(\tau) = |\langle A \otimes B | e^{-\tau H} | A \otimes B \rangle|^2. \quad (\text{IV.91})$$

Pour ce faire, nous allons écrire le fondamental de la chaîne découplée $|A \otimes B\rangle$ comme

$$|A \otimes B\rangle \propto \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} e^{-\lambda(H_A + H_B)} |s\rangle, \quad (\text{IV.92})$$

valable pour n'importe quel état $|s\rangle$ ayant un produit scalaire non nul avec $|A \otimes B\rangle$. L'écho de Loschmidt peut alors se réécrire comme

$$\mathcal{L}(\tau) = \text{cst} \times \left| \lim_{\lambda \rightarrow \infty} Z_{A,B}(\tau) \right|^2, \quad Z_{A,B}(\tau) = \langle s | e^{-\lambda(H_A + H_B)} e^{-\tau H_{A \cup B}} e^{-\lambda(H_A + H_B)} | s \rangle. \quad (\text{IV.93})$$

C'est la fonction de partition d'un modèle statistique sur un « double pantalon » représenté à la figure IV.15 à gauche.

Comme toujours, il y a une partie extensive dans l'énergie libre $\mathcal{F}_{A,B}(\tau) = -\ln Z_{A,B}(\tau)$ venant de la région de taille τ entre les deux pointes de la figure IV.15. Cette partie ne va contribuer que pour une phase après retour en temps réel ($\tau \rightarrow it$), et disparaît dans la norme qui définit l'écho de Loschmidt. Il y a aussi une partie extensive à l'énergie libre qui croît linéairement avec la taille du système (et diverge lorsque $\lambda \rightarrow \infty$). Cette contribution peut être absorbée dans la constante. Cette constante sera fixée après prolongement analytique, de manière à vérifier $\mathcal{L}(t=0) = 1$. La seule partie pertinente dans le calcul de l'écho de Loschmidt vient des pointes.

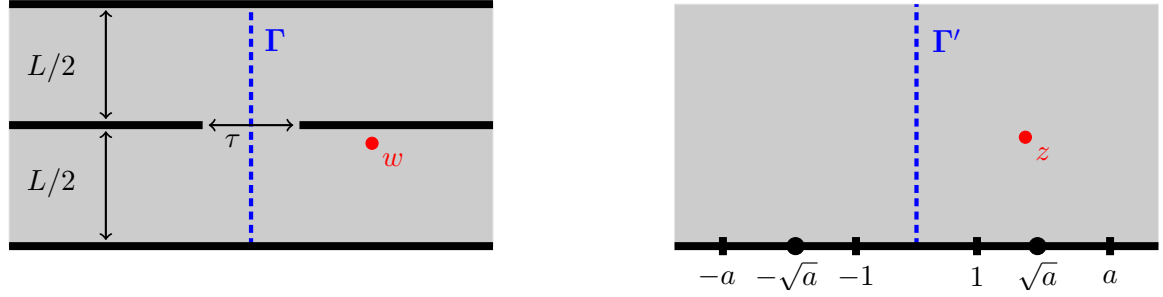


FIGURE IV.15 – *A gauche* : double pantalon. *A droite* : demi-plan supérieur $\mathbb{H}$.

La dépendance de $\mathcal{F}(\tau) = -\ln \mathcal{L}(\tau)$ en τ peut-être évaluée à l'aide d'une transformation conforme. Considérons la transformation infinitésimale $w \mapsto w + \delta\tau$ pour w à droite de la ligne Γ de la figure IV.15, et $w \mapsto w$ à gauche. Celle-ci change la distance entre les deux pointes de $\delta\tau$. La variation d'énergie libre $\mathcal{F}$ est encodée dans le tenseur énergie-impulsion $T(w)$ comme

$$\frac{1}{2}\delta\mathcal{F} = \frac{\delta\tau}{2\pi} \left(\int_{\Gamma} \langle T(w) \rangle dw + c.c \right), \quad (\text{IV.94})$$

et la fonction à un point du tenseur énergie impulsion s'obtient à l'aide d'une transformation du demi-plan supérieur $\mathbb{H}$ (figure IV.15 à droite) vers le double pantalon. La fonction à un point du tenseur énergie impulsion est zéro dans le demi plan supérieur. En utilisant la loi de transformation (IV.48), il vient

$$\frac{1}{2}\delta\mathcal{F} = -\frac{c}{12} \frac{\delta\tau}{\pi} \int_{\Gamma'} f(z) dz \quad (\text{IV.95})$$

$$f(z) = \{w(z), z\} \left(\frac{dw}{dz} \right)^{-1} \quad (\text{IV.96})$$

Γ' est l'image réciproque de Γ par $w(z)$:

$$\Gamma' = w^{-1}(\Gamma). \quad (\text{IV.97})$$

L'équation (IV.95) est valable à priori pour tout type de double pantalon. Spécifions maintenant la transformation conforme correspondant au double pantalon symétrique :

$$w(z) = \frac{L}{2\pi} \left[\ln \left(\frac{z-1}{z+1} \right) + \ln \left(\frac{z-a}{z+a} \right) - i\pi \right] \quad (\text{IV.98})$$

$$\tau(a) = \frac{4L}{\pi} \operatorname{arctanh} \left(a^{-1/2} \right) \quad (\text{IV.99})$$

Cette transformation possède 4 singularités pour $z = \pm 1, \pm a$ et 2 points de rebroussements (correspondant aux deux pointes) en $z = \pm\sqrt{a}$. Pour cette transformation, $\Gamma = i[-L/2, L/2]$ et $\Gamma' = i\mathbb{R}_+$. L'intégrale (IV.95) peut s'évaluer en doublant l'intervalle d'intégration $\Gamma' = i\mathbb{R}_+ \rightarrow$

$i\mathbb{R}$, ce qui multiplie l'intégrale par 2. Le contour peut ensuite être refermé par un grand demi-cercle à droite $\{Re^{i\theta}\}$ pour $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$ et $R \rightarrow +\infty$. Appelons ce contour $\mathcal{C}$. On a alors

$$\int_{\Gamma'} f(z) dz = \frac{1}{2} \int_{i\mathbb{R}} f(z) dz = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}} f(z) dz \quad (\text{IV.100})$$

$f(z)$ a trois pôles à l'intérieur du contour $\mathcal{C}$, en $z = 1, \sqrt{a}, a$, et l'intégrale se calcule par résidus. Cependant, nous sommes uniquement intéressés par la dépendance en τ (via $a(\tau)$) de l'énergie libre. Les résidus en $z = 1$ et $z = a$ n'en dépendent pas, et la seule contribution non triviale provient de la pointe, $w(z = \sqrt{a})$. On trouve finalement

$$\boxed{\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \tau} = \frac{c}{6} \times \text{Res} [f(z); z = \sqrt{a}]} \quad (\text{IV.101})$$

Nous allons revenir par la suite sur cette équation. Après calcul du résidu nous obtenons

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \tau} = \frac{\pi c}{16L} \frac{a^2 + 6a + 1}{\sqrt{a}(a + 1)}. \quad (\text{IV.102})$$

L'équation (IV.99) peut s'inverser explicitement

$$\tau(a) = \frac{4L}{\pi} \text{arctanh} \left(a^{-1/2} \right) \Leftrightarrow a(\tau) = \frac{1}{\tanh^2 \left(\frac{\pi \tau}{4L} \right)}. \quad (\text{IV.103})$$

On obtient ainsi

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \tau} = \frac{\pi c}{4L} \frac{1}{\tanh \left(\pi \tau / L \right)}. \quad (\text{IV.104})$$

Après intégration il vient

$$\mathcal{F}(\tau) = \frac{c}{4} \ln \left| \sinh \left(\frac{\pi \tau}{L} \right) \right| + \text{cste}. \quad (\text{IV.105})$$

La constante dans l'équation précédente dépend à priori de L et x , car nous n'avons pas tenu compte de ces termes dans le calcul. La dépendance en L s'obtient facilement en appliquant de nouveau la formule de Cardy-Peschel, avec deux angles 2π . Ceci rajoute une contribution en $(c/4) \ln L$. Nous n'avons pas calculé la dépendance en x , qui n'est pas nécessaire pour nos besoins. Le résultat final s'obtient en réalisant le prolongement analytique $\tau \rightarrow i v_F t + \epsilon$. Le régulateur ϵ est nécessaire pour que l'écho soit défini à $t = 0$. Il vient

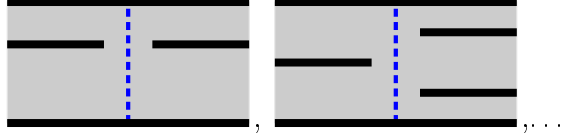
$$\mathcal{F}(t) = \frac{c}{4} \ln \left| \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi v_F t}{L} \right| + \text{cste} \quad , \quad t \gg \epsilon. \quad (\text{IV.106})$$

On présentera une vérification numérique de cette formule dans la section suivante. A ce stade, plusieurs remarques s'imposent :

- L'écho de Loschmidt est bien périodique de période $T = L/(v_F)$, comme attendu par l'interprétation en termes de quasi-particules.
- (IV.106) correspond à l'écho de Loschmidt dans la géométrie infinie $(c/4) \ln t$, où le temps a été remplacé par son analogue façon corde sur un cercle. $t \rightarrow (L/\pi) \sin(\pi t/L)$. On obtient souvent un tel résultat en CFT.

- Ce résultat peut être retrouvé par une méthode plus algébrique [22], exploitant l'écriture de l'état de bord « pantalon » à l'aide des modes de Virasoro[23].

Notons aussi que la méthode peut facilement être généralisée (à des difficultés techniques près) à des pantalons plus complexes, comme un pantalon asymétrique ($L_A \neq L_B$), ou bien un pantalon à plusieurs pointes (détecteur, voir ci-après) :



Ces géométries sont étudiées en détail dans l'article. Les deux points qu'il faut garder à l'esprit pour généraliser le calcul sont les suivants :

- L'équation (IV.101) est en fait générale. Avec un nombre arbitraire de découpages, on va toujours utiliser un chemin Γ qui sépare les pointes gauches des pointes droites. La seule dépendance temporelle non triviale sera encodée dans le (ou éventuellement les) résidu(s) sur la(les) pointe(s) droite(s). Le choix de la droite est évidemment arbitraire, et l'on obtiendrait le même résultat en faisant le calcul « à gauche ».
- Dans le calcul précédent nous avons obtenu l'énergie libre en fonction d'un paramètre a dans la transformation conforme. La distance entre les deux pointes dans la géométrie du pantalon est une fonction $\tau(a)$. Bien que l'on y soit parvenu dans ce cas symétrique, il n'est en général pas possible d'inverser cette relation pour trouver $a(\tau)$. Cela n'est pas un obstacle au calcul analytique : il suffit alors de réaliser le prolongement analytique de manière implicite : $a(i\tau + \epsilon)$ est calculé en résolvant – le plus souvent numériquement – l'équation $i\tau + \epsilon = a$ pour chaque pas de temps, et en réinjectant la solution dans l'énergie libre $\mathcal{F}(a)$.

Remarquons que ces généralisations à des géométries asymétriques ne sont pas purement gratuites. Elles vont nous permettre de trouver des effets de cône de lumière assez saisissants : le comportement du système sera en effet radicalement différent quand les deux quasi-particules se trouveront dans le même sous-système. On discutera ces deux effets dans les deux prochaines sous-sections, et l'on fournira aussi des vérifications numériques de ces considérations.

d Entropie d'intrication : méthode

Le comportement de l'entropie d'intrication après une trempe a déjà été étudié par Calabrese et Cardy, dans le cas de géométries infinies[21]. Leur méthode peut facilement être appliquée à certains systèmes de taille finie, et c'est ce que nous allons faire ici, sur l'exemple du pantalon symétrique. Pour ce calcul, il est pratique de considérer l'entropie de Rényi

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln(\text{Tr } \rho^n), \quad (\text{IV.107})$$

définie a priori pour tout réel $n > 0$. L'entropie d'intrication est la limite $n \rightarrow 1$ de cette quantité. La stratégie habituelle consiste alors à considérer $\text{Tr } \rho^n$ pour n entier, $n \geq 2$. Dans ce cas, $\text{Tr } \rho^n$ a une interprétation simple en terme de fonction de partition sur une surface de

Riemann à n feuillets, et l'on peut utiliser les techniques typiques de CFT pour l'évaluer. L'on espère ensuite que le résultat trouvé est analytique en n , et redonne le résultat correct lorsque $n \rightarrow 1$. On a présenté au chapitre précédent un exemple de système 2d simple où cette « astuce des répliques » ne marche pas. Cependant cette méthode est habituellement d'une efficacité remarquable dans le contexte des systèmes critiques quantiques 1d.

Comme expliqué dans [10, 21], $\text{Tr} \rho^n$ se transforme comme une fonction à un point d'un opérateur primaire Φ_n sous une transformation conforme. Sa dimension conforme est donnée par

$$x_n = \frac{c}{12} \left(n - \frac{1}{n} \right). \quad (\text{IV.108})$$

La transformation conforme dont on a besoin est très similaire à celle de l'écho de Loschmidt, au remplacement de τ par 2ε près. Elle est représentée à la figure IV.16

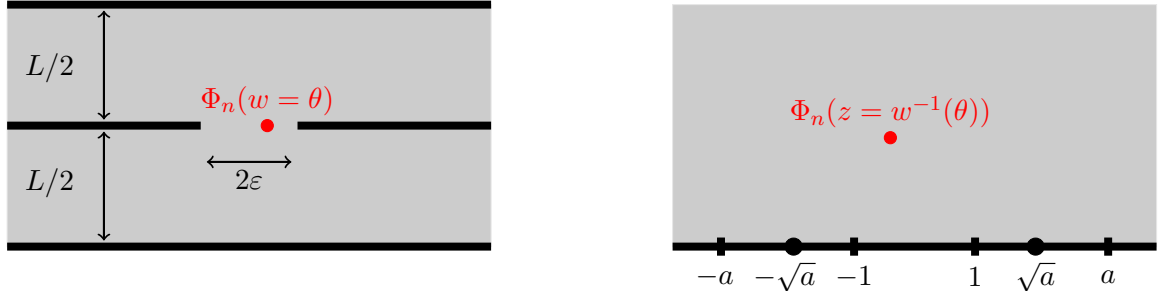


FIGURE IV.16 – *A gauche* : géométrie du double pantalon. *A droite* : demi-plan supérieur $\mathbb{H}$.

L'entropie de Rényi est alors donnée par

$$S_n \sim \frac{1}{1-n} \ln |\langle \Phi_n(w) \rangle|, \quad (\text{IV.109})$$

et la fonction à un point s'obtient par transformation inverse sur le demi-plan $\mathbb{H}$:

$$\langle \Phi_n(w) \rangle = \left| \frac{1}{\text{Im}(z)} \frac{dz}{dw} \right|^{x_n}. \quad (\text{IV.110})$$

Il vient

$$S_n \sim -\frac{c}{12} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \ln \left| \frac{1}{\text{Im}(z)} \frac{dz}{dw} \right|. \quad (\text{IV.111})$$

Pour réaliser ce calcul, il est important de pouvoir inverser $w(z)$. C'est en fait possible dans cette géométrie :

$$z(w) = \coth \left(\frac{\pi \varepsilon}{2L} \right) \frac{1 + \zeta}{1 - \zeta} \quad \text{avec} \quad \zeta = \sqrt{\frac{\sinh \frac{\pi}{L}(w + \varepsilon)}{\sinh \frac{\pi}{L}(w - \varepsilon)}} \quad (\text{IV.112})$$

Comme la bipartition coïncide avec le découpage, il nous faut évaluer l'opérateur de twist Φ_n entre les deux pointes, à un point réel $w = \theta$, avec $-\varepsilon < \theta < \varepsilon$:

$$\langle \Phi_n(w) \rangle \propto \left| \frac{\pi \sinh \left[\frac{\pi}{L} 2\varepsilon \right]}{2 \sinh \left[\frac{\pi}{L} (\varepsilon + \theta) \right] \sinh \left[\frac{\pi}{L} (\varepsilon - \theta) \right]} \right|^{x_n}. \quad (\text{IV.113})$$

Après prolongement analytique $\theta \rightarrow iv_F t$, on trouve finalement

$$S(t) = \frac{c}{3} \ln \left| \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi v_F t}{L} \right| + \text{cste} \quad , \quad v_F t \gg \varepsilon. \quad (\text{IV.114})$$

Cette expression précise avait déjà été devinée[24] sur la base de simulations numériques dans le chaîne d'Ising. Une fois de plus, le résultat peut se déduire du calcul pour un système infini, où l'on a remplacé le temps par son analogue façon corde sur un cercle. Discutons maintenant certaines généralisations possibles de ce calcul :

- Toujours pour un pantalon symétrique, il est possible de mesurer l'entropie d'un sous-système différent de celui choisi pour le découpage. Par exemple, on peut mesurer l'entropie pour un sous-système de taille $L_A = L/2 - l$. Il faut alors insérer l'opérateur de twist à un point $w = \theta + il$. Le calcul est significativement plus pénible, mais reste néanmoins faisable. Voir plus de détails dans l'article {5}. Cette idée est exploitée en IV.3.2e.
- Pantalon asymétrique : ce cas est encore plus difficile, car il est nécessaire d'inverser le mapping conforme $w(z)$. Nous avons réussi à obtenir une formule fermée pour $L_A = L/3$. Inverser $w(z)$ revient alors à résoudre une équation du troisième degré. Cependant, la solution du problème n'est pas particulièrement éclairante physiquement. Voir l'article pour les formules et quelques détails supplémentaires.

IV.3.2 Comparaison analytique/numérique

Dans cette section nous procédons à des vérifications numériques des prédictions établies précédemment. Ceci va nous permettre de confirmer l'interprétation en termes de quasi-particules, mais aussi de mettre en évidence des effets de « cône de lumière » intéressants.

a Systèmes de fermions libres considérés

Nous allons considérer le cas d'une chaîne XY en champ transverse

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{L-1} \left[\left(\frac{1+r}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-r}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \right] - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z. \quad (\text{IV.115})$$

Ce Hamiltonien dépend de deux paramètres $0 \leq r \leq 1$ et $h \geq 0$. On suppose L pair, et l'on impose des conditions aux bord libres pour les spins. Il est bien connu que ce Hamiltonien peut se mettre sous forme quadratique en fonction d'opérateurs fermioniques, et diagonalisé par une transformation de Bogoliubov.

$$H = \sum_{m=1}^L \epsilon_m \left(d_m^\dagger d_m - 1/2 \right), \quad (\text{IV.116})$$

où les ϵ_m sont les énergies à une particule, et les $d_m, d_m^\dagger$ vérifient les relations de commutation fermioniques habituelles. La méthode de calcul de l'entropie pour un tel système est bien connue[25, 26], et nécessite la seule diagonalisation d'une matrice $2L_A \times 2L_A$. L'écho de Loschmidt est quant à lui donné par un déterminant $L \times L$, comme expliqué dans l'appendice de {5}. La chaîne XY est un des modèles exactement solubles les plus simples, et son diagramme de phase est suffisamment riche pour tester les prédictions de la théorie conforme. Il y a en particulier deux lignes critiques, en fonction des paramètres r et h

- ligne critique du boson libre : $r = 0$ et $-1 < h < 1$. C'est en fait une chaîne XX. Comme on l'a vu précédemment, à $h \neq 0$, le remplissage n'est plus $\rho = 1/2$, et il faut tenir compte d'opérateurs b.c.c. La limite continue est une théorie conforme à $c = 1$, parfois aussi appelé liquide de Luttinger.
- ligne critique du fermion libre : $r > 0$ et $h = 1$. Ce modèle est dans la classe d'universalité du modèle d'Ising, et donc est à $c = 1/2$. Au point $r = 1$ et $h = 1$, on retrouve la chaîne d'Ising en champ transverse.

b Cas symétrique

Commençons par le plus simple, à savoir le cas $L_A = L_B = L/2$. En dehors de la ligne critique, l'entropie et l'écho saturent rapidement après une brève augmentation, et leur comportement n'est donc pas particulièrement intéressant. Dans le cas critique – et comme expliqué en détails plus haut – on s'attend à ce que ces deux quantités deviennent périodiques. Quelques résultats numériques sont présentés à la figure IV.17, pour une chaîne XX critique à demi-remplissage.

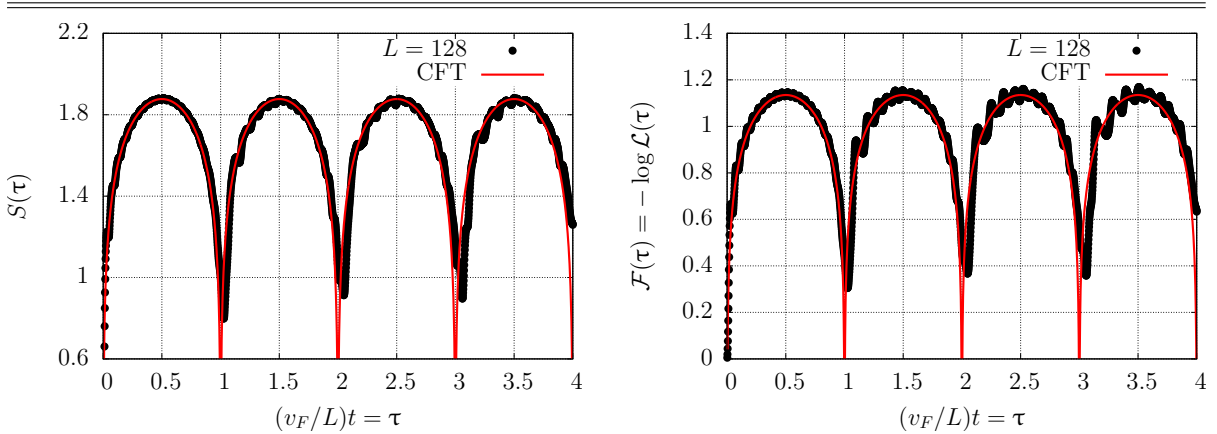


FIGURE IV.17 – Entropie d'intrication (à gauche) et écho de Loschmidt (à droite) pour un système fini de taille $L = 128$, tracé en fonction du temps réduit $v_F t/L$. On observe 4 oscillations, bien décrites par la CFT. Les oscillations rapides supplémentaires qui apparaissent sont des effets de réseau, qui diminuent quand on va vers des tailles plus grandes. Si l'on attend suffisamment longtemps, les corrections en $1/L^2$ dans le spectre d'énergie détruisent les oscillations, et la périodicité est perdue.

Les prédictions analytiques faites à la section précédente (IV.114) et (IV.106) sont bien vérifiées. Le système critique ne parvient donc pas à thermaliser après la trempe, contrairement au système gappé. Les comportements de nos deux quantités sont très similaires. Signalons cependant deux petites différences

- On peut observer sur la figure que les effets de taille finie sont plus importants pour l'écho de Loschmidt.
- L'entropie ne dépend pas du remplissage ρ , alors que l'écho en dépend. Changer le remplissage revient à insérer des opérateurs de changement de condition au bord dont on a calculé la dimension précédemment. On vérifie que l'équation (IV.106) doit alors être modifiée en remplaçant c (qui vaut $c = 1$) par $c \rightarrow 1 + 4(\rho - 1/2)^2$.

c Cas asymétrique et cône de lumière

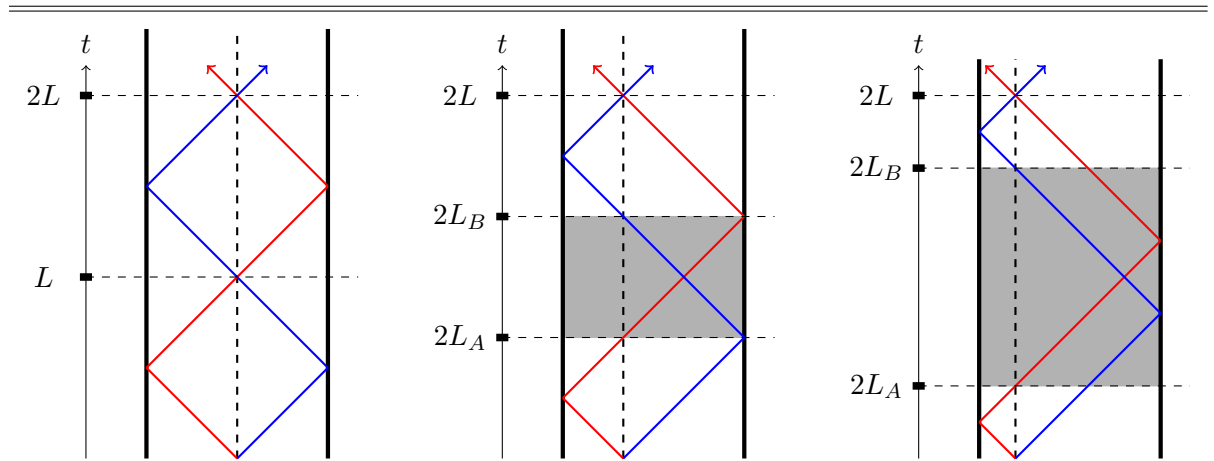


FIGURE IV.18 – Représentation des quasi-particules émises après la trempe. Elles se propagent à la vitesse v_F et rebondissent de manière élastique sur les murs. *A gauche* : $x = L_A/L = 1/2$, *au centre* : $x = 1/3$, *à droite* : $x = 1/5$. Nous nommons « région 2 », la région pour laquelle les deux quasi-particules sont dans le même sous-système, ici *B*. Elle est coloriée en gris.

Il est naturel de s'intéresser aussi à des géométries non symétriques. Dans ce cas, la période des oscillations doit être multipliée par 2. Une conséquence plus intéressante est toutes les quasi-particules peuvent se retrouver dans le même sous-système pendant certains intervalles de temps. On s'attend alors à ce que le comportement de la fonction d'onde soit radicalement différent. Par la suite nous appellerons

- Région 1, les intervalles de temps pour lesquels les deux quasi-particules sont dans un sous-système *différent*.
- Région 2, les intervalles de temps pour lesquels les deux quasi-particules sont dans un *même* sous-système.

Voir la figure IV.18 pour une représentation graphique. La région 2 est coloriée en gris sur la

figure, et n'existe que si $x \neq 1/2$. Nous allons discuter deux cas séparément : $x = \ell/L = 1/3$, et $x \rightarrow 0$ (géométrie semi-infinie). Pour simplifier les notations, nous introduisons aussi le temps adimensionné

$$\tau = \frac{v_F}{L} t. \quad (\text{IV.117})$$

Géométrie $x = 1/3$: Les résultats numériques et analytiques sont présentés à la figure IV.19. La région 2 est donnée par les intervalles $\tau \in [2/3 + p, 4/3 + p]$, avec $p \in \mathbb{N}$. La région 1 est son complémentaire.

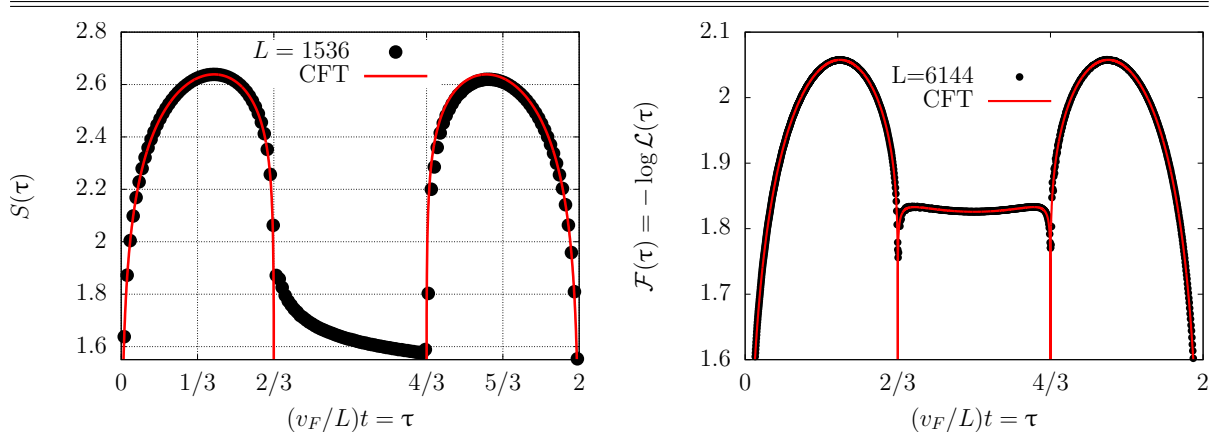


FIGURE IV.19 – Évolution temporelle en fonction du temps réduit $\tau = (v_F/L)t$ pour un rapport d'aspect $x = 1/3$. *A Gauche* : entropie d'intrication $S(\tau)$. *A Droite* : Écho de Loschmidt logarithmique $\mathcal{F}(\tau)$. On voit que les deux quantités diffèrent dans la région $2/3 < \tau < 4/3$. Les plateaux de l'écho sont quasi-plats et bien décrits par la prédiction analytique. L'entropie quand à elle décroît de manière non universelle.

Comparons maintenant les résultats pour l'écho de Loschmidt et pour l'entropie :

- Région 1 : les deux observables ont un comportement similaire, et l'accord entre numérique et l'analytique est excellent.
- Région 2 : l'écho de Loschmidt évolue très peu, et développe un plateau. Ce plateau est bien décrit par la théorie conforme, et remarquablement plat. L'entropie par contre décroît lentement, alors que l'on attendait qu'elle reste quasi-constante. Ce comportement a déjà été observé dans la géométrie semi-infinie[26], et est dû à une valeur propre anormale dans la matrice densité. Cette décroissance est non universelle, comme on peut le vérifier en changeant de modèle, ou en évaluant d'autres entropies de Rényi^h.

Le comportement de ces deux quantités dans la région 2 est assez difficile à appréhender intuitivement. D'une part il est surprenant que l'entropie ne soit plus bien décrite par la théorie

^h. La formule (IV.111) prédit que l'entropie de Rényi S_n satisfait pour son terme dominant la relation $2S_n = (1 + 1/n)S_1$. Si ce n'est pas le cas, alors cela signifie que le calcul de théorie conforme n'est plus valide, et que l'on a affaire à un comportement non universel.

conforme, alors que l'écho si. D'autre part, le plateau que développe l'écho est lui aussi physiquement mystérieux, bien que l'on dispose d'une formule ! Pour tenter de clarifier le second point nous avons aussi étudié la limite $x \rightarrow 0$. C'est l'objet du prochain paragraphe.

Géométrie semi-infinie : On considère un système de taille L très grande devant la taille du système A : $\ell = L_A \ll L$. Dans ce cas la région 1 s'étend sur l'intervalle $[0; 2\ell/v_F]$, et toutes les particules relativistes quittent ensuite définitivement le système A . Nous avons déjà expliqué qu'un calcul exact de l'entropie dans cette situation n'était pas aisé. Calabrese et Cardy[21] sont cependant parvenus à une solution approchée, valable tant que les quasi-particules n'ont pas encore rebondi sur la paroi.

$$S(t) \simeq \frac{c}{6} \ln \left[\frac{4\ell}{\pi} \sin \left(\frac{\pi t}{2\ell} \right) \right]. \quad (\text{IV.118})$$

Cette solution a plus tard été vérifiée numériquement[26], où il a été observé pour la première fois une décroissance non universelle semblable à celle du cas $x = 1/3$. On peut s'attendre à ce que la courbe de l'écho soit totalement universelle, et nous allons voir que c'est effectivement le cas. L'écho de Loschmidt logarithmique peut s'exprimer sous forme implicite, en utilisant à nouveau le temps « réel » réduit $\tau = v_F t / \ell$:

$$\mathcal{F}(b) = \frac{c}{6} \left[\operatorname{Re} \left(\frac{2}{1-b^2} \right) + \frac{3}{2} \ln |b| - \ln |1-b^2| \right] \quad (\text{IV.119})$$

$$i\tau + \epsilon = \frac{2}{\pi} \left[\frac{2b}{1-b^2} + \ln \left(\frac{b+1}{b-1} \right) \right] \quad (\text{IV.120})$$

Cette solution est tracée à la figure IV.20. La région 1 s'étend de $\tau = 0$ à $\tau = 2$. Ensuite les quasi-particules sortent du système A , et toutes se trouvent donc dans B : on est dans la région 2, et l'on observe un plateau quasi-parfait.

Il est possible d'extraire des équations (IV.119) et (IV.120) le comportement asymptotique de l'écho. Ceci nous permet de quantifier précisément la « platitude » du plateau. On trouve

$$\mathcal{F}(\tau) - \mathcal{F}(\tau \rightarrow \infty) = \frac{c}{6\pi^2\tau^2} + \mathcal{O}(1/\tau^3). \quad (\text{IV.121})$$

On voit que $\mathcal{F}(\tau)$ décroît algébriquement vers une constante, a priori non nulle. Cette décroissance est universelle, contrôlée encore une fois par la charge centrale. L'amplitude est cependant 2 ordres de grandeurs plus petite que dans l'autre région.

d Effets de vitesse maximale

La chaîne XY que nous utilisons pour les vérifications numériques possède une particularité intéressante sur un intervalle de sa ligne critique $c = 1/2$. En général la relation de dispersion est donnée à la limite continue par

$$\epsilon(k) = \sqrt{(1 + \cos k)^2 + r^2 \sin^2 k}. \quad (\text{IV.122})$$

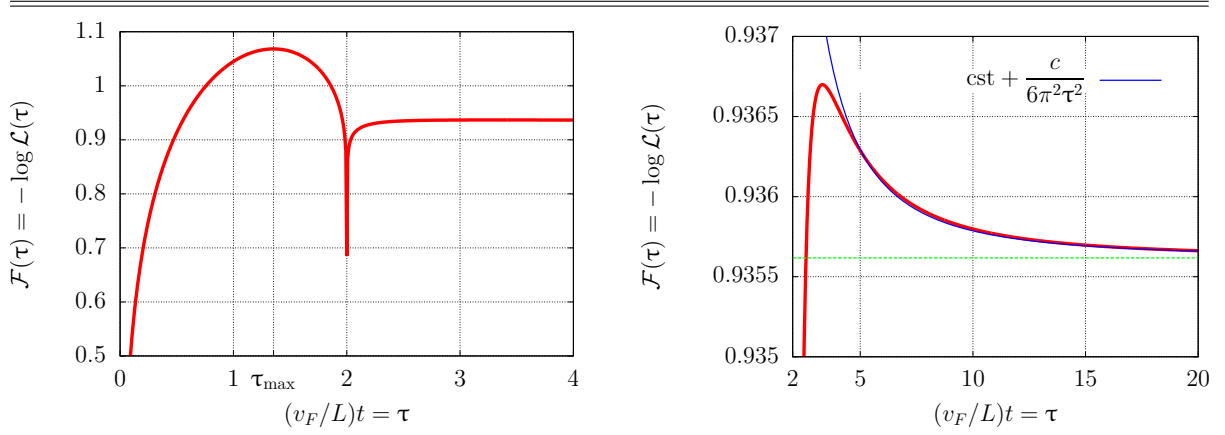


FIGURE IV.20 – Évolution temporelle en fonction du temps réduit $\tau = (v_F/L)t$ pour la géométrie semi-infinie. *A Gauche* : Écho de Loschmidt logarithmique. *A Droite* : zoom sur le plateau.

La zone de Brillouin est entre 0 et π , le moment de Fermi se situe à $k = k_F = \pi$, et la vitesse de Fermi est donnée par

$$v_F = \left. \frac{d\epsilon}{dk} \right|_{k=\pi} \quad (\text{IV.123})$$

Nous avons déjà insisté sur le fait que la théorie conforme décrit les excitations de basse énergie, ayant lieu donc à proximité de ce point. Pour $r < \sqrt{3}/2$, il se trouve que la relation de dispersion $\epsilon(k)$ n'est plus convexe. Cela signifie que la vitesse de Fermi n'est plus la plus grande vitesse disponible pour les excitations. En un sens, certaines particules iront donc « plus vite que la lumière ». Cette vitesse maximale

$$v_{\max} = \max_k \left| \frac{d\epsilon}{dk} \right| \quad (\text{IV.124})$$

est parfois appelé vitesse de Lieb-Robinson dans la littérature. C'est la vitesse maximale à laquelle peut se propager l'information dans le système quantique. On peut voir une illustration à la figure IV.21.

Cette situation est particulièrement intéressante, pour deux raisons :

- On doit pouvoir observer ces particules dans un système de taille finie.
- On s'attend idéalement – en cas de comportement universel – à ce que leur effet devienne négligeable à la limite thermodynamique. C'est donc aussi un test plus contraignant des formules que nous avons obtenues.

Les résultats des simulations à $r = 0.6$ sont présentés à la figure IV.22, où l'on a tracé $S(t)$ et $\mathcal{F}(t)$ pour les rapports d'aspects $x = 1/2$ et $x = 1/3$. Dans ce cas la vitesse maximale vaut $v_{\max} \simeq 1.438 \times v_F$.

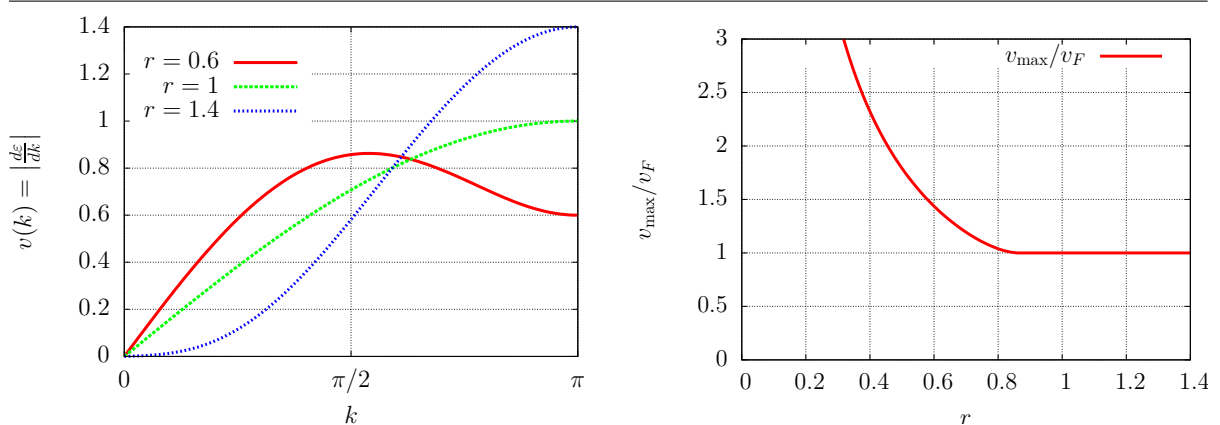


FIGURE IV.21 – *A gauche* : vitesse de groupe $v(k) = |d\epsilon/dk|$ pour trois valeurs différentes de r ($r = 0.6, 1, 1.4$). $v_{\max}$ correspond à la vitesse maximale autorisée. *A droite* : ratio $v_{\max}/v_F$, où v_F est la vitesse de Fermi $v_F = v(k = \pi)$. Pour $r < \sqrt{3}/2$, ce ratio est plus grand que un.

Ces particules rapides ont un effet sur l'entropie et sur l'écho à taille finie. On peut les observer quand elles changent de sous-système, aux instants multiples de $\tau_a = v_F/v_{\max}$ pour $x = 1/2$, et aux multiples de $\tau_1 = (2/3)v_F/v_{\max}$ pour $x = 1/3$. Il y a cependant des différences de comportement entre ces deux quantités :

- Entropie. La courbe numérique suit bien la prédiction de la théorie conforme au début, mais on observe une déflagration au moment où les particules les plus rapides quittent leur sous-système. La courbe est ensuite assez proche de la prédiction analytique, mais l'accord n'est plus si bon. Il semble aussi que ce petit écart ne se résorbe pas quand on va vers de très grandes tailles de système. Pour $x = 1/3$, la zone de décroissance (2) est aussi très fortement affectée par ces particules. L'entropie est donc encore une fois sensible à des effets non universels.
- Écho. On observe aussi une déflagration aux mêmes instants, suivi d'une augmentation de l'amplitude des oscillations dues au réseau. Cependant, ces deux effets diminuent avec la taille du système. Il semble donc que la courbe numérique converge vers la prédiction analytique, même dans la région (2) où l'on a un plateau dans le cas dissymétrique.

e Le détecteur

Toujours avec l'objectif de mettre en valeur ces effets de cône de lumière, il est possible pour l'entropie de décaler l'endroit où l'on mesure l'entropie par rapport à l'endroit où a eu lieu le découpage. On peut par exemple découper le système en deux parts égales, et ensuite mesurer l'entropie dans une région de taille $L'_A = L/2 - l$, en suivant encore une fois l'idée de [21]. Cette situation est représentée ci-dessous :

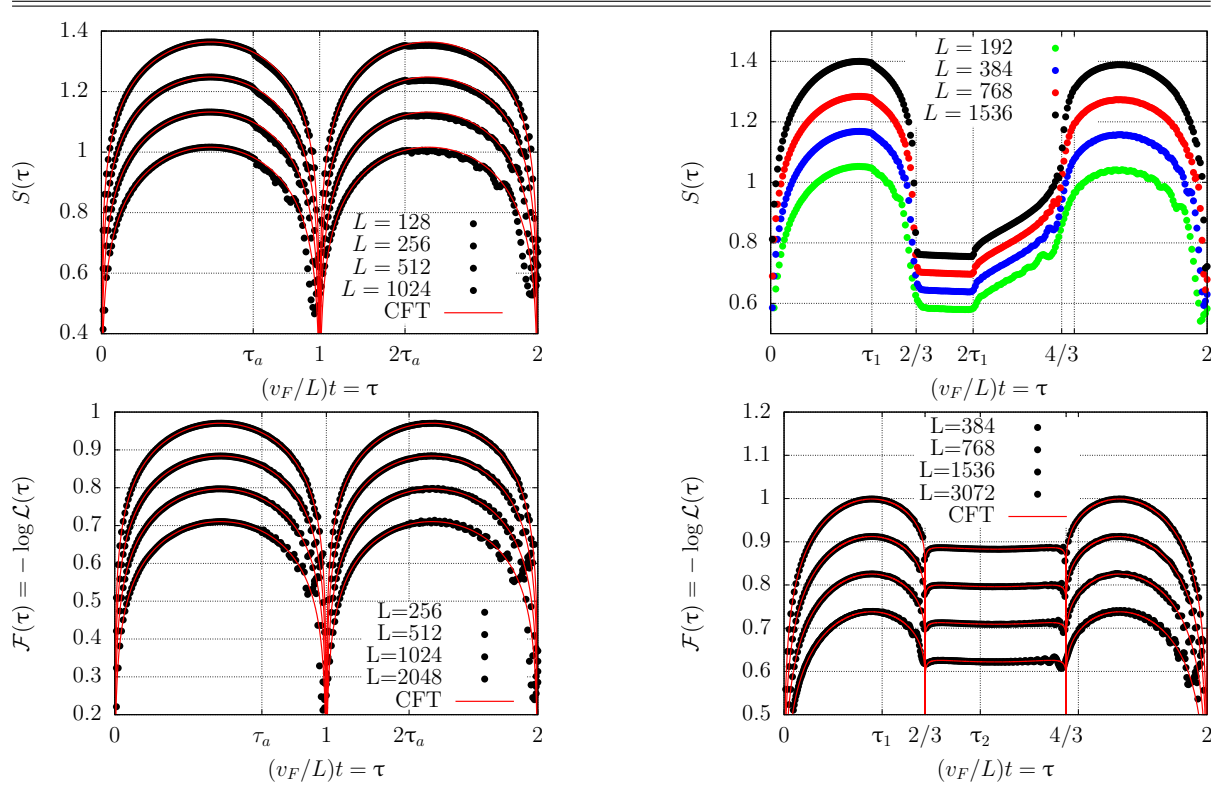
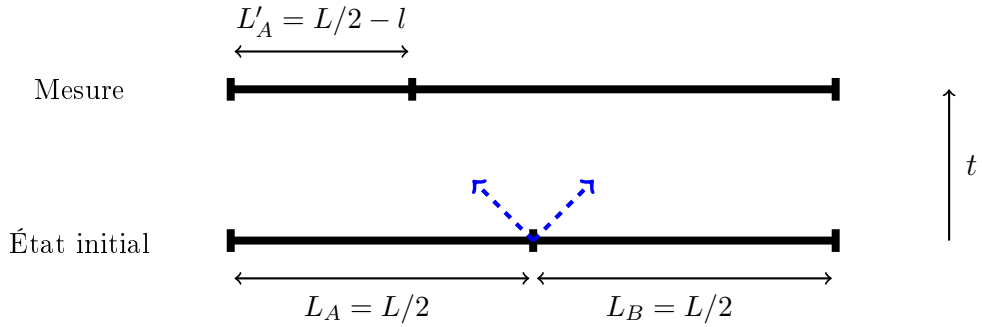


FIGURE IV.22 – *En haut à gauche* : Entropie d'intrication $S(\tau)$ pour le rapport d'aspect $x = 1/2$. *En haut à droite* : $S(\tau)$ pour $x = 1/3$. *En bas à gauche* : Écho de Loschmidt logarithmique $\mathcal{F}(\tau)$ pour le rapport d'aspect $x = 1/2$. *En bas à droite* : $\mathcal{F}(\tau)$ pour $x = 1/3$.



Ce calcul est réalisable, voir {6} pour de plus amples détails. Le point intéressant est que l'entropie à la limite thermodynamique est rigoureusement constante aux instants $0 \leq t \leq (l/v_F)$, avant d'augmenter brusquement lorsque les particules rentrent dans le système A' . Il est possible d'imiter cette démarche pour l'écho de Loschmidt : on réalise le même découpage-collage à l'instant initial, et on laisse aussi le système évoluer avec le Hamiltonien $H_{A \cup B}$. Par

contre, on compare cet état à un autre produit tensoriel $|C \otimes D \otimes E\rangle$:

$$\mathcal{D}(t) = -\ln \left| \langle C \otimes D \otimes E | e^{itH_{A \cup B}} | A \otimes B \rangle \right|^2. \quad (\text{IV.125})$$

Nous nommons cette quantité « Détecteur ». Voir la figure IV.23 pour une illustration.

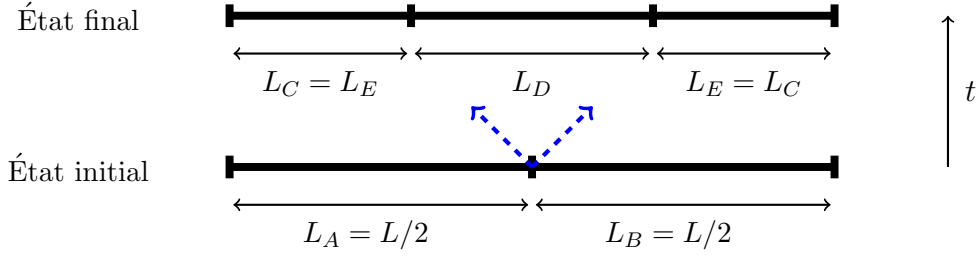


FIGURE IV.23 – Le système est initialement préparé dans le fondamental $|A \otimes B\rangle$ du Hamiltonien découplé $H_A + H_B$. A temps $t > 0$, il évolue avec le Hamiltonien total $H_{A \cup B}$. Après un certain temps, il est comparé au fondamental $|C \otimes D \otimes E\rangle$ de $H_C + H_D + H_E$. Les lignes pointillées bleues représentent les quasi-particules qui sont émises juste après la trempe.

Le détecteur $\mathcal{D}(t)$ peut se calculer à l'aide des mêmes techniques que l'écho de Loschmidt. Les détails sont encore une fois exposés dans {6}. Notons L_C, L_D, L_E les longueurs respectives des systèmes C, D, E , et imposons de plus $L_C = L_E$. Nous nous sommes intéressés à deux géométries

- Le détecteur symétrique, $L_D = L/2$. Dans ce cas l'évolution temporelle est donnée par

$$\mathcal{D}(\tau) = \frac{c}{4} \left[\frac{1}{2} \log |2 \cos 2\pi\tau| + 2 \log \left| 1 - e^{i\pi\tau} \sqrt{2 \cos 2\pi\tau} \right| \right], \quad 0 \leq \tau \leq 1/2, \quad (\text{IV.126})$$

avec $\tau = t/L$. $\mathcal{D}(\tau)$ satisfait aussi $\mathcal{D}(1 - \tau) = \mathcal{D}(\tau)$ et est périodique de période 1. C'est l'unique géométrie pour laquelle il est possible d'obtenir une formule explicite. Signalons aussi que ce résultat peut se retrouver de manière plus algébrique, en exprimant de nouveau l'état pantalon à l'aide des modes de Virasoro[29].

- Le détecteur semi-infini $L_D = \ell \ll L$. Dans ce cas la solution s'exprime comme

$$\mathcal{D}(t) = \frac{c}{8} \log |a(t)[a(t) - 1]|, \quad a(t) = W \left(e^{i\pi 2t/\ell - 1} \right) + 1, \quad (\text{IV.127})$$

où W est la fonction de Lambert, solution (multivaluée) dans le plan complexe de l'équation $we^w = z$.

Nous avons aussi vérifié numériquement (figure IV.24) ces prédictions. Comme attendu, le détecteur $\mathcal{D}(t)$ démarre par un plateau, jusqu'à ce que les particules rentrent dans le sous-système C (et E). Pour ces deux géométries, le détecteur est quadratique aux temps courts $\mathcal{D}(t) \propto t^2$. Ce comportement est similaire à l'écho de Loschmidt dans la géométrie semi-infinie. Ce détecteur nous permet de confirmer que l'interprétation en termes de quasi-particules est correcte.

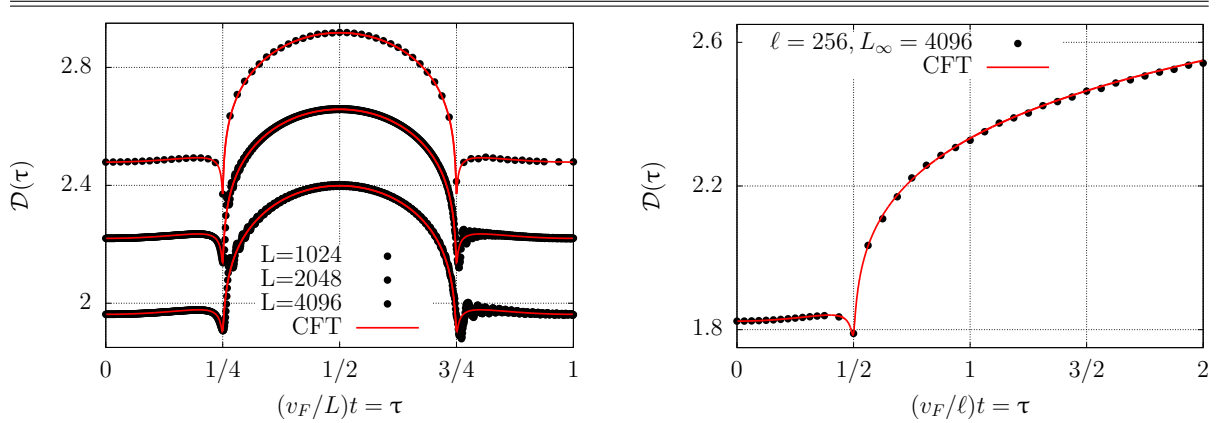


FIGURE IV.24 – *A gauche* : détecteur symétrique. Les points noirs sont les résultats numériques pour les tailles $L = 1024, 2048, 4096$, et la courbe rouge la prédiction de l'équation (IV.126). *A droite* : détecteur « infini » pour $\ell = 256$ et $L = L_\infty = 4096 \gg \ell$. Les points noirs sont les résultats numériques, et la courbe rouge la prédiction de l'équation (IV.127).

IV.4 Conclusion

Essayons ici de résumer les principaux résultats statiques et dynamiques obtenus dans ce chapitre. Inspirés par l'étude des trempes locales, nous avons introduit une nouvelle quantité statique, la LBF, qui compare simplement le fondamental d'une chaîne coupée en deux avec le fondamental d'une chaîne totale. Nous avons confronté de façon systématique son comportement à celui de l'entropie d'intrication, qui a déjà été l'objet d'intenses études, et pour laquelle un nombre impressionnant de résultats sont disponibles. Dans le cas dynamique, nous avons comparé cette fois-ci l'écho de Loschmidt et l'entropie. Cet écho de Loschmidt (logarithmique) pour une trempe locale peut simplement être vu comme une version temporelle de la LBF, et nous allons donc utiliser cette terminologie dans ce paragraphe.

Entropie et LBF : Nous avons établi sur une série d'exemples que la LBF et l'entropie ont les mêmes propriétés d'échelle, et ont en général un comportement très similaire. Il est peut-être plus intéressant d'établir une liste des différences entre ces deux observables globales d'un même système quantique :

- Pour un système critique unidimensionnel, l'entropie – du moins son terme dominant – ne dépend que de la charge centrale c , alors que la LBF dépend aussi des conditions de bord. On a vu que leur effet peut-être parfois assez subtil, notamment pour les liquides de Luttinger ($c = 1$), où même le terme d'échelle global est modifié. Notons cependant que pour les théories conformes dites minimales ($0 < c < 1$), le terme dominant de la LBF est uniquement contrôlé par la charge centrale $\mathcal{F} \sim (c/8) \ln L$, tout comme pour l'entropie $S \sim (c/6) \ln L$.
- Toujours pour un système unidimensionnel, l'entropie est donnée en théorie conforme par

une fonction à un point, alors que la LBF est une énergie libre.

- Nous avons observé que les effets de taille finie semblent en général moins importants pour l'entropie (voir par exemple l'annexe A). Celle-ci reste donc la meilleure méthode pour déterminer numériquement la charge centrale.
- Il est parfois possible de calculer exactement ces deux quantités, mais habituellement pas dans les mêmes géométries.
- L'entropie est difficile à calculer en Monte-Carlo quantique, contrairement à la LBF. Il est aussi raisonnable de pouvoir espérer calculer la LBF dans des chaînes intégrables, par ansatz de Bethe.
- Dans le cas dynamique, l'entropie est beaucoup plus sensible aux particules non universelles, qu'elles soient lentes ou rapides. Nous n'avons pas d'explication convaincante à ce phénomène. Ce n'est pas le cas pour la LBF, pour laquelle toutes les formules analytiques ont pu être vérifiées. On a pu en particulier prédire et observer de magnifiques plateaux, qui mettent en évidence des effets de cône de lumière.

Perspectives : Ce travail peut aussi être étendu dans de nombreuses directions. Citons ici quelques pistes qu'il serait intéressant d'explorer :

- Nous sommes parvenus à prouver l'asymptotique $\langle A \cup B | A \otimes B \rangle \sim L^{-1/16}$ dans une chaîne XX simple coupée en deux parts égales, mais ce n'est qu'un résultat préliminaire, et il est peut-être possible d'aller plus loin. Il serait par exemple très satisfaisant de parvenir à prouver la formule à taille finie $\mathcal{F}(x)$ donnée par l'équation (IV.54), même si c'est probablement un problème difficile.
- Il faudrait vérifier les formules analytiques sur des modèles plus compliqués, c'est à dire qui ne se réduisent pas à des fermions libres. On pourrait étudier ces modèles par des méthodes numériques comme le Monte-Carlo quantique ou bien le DMRG. D'un point de vue un peu plus analytique, il est aussi envisageable d'exploiter l'éventuelle intégrabilité du modèle. Certains résultats récents[30, 31] semblent aller dans ce sens.
- Dans les systèmes quantiques possédant un ordre topologique, il faudrait aussi s'assurer que le terme sous-dominant dans la LBF redonne bien la dimension quantique de la théorie topologique des champs correspondante. On pourrait par exemple regarder des fonctions d'onde test d'effet Hall, et/ou s'intéresser à des états pour lesquelles la LBF et l'entropie de Rényi à n infini ne sont pas égales.
- Plus généralement, on pourrait réexaminer dans le contexte de la LBF toutes(!) les questions que les chercheurs se sont posées sur l'entropie d'intrication.

Bibliographie

- [1] Bloch I, Dalibard J and Zwerger W, *Many-body physics with ultracold gases*, 2008 Rev. Mod. Phys **80** 885
- [2] Kinoshita T, Wenger T and Weiss D, *A quantum Newton's cradle*, 2006 Nature **440** 900
- [3] Srednicki M, *Chaos and quantum thermalization*, 1994 Phys. Rev. E **50** 888
- [4] Kollath C, Läuchli A.M and Altman E, *Quench Dynamics and Nonequilibrium Phase Diagram of the Bose-Hubbard Model*, 2007 Phys. Rev. Lett **98** 180601
- [5] Rigol M, Dunjko V and Olshanii M, *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*, 2008 Nature **452** 854
- [6] Hofferberth S, Lesanovsky I, Fischer B, Schumm T and Schmiedmayer J, *Non-equilibrium coherence dynamics in one-dimensional Bose gases*, 2007 Nature **449** 324
- [7] Zanardi P and Paunkovic N, *Ground state overlap and quantum phase transitions*, 2006 Phys. Rev. E **74** 031123
- [8] Holzhey C, Larsen F, and Wilczek F, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, 1994 Nucl. Phys. B **424** 443
- [9] Vidal G, Latorre J, Rico E, and Kitaev A, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, 2003 Phys. Rev. Lett **90** 227902
- [10] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement entropy and conformal field theory*, 2004 J. Stat. Mech. P06002
- [11] Kitaev A and Preskill J, *Topological entanglement entropy*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** 110404
- [12] Levin M and Wen X-G, *Detecting Topological Order in a Ground State Wave Function*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** 110405
- [13] Anderson P.W, *Infrared Catastrophe in Fermi Gases with Local Scattering Potentials*, 1967 Phys. Rev. Lett **18** 1049
- [14] Srednicki M, *Entropy and area*, 93 Phys. Rev. Lett **71** 666
- [15] Cardy J and Peschel I, *Finite-size dependence of the free energy in two-dimensional critical systems*, 1988 Nucl. Phys. B **300** 377
- [16] Igloi F, Juhász R, *Exact relationship between the entanglement entropies of XY and quantum Ising chains*, 2008 Eur. Phys. Lett **81** 57003
- [17] Cardy J and Calabrese P, *Unusual corrections to scaling in entanglement entropy*, 2010 J. Stat. Mech. P04023

- [18] Zagoskin A.M and Affleck I, *Fermi edge singularities : Bound states and finite-size effects*, 1997 J. Phys. A : Math.Gen **30** 5743
- [19] Wolf M, *Violation of the entropic area law for Fermions*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** 010404
- [20] Gioev D and Klich I, *Entanglement entropy of fermions in any dimension and the Widom conjecture*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** 100503
- [21] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement and correlation functions following a local quench : a conformal field theory approach*, 2007 J. Stat. Mech. P10004
- [22] Dubail J, *Conditions aux bords dans des théories conformes non unitaires* These (2010)
- [23] Dubail J, Jacobsen J.L and Saleur H, *Conformal field theory at central charge $c=0$: A measure of the indecomposability (b) parameters*, 2010 Nucl. Phys. B **834** 399
- [24] Iglói F, Szatmári Z and Lin Y-C, *Entanglement entropy with localized and extended interface defects*, 2009 Phys. Rev. B **80** 024405
- [25] Peschel I, *On the reduced density matrix for a chain of free electrons*, 2004 J. Stat. Mech. P06004
- [26] Eisler V, Karevski D, Platini T and Peschel I, *Entanglement evolution after connecting finite to infinite quantum chains*, 2008 J. Stat. Mech. P01023
- [27] Calabrese P and Cardy J, *Quantum quenches in extended systems*, 2007 J. Stat. Mech. P06008
- [28] Eisler V and Peschel I, *Evolution of entanglement after a local quench*, 2007 J. Stat. Mech. P06005
- [29] Dubail J and Jacobsen J.L, *notes non publiées*
- [30] Mossel J, Palacios G and Caux J-S, *Geometric quenches in quantum integrable systems*, 2010 J. Stat. Mech. L09001
- [31] Weston R, *Correlation Functions and the Boundary qKZ Equation in a Fractured XXZ Chain* arXiv :1110.2032 (2011)

ANNEXE A

Some exact results for the bipartite fidelity in XX chains

Summary We study here the bipartite fidelity in a simple XX chain of length L cut into two equal parts. The fidelity is given by a Cauchy-like determinant, which can be evaluated in closed form. At half-filling we find the following expansion

$$|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 = \frac{\pi^{1/8} \exp\left(\frac{3}{8} + \frac{K}{\pi} - \frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2}\right)}{G^{9/2}} \left(\frac{\Gamma(\frac{1}{4})}{\Gamma(\frac{3}{4})}\right)^{1/2} \times L^{-1/8} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{\ln L}{L}\right)\right). \quad (\text{A.1})$$

K is the Catalan constant and G the Glaisher-Kinkelin constant. We also calculate the more general “orthogonality catastrophe” exponent $|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \sim \text{cste} \times L^{-\delta}$, and find

$$\delta = \frac{1}{8} + \frac{1}{2} \left(\rho - \frac{1}{2}\right)^2 \quad (\text{A.2})$$

at filling fraction ρ . This result is in agreement with conformal field theory arguments, which give $\delta = c/8 + h_{\text{bcc}}$. c is the central charge, and h_{bcc} is the dimension of some boundary changing operator discussed in IV.2.3b and IV.2.3a. Finally, we emphasize that the LBF admits the expansion

$$\mathcal{F} = a_0 \ln L + a_1 + a_2 \frac{\ln L}{L} + a_3 \frac{1}{L} + a_4 \frac{\ln L}{L^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right). \quad (\text{A.3})$$

and provide the corresponding formulae for a_0 and a_2 at general filling fraction. This could be important if one wishes to extract numerically the central charge using the LBF in more complicated systems, and remains to be understood from a field-theoretical perspective.

A.1 Bipartite fidelity as a determinant

We wish to compute here the bipartite fidelity $|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2$ in a XX chain cut in two equal parts $L_A = L_B = L/2$. The Hamiltonian reads

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \left(c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1} \right). \quad (\text{A.4})$$

A.1.1 Diagonalization

H may be diagonalized in Fourier space. Introducing

$$d_k^\dagger = \left(\frac{2}{L+1} \right)^{1/2} \sum_{j=1}^L \sin \left(\frac{kj\pi}{L+1} \right) c_j^\dagger \quad (\text{A.5})$$

allows to rewrite H as

$$H = \text{cst} - \sum_{k=1}^L \epsilon_k d_k^\dagger d_k \quad , \quad \epsilon_m = -\cos \left(\frac{k\pi}{L+1} \right). \quad (\text{A.6})$$

The ground-state $|A \cup B\rangle$ may be obtained by filling the Fermi sea. If we denote by n the number of fermions in the sea, we get

$$|A \cup B\rangle = \left(\prod_{k=1}^n d_k^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{A.7})$$

The same can be done for $|A \otimes B\rangle$, and denoting by $f_k^\dagger$ the fermions which diagonalize $H_{A \otimes B}$ we get

$$|A \otimes B\rangle = \left(\prod_{k=1}^n f_k^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{A.8})$$

A.1.2 Wick's theorem

The bipartite fidelity is given by the correlator

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \langle A \otimes B | A \cup B \rangle = \langle 0 | \prod_k f_k \prod_\ell d_\ell^\dagger | 0 \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Using Wick's theorem we get a determinant (changing the names of the indices for later convenience)

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \det_{1 \leq k, \ell \leq n} \left(\langle f_k d_\ell^\dagger \rangle \right) = \det_{1 \leq i, j \leq n} (M_{ij}). \quad (\text{A.10})$$

To simplify the notations a bit, we set

$$\theta_i = \frac{i\pi}{n+1} \quad (\text{A.11})$$

$$\phi_j = \frac{j\pi}{2n+1} \quad (\text{A.12})$$

After some algebra, one gets the following expressions for the matrix elements :

$$M_{ij} = \begin{cases} (-1)^i \frac{1}{\sqrt{(L/2+1)(L+1)}} \frac{\sin \theta_i \sin (j\pi/2 + \phi_j/2)}{\cos \theta_i - \cos \phi_j} & , \quad 1 \leq i \leq n/2 \\ (-1)^j \frac{1}{\sqrt{(L/2+1)(L+1)}} \frac{\sin \theta_{i-n/2} \sin (j\pi/2 + \phi_j/2)}{\cos \theta_{i-n/2} - \cos \phi_j} & , \quad n/2 \leq i \leq n \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

This determinant can actually be computed in closed form, see next section.

A.2 Closed form formula for the determinant

A.2.1 The Cauchy determinant

A Cauchy determinant is a determinant of the form

$$C_n = \det_{1 \leq i, j \leq n} \left(\frac{1}{a_i + b_j} \right), \quad (\text{A.14})$$

which can be evaluated as a product :

$$C_n = \frac{\prod_{1 \leq i < j \leq n} (a_j - a_i) \prod_{1 \leq i < j \leq n} (b_j - b_i)}{\prod_{1 \leq i, j \leq n} (a_i + b_j)} \quad (\text{A.15})$$

The formula can be easily understood by noticing that C_n is a rational fraction of the a_i and b_j . The denominator is found by writing down explicitly the sum over the permutation. The determinant must also be zero for $a_i = a_j$, $i \neq j$ and the same goes for the b_i . Since the numerator has the right degree, only a coefficient can remain. In this particular case, it is one.

A.2.2 A Cauchy-like determinant

The determinant we are interested in has a similar form :

$$m_{ij} = (-1)^i \frac{\alpha_i \beta_j}{a_i + b_j}, \quad 1 \leq i \leq n/2 \quad (\text{A.16})$$

$$m_{ij} = (-1)^j \frac{\alpha_{i-n/2} \beta_j}{a_{i-n/2} + b_j}, \quad n/2 + 1 \leq i \leq n \quad (\text{A.17})$$

and is given by the following formula

$$D_n = \det(M_{ij}) = 2^{n/2} \frac{\prod_{i=1}^{n/2} \alpha_i^2 \prod_{j=1}^n \beta_j \prod_{1 \leq i < j \leq n/2} (a_i - a_j)^2 \prod_{1 \leq i < j \leq n}^{(i-j) \text{ even}} (b_i - b_j)}{\prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n (a_i + b_j)} \quad (\text{A.18})$$

$\prod \alpha_i^2$ and $\prod \beta_j$ can be factorized out immediately, and the denominator is obvious. Then D_n has double zeroes for the $a_i = a_j$, $i \neq j$ and simple zeroes for the $b_i = b_j$, provided $(-1)^i = (-1)^j$. The remaining coefficient $2^{n/2}$ can be explained by the possible choice of two identical a_i 's, for $i = 1, \dots, n/2$. Applying Eq. A.18 to our determinant we get :

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \frac{\prod_{i=1}^{n/2} \left[\sin^2 \theta_i \prod_{j=i+1}^{n/2} (\cos \theta_i - \cos \theta_j)^2 \right] \prod_{j=1}^n \sin \left(\frac{j\pi + \phi_j}{2} \right)^{(i-j) \text{ even}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} (\cos \phi_i - \cos \phi_j)}{2^{-n/2} [(L+1)(L/2+1)]^{n/2} \prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n (\cos \theta_i - \cos \phi_j)}$$

(A.19)

A.3 Asymptotic expansion at half filling : results

We now need to perform an asymptotic expansion of each term in Eq. A.19. The terms which are simple products can be treated using a combination of Stirling and Euler-Maclaurin formulas, but the double products are much more annoying. We will detail the procedure on the most complicated of them, the double product on the denominator.

A.3.1 Some notations

Here we introduce some special functions/number, which we will need in the following.

- $K = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)^2} \simeq 0.915965594177$ is Catalan's constant.
- $G = 1.28242712$ is the Glaisher-Kinkelin constant, the constant term in the asymptotic expansion of the hyperfactorial : $G = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-n^2/2 - n/2 - 1/12} e^{n^2/4} \prod_{k=1}^n k^k$.
- $G(z)$ is the Barnes function, the analytic continuation of the superfactorial $G(n+1) = \prod_{k=1}^n k!$. It also satisfies the fundamental relation $G(z+1) = \Gamma(z)G(z)$, where Γ is the Euler Gamma function. It is especially useful because it has a Stirling-like asymptotic expansion : $\ln G(z+1) = \frac{1}{2}z^2 \ln z - \frac{3}{4}z^2 + \frac{\ln 2\pi}{2}z - \frac{1}{12} \ln z + \frac{1}{12} - \ln G$

A.3.2 The toughest term

We are at half filling $L = n/2$. Let us focus on the following term

$$B = \prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n (\cos \theta_i - \cos \phi_j) \quad (\text{A.20})$$

$$= 2^{n^2/2} \prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n \sin \left(\frac{\theta_i + \phi_j}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_i - \phi_j}{2} \right) \quad (\text{A.21})$$

It is the most complicated because it mixes θ and ϕ , and the two are not commensurable. $-\ln B$ admits a priori the following asymptotic expansion

$$-\ln B = b_0 n^2 + b_1 n \ln n + b_2 n + b_3 \ln n + b_4 + o(1). \quad (\text{A.22})$$

b_0 and b_2 can be computed using twice the Euler-Maclaurin formula. b_1 and b_3 are more tricky, and b_4 is the most difficult. Let us first rewrite $-\ln B$:

$$-\ln B = -\frac{n^2}{2} \ln 2 - \sum_{i=1}^{n/2} \sum_{j=1}^n \ln \sin \left(\frac{\theta_i + \phi_j}{2} \right) + \ln \sin \left(\frac{\theta_i - \phi_j}{2} \right) \quad (\text{A.23})$$

The usual trick to get the full asymptotic expansion is to write $\ln \sin u = \ln \left[\frac{\sin u}{u} \right] + \ln u$. Since $\ln \left[\frac{\sin u}{u} \right]$ is continuous on $\mathbb{R}$, the Euler-Maclaurin formula applied (twice) to this function cannot contain any logarithmic term. To get these b_1 and b_3 it is therefore sufficient to study

the asymptotic expansion of

$$\begin{aligned}
B' &= \prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n \left(\frac{\theta_i + \phi_j}{2} \right) \left(\frac{\theta_i - \phi_j}{2} \right) \\
&= \left[\frac{\pi}{2(2n+1)} \right]^{n^2} \frac{1}{(2n+1)^{n/2}} \prod_{i=1}^{n/2} \frac{\Gamma\left(n+1+2i-\frac{i}{n+1}\right) \Gamma\left(n+1-2i+\frac{i}{n+1}\right)}{\Gamma\left(1-\frac{i}{n+1}\right) \Gamma\left(1+\frac{i}{n+1}\right)}
\end{aligned} \tag{A.24}$$

In $-\ln B'$, one can check that the prefactor contributes to a $n^2 \ln n$, and $(1/2)n \ln n$. The product of the first Gamma function on the numerator contributes to a $(-3/4)n^2 \ln n$ a $(-5/8)n \ln n$. The term proportional to $\ln n$ is $1/8$ (see A.6). The second Gamma function on the numerator contributes to a $(-1/4)n^2 \ln n$, a $(1/8)n \ln n$ and the term proportional to $\ln n$ is $1/24 - 1/16 = -1/48$ (see again A.6). The other two on the denominator can be treated by the Euler-Maclaurin formula. In the end both the $n^2 \ln n$ and $n \ln n$ term are canceled, and we get

$$-\ln B' = \left(\frac{3}{2} - \ln \frac{\pi}{2} \right) n^2 + \left(\frac{3}{4} - \frac{3}{2} \ln 2 \right) n + \frac{5}{48} \ln n - \frac{5}{12} + \frac{\ln \pi}{2} + \ln[G(3/4)G(5/4)G^2] + o(1) \tag{A.25}$$

A.3.3 Summary of the expansions

1.

$$A_1 = \prod_{1 \leq i < j \leq n/2} (\cos \theta_i - \cos \theta_j)^2 \tag{A.26}$$

$$\begin{aligned}
-\ln A_1 &= \left[\frac{1}{4} \ln 2 + \frac{7}{4} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \right] n^2 - \frac{1}{2} n \ln n + \left[\frac{7}{2} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} - \frac{2K}{\pi} - \ln 2 \right] n + \frac{13}{12} \ln n \\
&+ \frac{7}{12} \ln 2 - \frac{1}{12} \ln \pi - \frac{7}{12} - \frac{2K}{\pi} + \frac{7}{4} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} + \ln G + o(1)
\end{aligned} \tag{A.27}$$

2.

$$A_2 = \prod_{1 \leq i < j \leq n/2} (\cos \phi_{2i} - \cos \phi_{2j}) \tag{A.28}$$

$$\begin{aligned}
-\ln A_2 &= \left[\frac{1}{8} \ln 2 + \frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \right] n^2 - \frac{1}{4} n \ln n + \left[\frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} - \frac{K}{\pi} - \frac{1}{2} \ln 2 \right] n + \frac{13}{24} \ln n \\
&+ \frac{23}{48} \ln 2 - \frac{1}{24} \ln \pi - \frac{1}{6} - \frac{K}{2\pi} + \frac{7}{32} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} + \frac{1}{2} \ln G + o(1)
\end{aligned} \tag{A.29}$$

3.

$$A_3 = \prod_{1 \leq i < j \leq n/2} (\cos \phi_{2i-1} - \cos \phi_{2j-1}) \tag{A.30}$$

$$\begin{aligned}
-\ln A_3 &= \left[\frac{1}{8} \ln 2 + \frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \right] n^2 - \frac{1}{4} n \ln n + \left[\frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} - \frac{1}{2} \ln 2 \right] n + \frac{1}{24} \ln n \\
&+ \frac{5}{48} \ln 2 - \frac{1}{24} \ln \pi - \frac{1}{6} + \frac{7}{32} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} + \frac{1}{2} \ln G + o(1)
\end{aligned} \tag{A.31}$$

4.

$$A_4 = \prod_{i=1}^{n/2} \prod_{j=1}^n (\cos \theta_i - \cos \phi_j) \tag{A.32}$$

$$\begin{aligned}
-\ln A_4 &= \left[\frac{1}{2} \ln 2 + \frac{7}{2} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \right] n^2 + \left[\frac{21}{4} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} - \frac{3K}{\pi} \right] n + \frac{5}{48} \ln n + \frac{7}{4} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \\
&- \frac{2K}{\pi} - \frac{1}{6} + \frac{29}{48} \ln 2 - \frac{5}{48} \ln \pi + 2 \ln G + \ln(G(3/4)G(5/4)) + o(1)
\end{aligned} \tag{A.33}$$

Notice the absence of any $n \ln n$ term. The other terms are easy

$$-\sum_{i=1}^{n/2} \ln \sin^2 \theta_i = -\ln \left(\frac{n+1}{2^n} \right) = n \ln 2 - \ln n + o(1) \tag{A.34}$$

$$-\sum_{j=1}^n \ln \sin \left(j \frac{\pi}{2} + \frac{\phi_j}{2} \right) = n \ln 2 - \frac{1}{2} \ln n - \frac{1}{2} \ln 2 + o(1) \tag{A.35}$$

$$-\ln \left(2^{-n/2} [(n+1)(2n+1)]^{n/2} \right) = -n \ln n - \frac{3}{4} + o(1) \tag{A.36}$$

A.3.4 Final result at half-filling

Putting everything together, all the terms n^2 , $n \ln n$ and n are canceled out by the linear combination, as expected. We get

$$-\ln |\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 = 2 \times \left(-1 + \frac{13}{12} + \frac{13}{24} + \frac{1}{24} - \frac{1}{2} - \frac{5}{48} \right) \ln n + \mathcal{O}(1) \tag{A.37}$$

$$= \frac{1}{8} \ln n + a + o(1) \tag{A.38}$$

This is the result expected from conformal invariance, $(c/8) \ln n$ with $c = 1$. It turns out the constant term a can even be calculated. This allows us to find an equivalent of the bipartite fidelity when $L = 2n \rightarrow \infty$. Using Eqs. A.27, A.29, A.31, A.33, A.34, A.35 and A.36 we finally obtain

$$\boxed{|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \underset{L \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\pi^{1/8} \exp \left(\frac{3}{8} + \frac{K}{\pi} - \frac{7}{8} \frac{\zeta(3)}{\pi^2} \right)}{G^{9/2}} \left(\frac{\Gamma(\frac{1}{4})}{\Gamma(\frac{3}{4})} \right)^{1/2} \times L^{-1/8}} \tag{A.39}$$

The constant term in Eq A.39 is approximately $C = 1.1343481627835519$. Although kind of nice, it is of course non-universal. It is also possible to push further the analysis in order to

get the next subleading term, which happens to be in $\ln L/L$ (and therefore not so difficult to calculate). Expressing the results in terms of the LBF, our most precise result reads

$$\mathcal{F} = \frac{1}{8} \ln L - \ln C + \frac{1}{8} \frac{\ln L}{L} + \mathcal{O}(1/L). \quad (\text{A.40})$$

A.3.5 Numerical checks

It is useful to have some numerical checks of our formula Eq. A.39. For convenience we perform these checks on the LBF :

$$\mathcal{F} = -\ln |\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2. \quad (\text{A.41})$$

From our calculation we can guess the correct asymptotic expansion. It is a priori given by

$$\mathcal{F} = a_0 \ln L + a_1 + a_2 \frac{\ln L}{L} + a_3 \frac{1}{L} + \mathcal{O}(\ln L/L^2). \quad (\text{A.42})$$

A fit of the LBF to this form for system sizes $L = 5632, 5760, 5888, 6016, 6144$. yields

$$a_0 = 0.125000014116 \quad (\text{A.43})$$

$$a_1 = -0.12605837014 \quad (\text{A.44})$$

$$a_2 = 0.1255972988 \quad (\text{A.45})$$

$$a_3 = 0.05002218 \quad (\text{A.46})$$

We therefore get $a_0 = 1/8$ up to $\simeq 10^{-7}$ relative error, and also $a_1 = -\ln C$ up to $\simeq 10^{-6}$ relative error. From the data we also get $a_2 = 1/8$ but with a much bigger error. I think it is due to the fact that the next subleading term is in $1/L$. This a_3/L term is not particularly interesting and should be very difficult to calculate.

Notice that the entanglement entropy doesn't have a $\ln L/L$ term. This should explain why the numerics are slightly worse for the fidelity.

A.4 Away from half filling

Now $\rho = n/L \neq 1/2$, so that $L = n/\rho \neq 2n$. Each term once again has the (a priori) following asymptotic expansion :

$$a_0 n^2 + a_1 n \ln n + a_2 n + a_3 \ln n + \mathcal{O}(1). \quad (\text{A.47})$$

It is easy to show that the a_0 terms will be canceled by the linear combination, and less easy for the a_2 terms. The a_3 terms can be found using the linearization trick. Compared to the half-filling case, all the logarithmic terms remain unchanged, except for two. One comes from

$$\prod_{i=1}^{n/2} \frac{\Gamma(n+1+2i-\frac{i}{an+1})}{\Gamma(n+1+2i)}, \quad (\text{A.48})$$

with $a = \frac{1}{2\rho}$. Using Eq. A.60, we find that the logarithmic contribution to $(-\ln \prod \prod \dots)$ is

$$\frac{1}{8} \frac{2a-1}{a^2} = \frac{\rho}{2}(1-\rho) \quad (\text{A.49})$$

The other one is

$$\prod_{i=1}^{n/2} \frac{\Gamma(n+1-2i+\frac{i}{an+1})}{\Gamma(n+1-2i)} \quad (\text{A.50})$$

and the logarithmic contribution to $(-\ln \prod \prod \dots)$ is

$$\frac{-1}{16} \frac{2a-1}{a^2} = -\frac{\rho}{4}(1-\rho) \quad (\text{A.51})$$

Summing everything together the leading term in the LBF is

$$\begin{aligned} -\ln \langle A \cup B | A \otimes B \rangle &\sim \left(-1 + \frac{13}{12} + \frac{13}{24} + \frac{1}{24} - \frac{1}{2} - \left[\frac{\rho}{2}(1-\rho) + \frac{1}{24} - \frac{\rho}{4}(1-\rho) \right] \right) \ln n \\ -\ln |\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 &= \left(\frac{1}{8} + \frac{1}{2} \left[\rho - \frac{1}{2} \right]^2 \right) \ln n + \mathcal{O}(1) \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

We didn't calculate the constant, although it should be possible. One can once again push the analysis to get the $\ln L/L$ term. We find

$$\mathcal{F} = \left(\frac{1}{8} + \frac{1}{2} \left[\rho - \frac{1}{2} \right]^2 \right) \ln L + \text{cste} + \frac{1}{8} \left(1 - 12 \left[\rho - \frac{1}{2} \right]^2 \right) \frac{\ln L}{L} + \mathcal{O}(1/L). \quad (\text{A.53})$$

A.5 Comparison LBF vs EE

Here we compare the LBF and the EE using different types of fits. The conclusion is that the EE seems better than the LBF to determine the central charge.

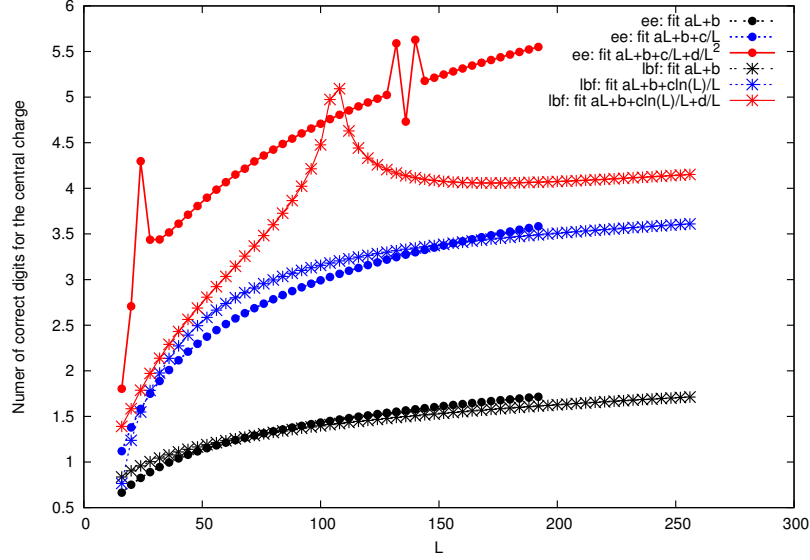


FIGURE A.1 – Comparison EE/LBF for different types of fits. We plot the number of correct digits in the estimation of the central charge $c = 1$ against the system size L .

A.6 Some useful formulae

A.6.1 Two superfactorial identities

In the following we use the Barnes G function, defined through the identity

$$G(z+1) = \Gamma(z)G(z). \quad (\text{A.54})$$

This is useful because its Stirling-like series is well known :

$$\ln G(z) = \frac{1}{2}z^2 \ln z - \frac{3}{4}z^2 + \frac{1}{2}\ln(2\pi)z - \frac{1}{12}\ln z + \frac{1}{2} - \ln G + o(1). \quad (\text{A.55})$$

where $G = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-n^2/2-n/2-1/2} e^{n^2/4} \prod_{k=1}^n k^k \simeq 1.2824271291$ is the Glaisher-Kinkelin constant. Some of our products of Gamma functions can be expressed using G . For example we have

$$F(n) = \prod_{i=1}^{n/2} \Gamma(n+1-2i) \quad (\text{A.56})$$

$$= \frac{2^{-1/24+1/4(n-2)} G^{3/2} \pi^{1/4-n/4}}{e^{1/8}} G\left(1 + \frac{n}{2}\right) G\left(\frac{1+n}{2}\right) \quad (\text{A.57})$$

and the asymptotic expansion

$$\ln F(n) = (\dots)n^2 \ln n + (\dots)n^2 + (\dots)n \ln n + (\dots)n - \frac{1}{24} \ln n + \mathcal{O}(1). \quad (\text{A.58})$$

We also need

$$\begin{aligned}
F'(n) &= \prod_{i=1}^n \Gamma(2i - 1/2) \\
&= 2^{n(n-2)} \pi^{n/2} (G(3/4)G(5/4))^{n-1} (G(7/4)G(9/4))^{-n} G(n+3/4)G(n+5/4)
\end{aligned} \tag{A.59}$$

A.6.2 Asymptotic expansions

1.

$$\sum_{i=1}^{n/2} \ln \left(\frac{\Gamma(\alpha n + \beta + \gamma i \pm \frac{i}{an+1})}{\Gamma(\alpha n + \beta + \gamma i)} \right) = (\dots)n \ln n + (\dots)n \pm \frac{1}{8} \frac{2a-1}{a^2} \ln n + \mathcal{O}(1) \tag{A.60}$$

2.

$$\sum_{i=1}^{n/2} \ln \left(\frac{\Gamma(2i - 1/2 + \frac{1/2-i}{an+1})}{\Gamma(2i - 1/2)} \right) = (\dots)n \ln n + (\dots)n - \frac{1}{16} \frac{2a-1}{a^2} \ln n + \mathcal{O}(1) \tag{A.61}$$

These can be obtained from the Euler-Maclaurin formula. One can also get the constant term without any special problems.

Table des figures

I.1	Bipartition d'un système quantique	7
II.1	Un exemple de pavage de dimères sur réseau carré	15
II.2	Orientation de Kasteleyn sur réseau carré	17
II.3	Représentation de hauteur associée à une configuration de dimères	21
II.4	Matrice de transfert	23
II.5	Géométrie d'une bande infinie	31
II.6	Quantification sur un anneau	33
II.7	Interprétation géométrique de l'entropie d'intrication via les répliques	38
III.1	Comment calculer l'entropie d'intrication ?	43
III.2	Une configuration de dimère c , à laquelle on associe un ket $ c\rangle$	44
III.3	Diagramme de phase du modèle de Rokhsar-Kivelson sur réseau carré	47
III.4	Bipartition du réseau, sur l'exemple d'un cylindre infini coupé en deux parties	49
III.5	Correspondance entre l'entropie d'intrication 2d et l'entropie de Shannon 1d	52
III.6	Dimères : loi d'aire et constante sous-dominante pour l'entropie d'intrication	57
III.7	Extraction numérique de la constante sous-dominante de l'entropie modifiée	58
III.8	Gaz de particules se repoussant selon les lois de l'électrostatique 2d	59
III.9	Le livre de la théorie conforme	65
III.10	Entropie pour une chaîne XXZ périodique, constante sous-dominante	68
III.11	Entropie de Rényi dans une chaîne XXZ périodique, constante sous-dominante	70
III.12	Transition de phase : vérification numérique	72
III.13	Shift de hauteur sur une bande semi-infinie	73
III.14	Terme logarithmique dans l'entropie de Rényi de chaînes XXZ ouvertes	75
III.15	Gaz de particules interagissant entre elles ainsi qu'avec leur image miroir	76
III.16	Shift de hauteur et dimères sur réseau carré	77
III.17	Terme logarithmique dans l'entropie de Rényi pour les dimères	78
III.18	Loi d'aire pour l'entropie de trois modèles dans la classe d'universalité d'Ising	81
III.19	Entropie de Shannon et transition de phase quantique dans la chaîne d'Ising	82
III.20	Violation des répliques pour la classe d'universalité d'Ising	83
III.21	Modèle RSOS sur réseau carré	85
III.22	Terme logarithmique dans l'entropie de Rényi d'une sous-chaîne d'Ising	88
III.23	Fonction de partition avec un bord libre au milieu	89

IV.1	Bipartition d'un système quantique et fonctions de partitions associées	101
IV.2	Une chaîne de spins coupée en deux	102
IV.3	Énergies libres nécessaires au calcul de la LBF en 1+1 dimensions	105
IV.4	Chaîne d'Ising en champ transverse : LBF et transition de phase quantique	106
IV.5	Chaîne de spins coupée en deux parts inégales	107
IV.6	Énergies libres pour la LBF dans un système 1d dissymétrique	108
IV.7	Transformation conforme du demi-plan supérieur vers le pantalon	109
IV.8	Vérifications numériques pour la LBF dans une chaîne XXZ	111
IV.9	Cas considérés avec changement de conditions aux bords	113
IV.10	Energie libre du pantalon et changement de conditions aux bords	113
IV.11	LBF pour une chaîne d'Ising avec changement de conditions aux bords	115
IV.12	Bipartition d'un système de fermions bidimensionnels	116
IV.13	Interprétation de la trempe en termes de quasi-particules	119
IV.14	Densité d'excitation pour une chaîne XX coupée en deux parts égales	120
IV.15	Echo de Loschmidt : transformation conforme vers le double pantalon	122
IV.16	Entropie d'intrication : transformation conforme vers le double pantalon	125
IV.17	Entropie d'intrication et écho de Loschmidt : oscillations	127
IV.18	Quasi-particules émises après la trempe pour différents rapports d'aspect	128
IV.19	Évolution de l'entropie et de l'écho pour différents rapports d'aspect	129
IV.20	Évolution temporelle pour la géométrie semi-infinie	131
IV.21	Vitesse de groupe et vitesse de Lieb-Robinson	132
IV.22	Effet de vitesse maximale sur l'entropie d'intrication et l'écho de Loschmidt	133
IV.23	Trempe quantique et détecteur	134
IV.24	Résultats numériques pour le détecteur	135
A.1	Comparison between the entanglement entropy and the LBF	147



Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions

Jean-Marie Stéphan,¹ Shunsuke Furukawa,² Grégoire Misguich,¹ and Vincent Pasquier¹

¹*Institut de Physique Théorique, CEA, IPHT, CNRS, URA 2306, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

²*Condensed Matter Theory Laboratory, RIKEN, Wako, Saitama 351-0198, Japan*

(Received 8 June 2009; revised manuscript received 13 October 2009; published 20 November 2009)

We study the Shannon entropy of the probability distribution resulting from the ground-state wave function of a one-dimensional quantum model. This entropy is related to the entanglement entropy of a Rokhsar-Kivelson-type wave function built from the corresponding two-dimensional classical model. In both critical and massive cases, we observe that it is composed of an extensive part proportional to the length of the system and a subleading universal constant S_0 . In $c=1$ critical systems (Tomonaga-Luttinger liquids), we find that S_0 is a simple function of the boson compactification radius. This finding is based on a field-theoretical analysis of the Dyson-Gaudin gas related to dimer and Calogero-Sutherland models. We also performed numerical demonstrations in the dimer models and the spin-1/2 XXZ chain. In a massive (crystal) phase, S_0 is related to the ground-state degeneracy. We also examine this entropy in the Ising chain in a transverse field as an example showing a $c=1/2$ critical point.

DOI: [10.1103/PhysRevB.80.184421](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.184421)

PACS number(s): 05.50.+q, 75.10.Pq, 03.67.Mn

I. INTRODUCTION

There has been growing interest in quantifying entanglement in extended quantum systems to detect nontrivial correlations existing in many-body ground states.¹ A useful measure of entanglement is the von Neumann entanglement entropy $S^{\text{vN}}(A) := -\text{Tr} \rho_A \log \rho_A$, defined from the reduced density matrix ρ_A of a subsystem A . (We use the natural logarithm). Its novelty lies in its universal behavior reflecting the long-distance nature of the system. In one-dimensional (1D) critical systems, for instance, the entanglement entropy of a long interval of length ℓ shows a universal scaling²⁻⁵ $S^{\text{vN}}(A) \approx \frac{c}{3} \log \ell + \text{const}$, where c is the central charge of the conformal field theory (CFT) describing the long-distance correlations. Possible further information of CFT can be encoded in a multi-interval entanglement entropy.⁶⁻⁸ As another example, the existence of topological order in gapped systems can be detected by measuring a constant contribution to the entanglement entropy^{9,10} (with recent applications to fractional quantum Hall states^{11,12} and $\mathbb{Z}_2$ spin liquids¹³⁻¹⁷).

Here we introduce an *apparently* different entropy as follows. Consider a 1D quantum model and its ground state $|g\rangle$. If one chooses an orthogonal basis $\{|i\rangle\}$ of the Hilbert space, one gets a set of probabilities $p_i := |\langle i|g\rangle|^2$, from which a Shannon entropy can be defined,

$$S := - \sum_i p_i \log p_i. \quad (1)$$

Note that this entropy depends on the choice of basis. For a $U(1)$ -symmetric model with the conservation of the particle number or the magnetization, we use the local particle occupations $\{n_j\}$ or magnetizations $\{\sigma_j^z\}$ to define the basis. The entropy S is small when the wave function $|g\rangle$ is dominated by a particular crystal state $|i_0\rangle$. It becomes larger as more basis states contribute to the wave function due to quantum fluctuations. Thus, this entropy quantifies quantum fluctuations or entanglement occurring in the given basis. Like other entanglement measures, we will see that the scaling of

this entropy is controlled by the essential long-distance nature of the system. We note that a similar entropy also appears in the context of dynamical systems,^{18,19} where it is used to quantify chaos.²⁰

At the same time, this entropy has an interpretation as the entanglement entropy of a two-dimensional (2D) quantum state, as we describe in detail in Sec. II. The basic idea goes as follows. A 1D quantum Hamiltonian on a ring is related to a 2D classical model on a cylinder in the transfer matrix formalism. Then a Rokhsar-Kivelson (RK)-type wave function^{21,22} $|\text{RK}\rangle$ can be constructed from this 2D classical model. One can show that in the limit of a long cylinder, the entropy S defined in Eq. (1) is precisely the entanglement entropy $S^{\text{vN}}(A)$ of the 2D RK state $|\text{RK}\rangle$ for a half-cylinder A shown in Fig. 1. More specifically, each probability p_i becomes an eigenvalue of the reduced density matrix ρ_A . This correspondence allows us to apply a simpler 1D picture to study the universal behavior of entanglement entropy in 2D critical systems, a very active subject in recent literature.²³⁻²⁵

The purpose of the present paper is to unveil the generic scaling properties of the Shannon entropy [Eq. (1)] of 1D

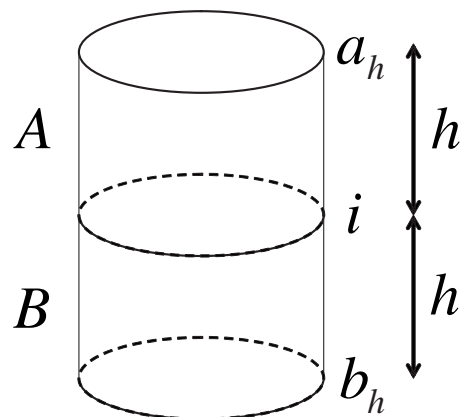


FIG. 1. Two dimensional system with a cylinder geometry, divided into upper and lower parts, A and B .

ground states $|g\rangle$ as a function of the ring length L . This amounts to studying the entanglement entropy S^{vN} of 2D RK states $|\text{RK}\rangle$ defined on a cylinder of circumference L . In both critical and massive systems, we observe that for large L , the entropy is composed of an extensive part proportional to L and a subleading constant

$$S(L) = \alpha L + S_0 + o(1). \quad (2)$$

The extensive part αL simply reflects the fact that a generic wave function $|g\rangle$ spreads over an exponentially large number of microscopic configurations. In terms of the 2D entanglement entropy, this can be interpreted as a boundary contribution. Here, we are however interested in the subleading constant S_0 . As we will see, S_0 is universal and is determined by the basic properties of critical or massive systems.

Our primary interest lies in the situation where a 1D quantum or 2D classical system (used to build a RK state) is described by a $c=1$ massless bosonic field theory [Tomonaga-Luttinger liquid (TLL)] with the Euclidean action

$$\mathcal{A}[\phi] = \frac{1}{8\pi} \int \int dx dy [(\partial_x \phi)^2 + (\partial_y \phi)^2]. \quad (3)$$

Here the bosonic field is compactified on a circle: $\phi \equiv \phi + 2\pi R$. The boson compactification radius R is an important scale-invariant number which controls the power-law behavior of various physical quantities.²⁶ We find that S_0 is given by a simple function of the radius

$$S_0 = \log R - \frac{1}{2}. \quad (4)$$

We present detailed analyses to establish this result. In Sec. III, we study the Dyson-Gaudin Coulomb gas model,^{27,28} which gives probabilities $\{p_i\}$ for the dimer model on the hexagonal lattice and the Calogero-Sutherland (CS) model.^{29,30} In particular, in Sec. III C, we analytically derive Eq. (4) using a free field representation of the gas model. In Sec. IV, we numerically demonstrate the same result in the spin-1/2 XXZ chain.

At a certain value of R , the system undergoes a phase transition to a massive crystal phase. As we show in Secs. III D and IV, in the massive phase breaking a symmetry, S_0 is related to the ground-state degeneracy d ,

$$S_0 = \log d. \quad (5)$$

At the transition point, we observe a jump in S_0 , though it is slightly obscured due to finite-size effects.

As an example showing the $c=1/2$ criticality, in Sec. V, we study an Ising chain in a transverse field [Eq. (63)]. We calculate the entropies in σ^z and σ^x bases, corresponding to the RK states built from an eight-vertex model and a 2D Ising model, respectively. The extracted constants $S_0^{(z)} \simeq -0.4387$ and $S_0^{(x)} \simeq 0.2544$ at the critical point might be generic constants characterizing the $c=1/2$ CFT, although we do not have any analytical derivation of these numbers. In the symmetry-broken phase, the constant takes $S_0^{(z)} = -\log 2$ in the σ^z basis, which is interpreted as a manifestation of $\mathbb{Z}_2$ topological order in the eight-vertex RK state.

As a related quantity, in Sec. VI, we study the scaling of the largest probability $p_0 := \max p_i$. This maximum is attained by crystal states $|i_0\rangle$, e.g., by Néel states $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\ldots\rangle$ and $|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\ldots\rangle$ for the XXZ chain in zero magnetic field. Very similarly to the entropy $S(L)$, the logarithm of p_0 has a dominant linear contribution followed by a subleading constant

$$-\log p_0 = \tilde{\alpha} L + \gamma + o(1). \quad (6)$$

For $c=1$ critical systems, our numerical results in the Dyson-Gaudin gas and the XXZ chain show that

$$\gamma = \log R. \quad (7)$$

This result, together with Eq. (4), gives a simple and universal way to determine the radius R from a ground-state wave function.

Here we comment on closely related works. Using boundary CFT, Hsu *et al.*²⁴ also studied the entanglement entropy of 2D RK wave functions for a half-cylinder. Their prediction for the constant S_0 differs from ours, although it matches our calculation for a different constant γ appearing in $-\log p_0$. A quantity similar to p_0 has also been studied by Campos Venuti *et al.*³¹ in the context of fidelity, in agreement with our result [Eq. (7)].

II. CORRESPONDENCE BETWEEN SHANNON AND ENTANGLEMENT ENTROPIES

In this section, we formulate the connection between the entanglement entropy of Rokhsar-Kivelson states and the Shannon entropy of the ground states of 1D quantum models.

A. Generalized Rokhsar-Kivelson states

We start from a discrete classical (spin) model on a 2D lattice defined by Boltzmann weights $e^{-E(c)}$ for microscopic configurations c of the system. The partition function is given by

$$\mathcal{Z} = \sum_c e^{-E(c)}. \quad (8)$$

The Hilbert space of a 2D quantum system is constructed by associating a basis state $|c\rangle$ to each classical configuration c . Then, one can define a generalized RK wave function as the linear combination of all the basis states $|c\rangle$ with amplitudes given by the square roots of the classical Boltzmann weights,^{21,22}

$$|\text{RK}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}}} \sum_c e^{-(1/2)E(c)} |c\rangle. \quad (9)$$

The RK state shares the same correlations with the original classical model as long as one focuses on the diagonal correlations in the $\{|c\rangle\}$ basis. This type of state was first introduced as the ground state of the quantum dimer model on the square lattice, where $\{c\}$ are fully packed dimer coverings of the lattice. Later, the same type of states has been studied for different lattices (hexagonal,³² triangular,³³ kagome,³⁴ etc.) and for a modified dimer model.³⁵ The RK states for the

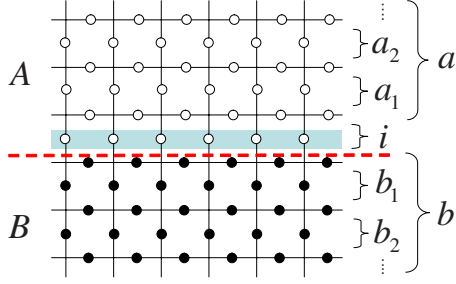


FIG. 2. (Color online) Spatial division of the square lattice into regions A and B , corresponding to the procedure in Sec. II B 1. The system is defined on a cylinder and is periodic in the horizontal direction.

eight-vertex model on the square lattice have also been studied.³⁶

B. Schmidt decomposition and entanglement entropy

We divide the system into two parts, A and B , as in Fig. 1. The reduced density matrix ρ_A is obtained from a state $|\text{RK}\rangle$ by tracing out the degrees of freedom in B ,

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\text{RK}\rangle\langle\text{RK}|. \quad (10)$$

We are interested in the (von Neumann) entanglement entropy of A ,

$$S^{\text{vN}}(A) = -\text{Tr} \rho_A \log \rho_A. \quad (11)$$

Here we show that the calculation of $S^{\text{vN}}(A)$ for a RK state [Eq. (9)] can be recast as a fully classical calculation, provided that the boundary between A and B satisfies certain geometrical conditions. This is done by deriving a Schmidt decomposition of the RK state [Eq. (9)].

1. Case with local constraints

We first consider the case where the classical model contains certain local constraints. For simplicity, we assume that the system consists of Ising variables σ_j sitting on the bonds of the square lattice as in Fig. 2. (The same argument also applies to a model on the hexagonal lattice.) Around each site, the four Ising variables σ_j 's satisfy the following constraint: if three of them are specified, the last one is uniquely determined. Dimer, six-vertex, and loop models satisfy this condition. For example, in the case of a dimer model, we assign $\sigma_j = \pm 1$ to the presence or absence of a dimer on the bond j . Then, there is strictly one bond with $\sigma_j = +1$ emanating from each site.

We define the system on a cylinder and divide it into A and B , as shown in Fig. 2. Here, all spins at the boundary belong to A . The spin configurations a and b inside A and B must agree with the configuration i at the boundary. Let $\mathcal{E}_i^A$ ($\mathcal{E}_i^B$) be a set of such a 's (b 's). Thanks to the local constraints, such sets share no common element,

$$\mathcal{E}_i^\Omega \cap \mathcal{E}_{i'}^\Omega = \emptyset \quad (\Omega = A, B; i \neq i'). \quad (12)$$

We assume that the classical model $E(c)$ contains only local interactions involving four bonds around each site. The energy can then be decomposed into two parts,

$$E(c) = E_A(a, i) + E_B(b, i). \quad (13)$$

The first term corresponds to all the interactions among spins in A . The second corresponds to interactions among spins in B and the boundary region. The important point is the absence of direct interaction between spins inside A and B . Thanks to this property, the Boltzmann weight of the configuration $c = (a, i, b)$ factorizes into two parts, which allows us to rewrite Eq. (9) as follows:

$$|\text{RK}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}}} \sum_i \left[\sum_{a \in \mathcal{E}_i^A} e^{-(1/2)E_A(a, i)} |a, i\rangle \right] \times \left[\sum_{b \in \mathcal{E}_i^B} e^{-(1/2)E_B(b, i)} |b\rangle \right]. \quad (14)$$

We define normalized RK states (boundary dependent) on A and B as

$$|\text{RK}_i^A\rangle := \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^A}} \sum_{a \in \mathcal{E}_i^A} e^{-1/2 E_A(a, i)} |a, i\rangle, \quad (15a)$$

$$|\text{RK}_i^B\rangle := \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^B}} \sum_{b \in \mathcal{E}_i^B} e^{-1/2 E_B(b, i)} |b\rangle, \quad (15b)$$

$$\text{with } \mathcal{Z}_i^\Omega = \sum_{\omega \in \mathcal{E}_i^\Omega} e^{-E_\Omega(\omega, i)} \quad (\Omega = A, B). \quad (15c)$$

Then we arrive at the Schmidt decomposition,

$$|\text{RK}\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |\text{RK}_i^A\rangle |\text{RK}_i^B\rangle, \quad \text{with } p_i := \frac{\mathcal{Z}_i^A \mathcal{Z}_i^B}{\mathcal{Z}}. \quad (16)$$

Here, the mutual orthogonality $\langle \text{RK}_i^\Omega | \text{RK}_{i'}^\Omega \rangle = \delta_{ii'}$ is guaranteed by Eq. (12). The reduced density matrix ρ_Ω (with $\Omega = A$ or B) is then³⁷

$$\rho_\Omega = \sum_i p_i |\text{RK}_i^\Omega\rangle\langle\text{RK}_i^\Omega|. \quad (17)$$

Therefore, we get

$$S^{\text{vN}}(A) = -\sum_i p_i \log p_i. \quad (18)$$

The entanglement entropy can thus be computed from the classical partition functions $\mathcal{Z}_i^A \mathcal{Z}_i^B$ with boundary spins fixed in a state i . Similar formulations were used in Refs. 13–16 for exact, perturbative, and/or numerical calculations of entanglement entropy in toric code, quantum eight-vertex, and quantum dimer models.

2. General case

The above discussion relies on the presence of local constraints. Without them, any configuration b is allowed in B irrespective of i , and states $\{|\text{RK}_i^B\rangle\}$ defined in Eq. (15b) are not mutually orthogonal in general. Even in such a general case, one can slightly modify the model so that the entanglement entropy can be computed in the same formulation.

For simplicity, we assume that the classical model is defined on the square lattice, and a spin- S degree of freedom

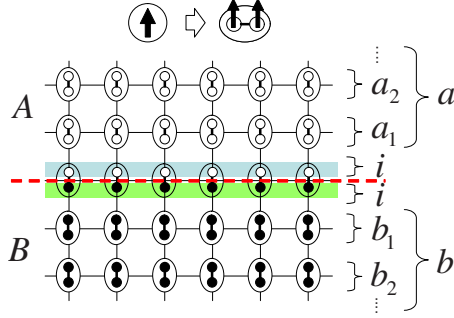


FIG. 3. (Color online) Spatial division of the square lattice, corresponding to the procedure in Sec. II B 2. Each spin of the original model is replaced by a *pair* of spins. An infinitely strong ferromagnetic interaction ensures that the two spins are always in the same state. The (new) lattice is divided in two regions, A and B, and the original sites which overlap with both regions are called “boundary” sites. The RK state admits a simple Schmidt decomposition (see text) if the only interactions between A and B take place inside the boundary region. For general short ranged interactions (not necessarily first neighbor), this condition can be achieved by choosing a sufficiently “fatted” boundary region.

lives on every site. We again assume that the energy $E(c)$ consists only of interactions between nearest-neighbor spins. As illustrated in Fig. 3, each spin is *duplicated* and an infinitely strong “ferromagnetic” interaction is added so that the two copies of the original spin are always in the same state (no spurious degrees of freedom are introduced). Then the two regions A and B are introduced in such a way that all the spin-spin interactions in $E(c)$ take place inside A or B. In other words, the only allowed couplings between A and B are the infinitely strong ferromagnetic interactions between copies of the same physical spin. If one prefers to think in terms of the original spins only (not duplicated), this amounts to saying that regions A and B are overlapping around their boundary.

In this setup, each state $|c\rangle$ can be labeled in the following way:

$$|c\rangle = |a, i\rangle \otimes |b, i\rangle. \quad (19)$$

Here, each original spin lying at the boundary is effectively “split” and has one copy in $|a, i\rangle$ and the other in $|b, i\rangle$. The Schmidt decomposition [Eq. (16)] is then constructed using the following states:

$$|\text{RK}_i^\Omega\rangle := \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^\Omega}} \sum_{\omega} e^{-1/2 E_\Omega(\omega, i)} |\omega, i\rangle, \quad (20a)$$

$$\text{with } \mathcal{Z}_i^\Omega = \sum_{\omega} e^{-E_\Omega(\omega, i)} \quad (\Omega = A, B). \quad (20b)$$

Here, the difference from Eq. (15) is the presence of i inside the ket $|\omega, i\rangle$ for both $\Omega=A$ and B , which ensures the mutual orthogonality of $\{|\text{RK}_i^\Omega\rangle\}$.

C. Transfer matrix calculation of the reduced density matrix spectrum

In Sec. II B 2, the spectrum $\{p_i\}$ of the reduced density matrix has been expressed in terms of the classical partition functions with spins fixed in the boundary region. In the cylindrical geometry of Fig. 1 with circumference L and height $2h$, we can relate this spectrum to the ground state of a 1D quantum spin model using the transfer matrix formalism.

Corresponding to the 2D classical model, we introduce the transfer matrix $\mathcal{T}$ in the upward direction in such a way that it connects spin configurations on neighboring “rings” winding around the cylinder (e.g., a_1 and a_2 shown in Figs. 2 and 3). The classical partition function [Eq. (8)] is then expressed as

$$\mathcal{Z} = \sum_{a_{h-1}, \dots, a_1} \sum_i \sum_{b_1, \dots, b_{h-1}} \quad (21)$$

$$\langle a_h | \mathcal{T} | a_{h-1} \rangle \cdots \langle a_2 | \mathcal{T} | a_1 \rangle \langle a_1 | \mathcal{T} | i \rangle \quad (22)$$

$$\times \langle i | \mathcal{T} | b_1 \rangle \langle b_1 | \mathcal{T} | b_2 \rangle \cdots \langle b_{h-1} | \mathcal{T} | b_h \rangle \quad (23)$$

$$= \langle a_h | \mathcal{T}^{2h} | b_h \rangle. \quad (24)$$

Here, the spin configurations, a_h and b_h , at the top and bottom edges of the cylinder are fixed. In this setup, the classical probability to find a given configuration i on the ring (boundary) is

$$p_i = \frac{1}{\mathcal{Z}} \langle a_h | \mathcal{T}^h | i \rangle \langle i | \mathcal{T}^h | b_h \rangle. \quad (25)$$

We now consider the limit of a long cylinder $h \gg L$ so that only the dominant eigenvector $|g\rangle$ of $\mathcal{T}$ (with the largest eigenvalue m_0) contributes. Using $\mathcal{T}^h \approx m_0^h |g\rangle \langle g|$, we get

$$p_i \approx |\langle i | g \rangle|^2. \quad (26)$$

If the transfer matrix is related to 1D quantum Hamiltonian $\mathcal{H}$ via $\mathcal{T} \approx e^{-\tau \mathcal{H}}$ (with τ being a small time interval), $|g\rangle$ is the ground state of $\mathcal{H}$. Then, Eq. (26) means that the complete spectrum of the reduced density matrix ρ_A is given by the elements of the ground-state vector $|g\rangle$.

In the rest of the paper, we will make an extensive use of this property to calculate the entanglement entropy [Eq. (18)]. We study several RK states (dimer, vertex, and Ising models) defined on the infinite cylinder for relatively large values of L (maximally, $L=48$ for the dimer models and $L=32$ in the six-vertex models with no field).

D. Thermodynamic extension

The spectrum $\{p_i\}$ of the reduced density matrix ρ_A for a RK state has a simple interpretation in terms of boundary free energy of the classical model. Using Eq. (16), we get

$$-\log p_i = F_i^A + F_i^B - F, \quad (27)$$

where $F_i^A := -\log \mathcal{Z}_i^A$ (F_i^B) is the free energy of the subsystem A (B) with its boundary with B (A) fixed in the configuration

i. Also, $F = -\log \mathcal{Z}$ is the free energy of the whole system, without any constraint on the spin configuration at the boundary between A and B . We now identify the right-hand side (rhs) of Eq. (27) as an effective energy $2E(i)$ for the boundary spins.³⁸ Then the entanglement entropy $S^{\text{vN}}(A)$ in Eq. (18) can be interpreted as the “thermal” entropy for the boundary spins. We push further this thermodynamic interpretation of $S^{\text{vN}}(A)$ by introducing a parameter β in order to modify the probabilities p_i ,

$$p_i = e^{-2E(i)} \rightarrow p_i(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E(i)}, \quad (28)$$

where $Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E(i)}$ is a normalization factor [with $Z(\beta=2)=1$]. Here, β plays the role of an effective inverse temperature for the boundary spins [but *a priori not* for the bulk of the classical system defined by Eq. (8)]. This allows us to generalize the entropy $S(\beta=2)=S^{\text{vN}}(A)$ to arbitrary $\beta > 0$. It can be computed through the standard thermodynamical relation $S(\beta) = (1 - \beta \partial_\beta) \log Z(\beta)$. This formulation will be useful in Sec. III. We note that a similar extension of entanglement entropy has also been discussed by Li and Haldane.^{39,40}

III. FROM CRITICAL DIMER RK STATES TO DYSON-GAUDIN COULOMB GAS

In this section, we study critical dimer RK states on bipartite lattices and a related 1D classical gas model. Using the formulation of Sec. II, we compute the entanglement entropies of the dimer RK states using the dominant eigenvectors of the transfer matrices. As described in Appendixes B and C, the transfer matrices of the dimer models can be expressed as free fermion Hamiltonians, and their dominant eigenvectors are Slater determinants. In particular, for the hexagonal lattice dimer model, the resulting probabilities $\{p_i\}$ coincide with the Boltzmann weights of a 1D lattice gas interacting via a repulsive logarithmic potential (Dyson-Gaudin gas) at the inverse temperature $\beta=2$. This gas model is also related to the discretized.⁴¹ Therefore, the entanglement entropy of the dimer RK state and the Shannon entropy of the discretized Calogero-Sutherland ground-state wave function coincide with the thermal entropy of the gas model. As we will demonstrate in Secs. III A and III B, this entropy contains a nonextensive constant contribution [Eq. (4)]. In Sec. III C, we derive it analytically using the free field representation of the gas model in the continuum limit.

A. Critical dimer RK states

We start from the RK states [Eq. (9)] constructed from the dimer models on the hexagonal and square lattices. The energy $E(c)$ takes zero for any fully packed dimer configuration c and infinity otherwise. These RK states are the ground states of quantum dimer models at special points and are known to be critical.^{21,32} By associating an Ising variable $\sigma_j = \pm 1$ with the dimer occupation on each bond j , we can adopt the formulation presented in Secs. II B 1 and II C to compute the half-cylinder entanglement entropy S^{vN} .

As described in Appendixes B and C, the transfer matrices $\mathcal{T}$ of the dimer models are expressed as free fermion Hamiltonians. Their dominant eigenvectors $|g\rangle$ are Slater determinants (Fermi sea), and the weight $p_i = |\langle i|g\rangle|^2$ can be computed by evaluating a determinant. Let us focus on the hexagonal case, where a simple expression for $\{p_i\}$ is available. We here assume that L is a multiple of 6 for the sake of simplicity. A generic configuration i of the boundary will be given by a number $n \in \{0, \dots, L\}$ of fermions living on the vertical edges of the boundary and their positions,

$$0 \leq \alpha_1 < \dots < \alpha_n \leq L-1. \quad (29)$$

It is also shown in Appendix B that, in the limit $h \gg L$, the only nonzero probabilities correspond to $n=2L/3$ fermions and are given by a Vandermonde determinant, which simplifies into

$$p_i = \frac{1}{L^n} \prod_{1 \leq j < j' \leq n} 4 \sin^2 \left(\frac{\pi}{L} (\alpha_j - \alpha_{j'}) \right). \quad (30)$$

This equation is invariant under $n \rightarrow L-n$. Therefore it is easier to compute it with $n=L/3$ fermions instead of $n=2L/3$. As we will see in Sec. III B, these probabilities coincide with the Boltzmann weights of a 1D lattice gas. Note that the present calculation is done without any constraint on the configurations, a_h and b_h , at the top and bottom of the cylinder. The number n of fermions leading to nonzero probabilities can be controlled by imposing certain boundary conditions.

Figure 4 shows the scaling of the entanglement entropy $S(L)$ for both the hexagonal and square cases. Here, in the square case, the weight p_i is computed by numerically evaluating the determinant in Eq. (C19). In the hexagonal case, we examine different fermion densities $\rho = n/L$ (or equivalently flux and/or winding sectors in the dimer language). In every case, the scaling of $S(L)$ appears to be approximately linear in L . The slope is nonuniversal, as expected, and depends on the details of the system. The most interesting result is the existence of a finite constant S_0 . By fitting the large- L values by $S(L) = \alpha L + S_0 + b/L$, we find $S_0 = -0.500 \pm 0.002$ in all cases. These results suggest that $S_0 = -1/2$ is a universal number for this family of RK wave functions.

B. Dyson-Gaudin gas on a circle

We consider a system of n charges $Q = -1$, living on a periodic one-dimensional lattice with L sites as in Fig. 5. These charges interact via a 2D Coulomb repulsive potential equal to minus the logarithm of their mutual distance. For convenience, we add a uniform background of L charges $Q = +1/2$ located on each site of the lattice. A configuration of the system will be determined by the positions $1 \leq \alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_n \leq L$ of the charges. Two charges cannot occupy the same site. The energy of a given configuration i is

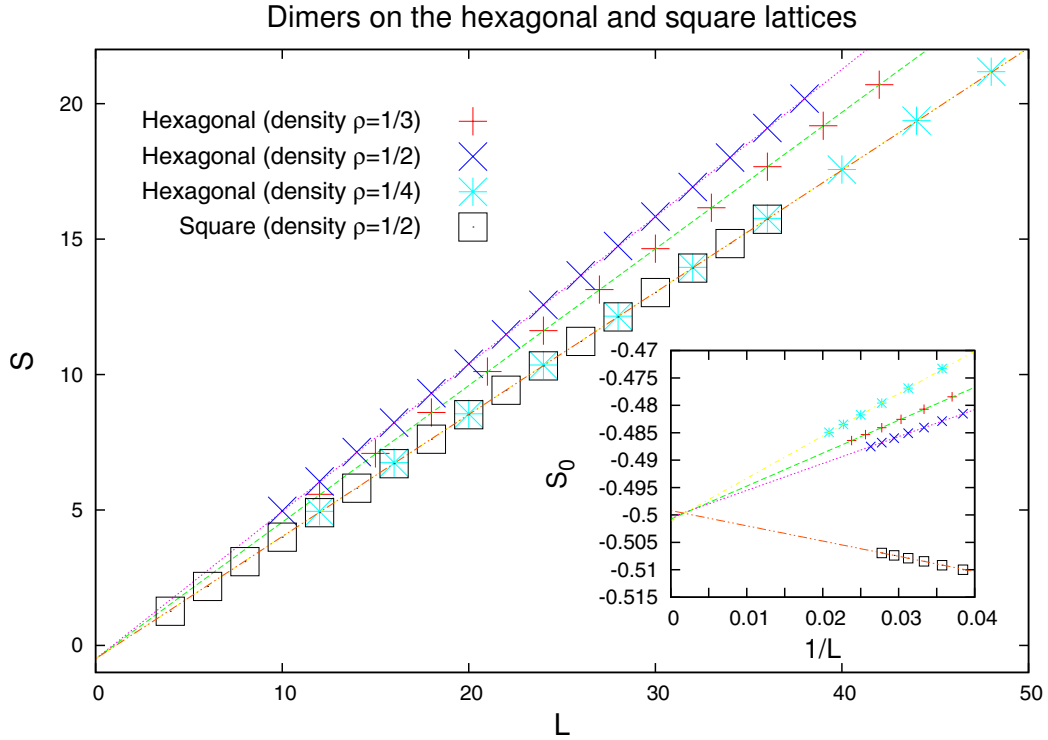


FIG. 4. (Color online) Entanglement entropy of RK states corresponding to dimer models on the hexagonal lattice (with fermion densities $\rho=1/4, 1/3, 1/2$) and the square lattice (with $\rho=1/2$). In all cases, the entropy scales as $S \approx \alpha L + S'_0 + b/L$ with $S'_0 = -0.500(2)$. The inset shows S'_0 , the subleading constant computed this time from a linear fit $S \approx \alpha' L + S'_0$ on the interval $[12, L]$ as a function of $1/L$. The convergence toward $-0.500(1)$ can be seen.

$$E(i) = - \sum_{1 \leq j < j' \leq n} \log |e^{(2\pi i/L)\alpha_j} - e^{(2\pi i/L)\alpha_{j'}}| + \frac{n}{2} \log L, \quad (31)$$

where the second term comes from the interaction of each charge with the background. This may be viewed as a discretized version of the Dyson gas²⁷ and has been studied by Gaudin²⁸ (hence we name it the Dyson-Gaudin gas). As in Sec. III A, the “particle-hole” symmetry $n \rightarrow L - n$ is worth noticing. The classical 1D partition function is given by $Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E(i)}$ for an inverse temperature β , and the classical entropy can be calculated from it,

$$S(\beta) = \left(1 - \beta \frac{\partial}{\partial \beta}\right) \log Z(\beta). \quad (32)$$

Gaudin²⁸ evaluated the partition function exactly in the special cases where $\beta = 2\lambda$ with λ as an integer and $\lambda < L/(n-1)$,¹

$$Z_n^{(L)}(2\lambda) = \frac{(n\lambda)!}{n! L^{n(\lambda-1)} (\lambda!)^n}. \quad (33)$$

The probabilities $\{p_i\}$ in Eq. (30) calculated for the hexagonal lattice dimer model coincide exactly with the Boltzmann weights of the Dyson-Gaudin gas model with $\beta=2$: $p_i = e^{-2E(i)}$.

Hence the entanglement entropy for this dimer model corresponds to the thermal entropy $S(\beta=2)$ of the gas model. Note that $Z(\beta=2)=1$ if we set $\lambda=1$ in Eq. (33) because p_i in

Eq. (30) is already normalized. In the spirit of Sec. II D, we can generalize the entanglement entropy by changing the inverse temperature β . We define $p_i(\beta) = p_i^{\beta/2} / Z(\beta) = e^{-\beta E_i} / Z(\beta)$, and the associated Shannon entropy

$$S(\beta) = - \sum_i p_i(\beta) \log p_i(\beta) \quad (34)$$

coincides with the thermal entropy [Eq. (32)] of the gas model. Notice that Gaudin’s solution (33) cannot be used to compute the entropy $S(\beta)$ because it is valid only for special values of β . Instead, we compute $S(\beta)$ numerically by explicitly summing over all the configurations.

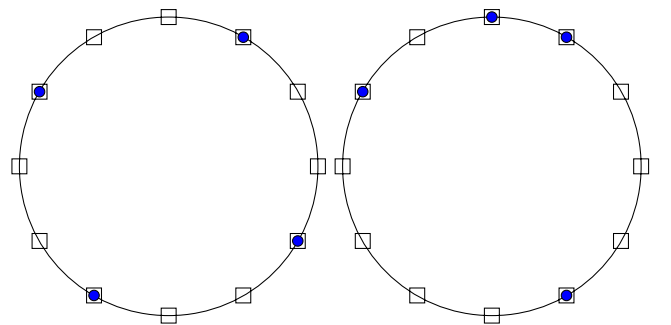


FIG. 5. (Color online) System of $n=4$ charges $Q=-1$ on a circle with $L=12$ sites. The left shows the configuration with highest probability (degeneracy: 3) and the right shows a random configuration. On each site, a “background” charge $Q=+1/2$ is added.

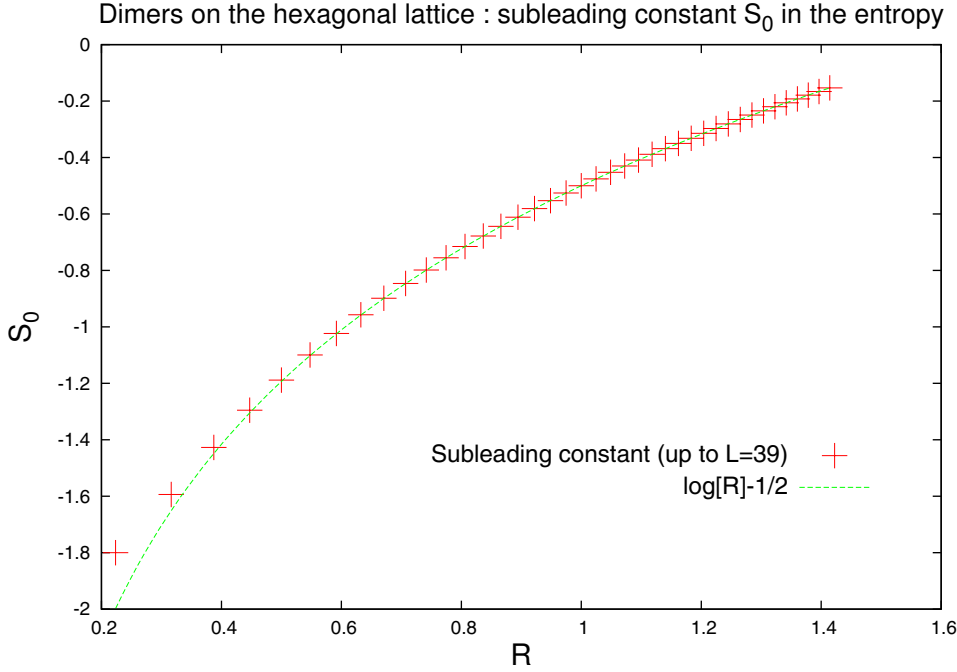


FIG. 6. (Color online) The subleading constant S_0 in the thermal entropy of the Dyson-Gaudin gas with density $\rho=1/3$ as a function of $R=\sqrt{\beta}/2$. At $\beta=2$, this coincides with the constant part in the entanglement entropy of the hexagonal dimer RK state shown in Fig. 4. The data well obey Eq. (36).

Here we mention the connections with other models. The Dyson gas model emerges in the weights $|\langle i|g\rangle|^2$ of the Jastrow-type ground-state wave function of the CS model.^{29,30} The inverse temperature β of the gas model is related to the coupling constant of the CS model. The CS model is described as a Tomonaga-Luttinger liquid at low energies. According to a spectral analysis of the CS model,⁴² the boson radius R is related to β as

$$R = \sqrt{\frac{\beta}{2}}. \quad (35)$$

This allows us to control R simply by changing β . This relation will also be justified from a different viewpoint in Sec. III C. The Haldane-Shastry model^{43,44} is a discretized version of the CS model, and its Jastrow ground state (Gutzwiller-projected Fermi wave function) has the weights exactly obeying the Dyson-Gaudin gas with $\beta=4$. This model has $R=\sqrt{2}$ because of the $SU(2)$ symmetry in consistency with Eq. (35). Note also that the same wave function is known to be an extremely good ansatz for the ground state of the Heisenberg chain.

Now we analyze the thermal entropy $S(\beta)$ of the gas model. We extract the nonextensive constant contribution S_0 as in Fig. 4 and plot it as a function of $R=\sqrt{\beta}/2$ in Fig. 6. We find that the data agree well with a simple relation

$$S_0 = \log R - \frac{1}{2}. \quad (36)$$

This expression is derived analytically in Sec. III C. It should be noted that the subleading constant [Eq. (36)] is increasing with β , contrary to the total entropy, which is decreasing with β , as should be the case in classical thermodynamics.

C. Free bosonic field

In this section, we obtain the expression of the entropy S_0 using a field-theoretical approach. Our goals are to obtain a

continuous expression for the partition function of the gas studied in Sec. VII and deduce from it the expression of the entropy.

We consider a continuous distribution, $\rho(\theta)$, of electric charges on the unit circle. The expression of the electrostatic energy [Eq. (31)] is given by

$$E = -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \rho(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} \rho(\theta') d\theta' \log \left| 2 \sin \left(\frac{\theta - \theta'}{2} \right) \right|. \quad (37)$$

We define a field $\phi(\theta)$ measuring the amount of charge in the interval $[0, \theta]$ in units of 2π ,

$$\phi(\theta) = 2\pi \int_0^\theta \rho(\sigma) d\sigma. \quad (38)$$

By performing partial integrations twice, the energy is rewritten as

$$E[\phi] = \frac{1}{64\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\theta' \left(\frac{\phi(\theta) - \phi(\theta')}{\sin \left(\frac{\theta - \theta'}{2} \right)} \right)^2. \quad (39)$$

Since the functional integration is over $\rho=\phi'$, the zero mode of ϕ is unphysical and should be discarded [it can be removed by adding an appropriate constant to Eq. (38)]. By expanding the field ϕ over modes,

$$\phi = 2\pi \sum_{m \geq 1} (x_m e^{im\theta} + \bar{x}_m e^{-im\theta}), \quad (40)$$

the energy [Eq. (39)] reduces to

$$E = \frac{(2\pi)^2}{2} \sum_{m \geq 1} m |x_m|^2. \quad (41)$$

Integrating the Boltzmann weight $e^{-\beta E}$ over the modes $dx_m d\bar{x}_m$, we obtain the partition function Z_{sphere} of the gas,

$$Z_{\text{sphere}} = \prod_{m \geq 1} \frac{2}{2\pi\beta m}. \quad (42)$$

To find possible universal contributions to the corresponding free energy, this expression of course needs to be regularized. Following Nahm,⁴⁵ we regularize the measure $dx_m d\bar{x}_m$ to take into account the finiteness of the number of states. We set $|x_m| = \rho_m$ and take the measure to be $d(2\pi[\rho_m^2]^{f(m/\Lambda)})$, where $f(x) = 1$ in the interval $[0, 1]$ and decreases to $f(\infty) = 0$ sufficiently fast. We obtain

$$Z_{\text{sphere}} = \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\pi m \beta} \right)^{f(m/\Lambda)} \Gamma[1 + f(m/\Lambda)]. \quad (43)$$

The Euler-MacLaurin formula yields

$$\begin{aligned} \prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\pi \beta} \right)^{f(m/\Lambda)} \Gamma\left[1 + f\left(\frac{m}{\Lambda}\right)\right] &= \sqrt{\pi \beta} \exp\left[\Lambda \int_0^{\infty} g_{\beta}(x) dx\right] \\ &\times [1 + o(1)], \end{aligned} \quad (44)$$

$$g_{\beta}(x) = \log \Gamma[1 + f(x)] - \log(\pi \beta) f(x). \quad (44)$$

Here we decompose f into the sum of a step function on $[0, 1]$ and a function vanishing on $[0, 1]$,

$$\prod_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{m} \right)^{f(m/\Lambda)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\Lambda \int_0^{\infty} \log(\Lambda x) f(x) dx\right] [1 + o(1)], \quad (45)$$

where we have used the Stirling formula on the term corresponding to the step function and the Euler-MacLaurin formula on the other one. Putting everything together,

$$\begin{aligned} Z_{\text{sphere}} &= \sqrt{\frac{\beta}{2}} \exp\left\{ \Lambda \int_0^{\infty} dx \log \Gamma[1 + f(x)] \right. \\ &\quad \left. - \log(\pi \beta \Lambda x) f(x) \right\} [1 + o(1)]. \end{aligned} \quad (46)$$

The regularized partition function is obtained after removing the exponential factor, $\Lambda^{-a\Lambda} \mu^{\Lambda}$, which can be thought as the “extensive” part

$$Z_{\text{sphere}} = \sqrt{\frac{\beta}{2}}. \quad (47)$$

This result is simply equal to the ζ regularization of Eq. (42). In this derivation, the normalization of the integration measure over the modes is adjusted so that $Z_{\text{sphere}} = 1$ at $\beta = 2$, in agreement with our microscopic definition of the partition function, $Z_{\text{sphere}}(\beta) = \sum_i p_i^{\beta/2}$, in the discrete model. From this expression, we deduce the thermal entropy,

$$S_0 = \frac{1}{2} \log\left(\frac{\beta}{2}\right) - \frac{1}{2}, \quad (48)$$

in agreement with our numerical result in Fig. 6.

Alternatively, we can normalize the field ϕ differently so as to include the inverse temperature β in its definition. We introduce a radius R and set $\beta = 2R^2$. The field ϕ is now defined mod $2\pi R$. We can extend its range of definition by requiring it to be a harmonic function on the unit disk Ω and express the energy as a Dirichlet integral,

$$\frac{\beta}{2} E = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} dz d\bar{z} \partial_z \phi \partial_{\bar{z}} \phi, \quad (49)$$

where $z = x + iy$. This coincides with the action [Eq. (3)] except that the range of integration is limited to the unit disk Ω .

One can view Eq. (49) as the action of a closed string⁴⁶ propagating on a circle of radius R with a Regge slope $\alpha' = 2$. Now, if we include the center of mass (zero mode) into the definition of ϕ , we see that the regularized measure $[d\phi]$ becomes *invariant* under rescaling of the field, so that we can also take the field defining the measure to be defined mod $2\pi R$. The partition function Z_{sphere} of the electrostatic gas is obtained by sewing together two disks to form a sphere and is given by the partition function of a closed string propagating on a circle of radius R . Proceeding in this way, the oscillators do not contribute and it reduces to the center of mass integral,

$$Z_{\text{sphere}} = R, \quad (50)$$

in agreement with Eq. (47).

To understand this result, consider a closed string $\phi(\sigma, T)$ propagating in the Euclidean time T . Its partition function on the cylinder $[0, 2\pi] \times [0, T]$ with boundary fields equal to $\phi_{1,2}$ defines the propagator $Z(\phi_1, \phi_2)$. We evaluate the torus partition function Z_{torus} by taking the trace of the propagator over $\phi = \phi_1 = \phi_2$,

$$Z_{\text{torus}} = \int [d\phi] Z(\phi, \phi). \quad (51)$$

If we decompose the field ϕ into the sum of a harmonic function equal to ϕ_1, ϕ_2 at the two boundaries and a field vanishing at the boundaries, we factorize the propagator into two pieces: a classical one equal to $e^{-(\beta/2)E(\phi_1) - (\beta/2)E(\phi_2)}$ in the limit of large T and the partition function Z_{00} with Dirichlet boundary conditions. Thus, in the limit of large T , $Z_{\text{torus}} = Z_{\text{sphere}} Z_{00}$. But $Z_{00}/Z_{\text{torus}} = 1/R$ is the stationary probability distribution of the center of mass of the string diffusing on a circle of radius R and the result [Eq. (50)] follows. This formulation has the advantage to be easily generalizable to a closed surface of characteristic χ ,

$$Z_{\chi} = R^{\chi/2}. \quad (52)$$

We expect this formula also to apply to the case of open boundary conditions with suitable chiral boundary conditions.

Let us mention that Gaudin's partition function [Eq. (33)] has the same asymptotic expression as Z_{sphere} in Eq. (42) if we remove the nonuniversal extensive part. Indeed, by tak-

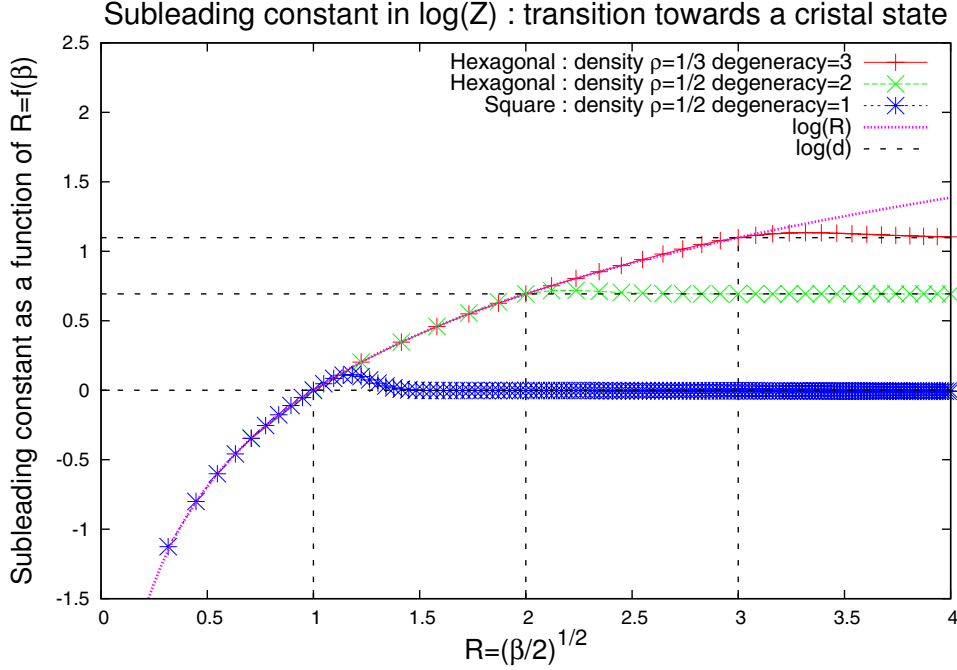


FIG. 7. (Color online) Liquid-crystal transitions induced by the boundary temperature β^{-1} in the dimer models. Here, the subleading constant C in $\log Z$ is shown. The critical radius is $R_c = d$ ($\beta_c = 2d^2$), where d is the degeneracy of the ground state. The constant C is expected to obey Eq. (55). The discrepancy slightly after R_c is very likely due to finite-size effects.

ing $n \rightarrow \infty$ while keeping $\rho = n/L$ constant, Stirling's formula $n! \approx \sqrt{2\pi n}(n/e)^n$ applied to Eq. (33) gives

$$Z_n^{(L)}(2\lambda) = \mu(\lambda)^n R, \quad \text{with } \mu(\lambda) = \frac{\rho^{\lambda-1} \lambda^\lambda e^{\lambda-1}}{\lambda!}. \quad (53)$$

Gaudin's formula (33) is only valid at integer values of λ and we cannot use it to evaluate the entropy. However, the denominator factor $L^{(\lambda-1)n}$ in Eq. (33) may be viewed as a regularization of the Dyson partition function,^{27,47} where L plays the same role as Λ defined above, and the entropy also derives from the Dyson gas partition function.

The compactification radius of the (continuum) CS ground state^{29,30} is known to be $R = \sqrt{\lambda = \beta/2}$ from Ref. 42. On the other hand, our numerics on the discretized version of the CS wave function indicate that the entropy constant is equal (within our numerical accuracy) to $S_0 = \log(\sqrt{\beta/2}) - 1/2$. From the analytical derivations presented above, this entropy constant must be related to the boson radius. We therefore conclude that the discretized CS state has long-distance properties described by the same boson compactification radius as the original continuum CS wave function. It is interesting to notice that this identification has been made through the ground-state structure of the CS model, i.e., without relying on the spectral properties unlike preceding approaches.⁴²

D. Phase transition toward a crystal state

The numerical results of Fig. 6 show that for not too large values of β , the nonextensive contribution to the entropy is given by $S_0 = \log R - 1/2$. As should be clear from Sec. III C, this can only be true if the system is described by a massless (but compactified) free field. But for sufficiently large β , the system undergoes a transition to a crystal state with spontaneous translation symmetry breaking. A simple way to understand that such a crystal is expected at large β is to notice

that for $\beta \rightarrow \infty$, only the particle configurations i for which the (original) probability p_i is maximum survive. For a particle density $1/d$, this selects d periodic configurations with equally spaced particles (see the left panel in Fig. 5). Adding fluctuations around these regular configurations will add *extensive* contributions to $S(L)$ while keeping the subleading constant

$$S_0 = \log d \quad (54)$$

stable in a crystal phase with a d -fold spontaneous symmetry breaking. Due to some finite-size effects, it turns out that the liquid-crystal transition is easier to see in the nonextensive part C of $\log Z$ (rather than that of S). The data displayed in Fig. 7 are consistent with

$$C = \begin{cases} \log R, & R \leq R_c = d \\ \log d, & R \geq R_c = d. \end{cases} \quad (55)$$

Using $S_0 = (1 - \frac{R}{2} \partial_R) C$, we can recover the subleading term S_0 in the entropy,

$$S_0 = \begin{cases} \log R - 1/2, & R < R_c = d \\ \log d, & R > R_c = d. \end{cases} \quad (56)$$

It should be noted that the transition is only visible on the subleading terms of S and $\log Z$.

The crystallization can also be understood from a free field point of view. Let us perturb the action [Eq. (3)] by a d -fold symmetry breaking *boundary* field,

$$Z_{h_d} = \left\langle \exp \left[h_d \int_0^{2\pi} \cos(d\phi) d\theta \right] \right\rangle_{\text{sphere}}, \quad (57)$$

where the integral is taken over the equator of the sphere. In a spin wave approximation, the anomalous dimension of the field h_d is

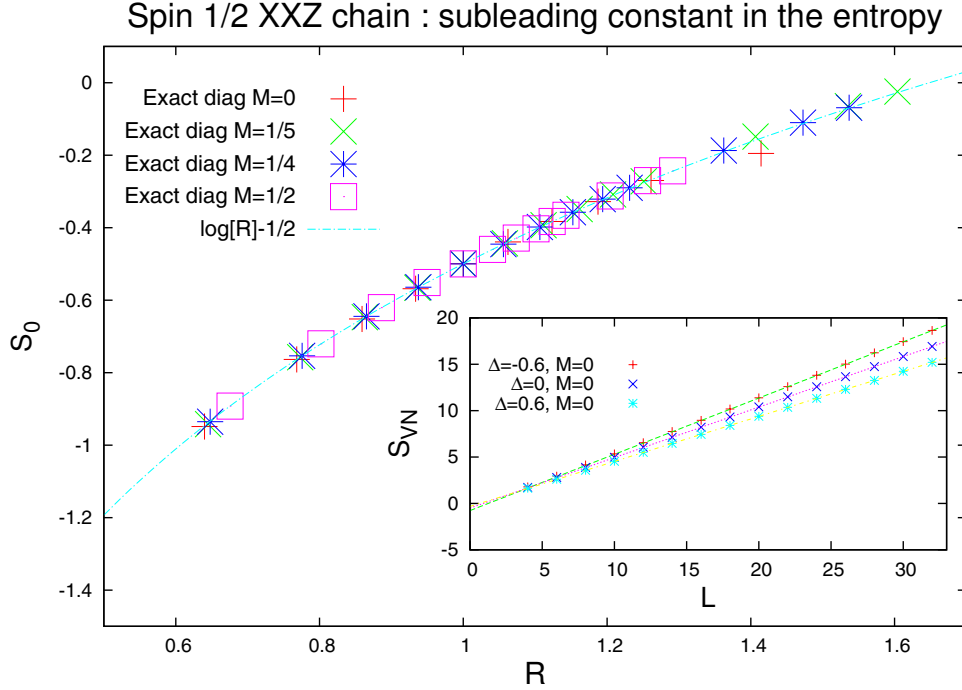


FIG. 8. (Color online) The subleading constant S_0 in the entropy S extracted from the critical ground state of the XXZ chain [Eq. (59)]. The examined values of Δ range from -0.8 to 1 for $M=0$ and from -0.8 to 8 for $M=1/5, 1/4$, and $1/2$. The inset shows the fitting of the data with the scaling form $S = \alpha L + S_0 + b/L$. The constant S_0 well obeys the proposed universal formula $\log R - \frac{1}{2}$. Close to the isotropic point ($\Delta=1$ and $M=0$) with $R=\sqrt{2}$, a small discrepancy from the proposed formula can be seen, which is very likely due to stronger finite-size effect around this point.

$$x_d = 1 - \frac{d^2}{R^2}. \quad (58)$$

Thus, the perturbation becomes relevant when $R \geq d$ in agreement with our observations (Fig. 7).

This transition is completely analogous to the localization transition of a macroscopic degree of freedom coupled to a dissipative environment in presence of a periodic potential.⁴⁸ In this context, the inverse temperature $\beta=2R^2$ is a friction coefficient. A similar transition is observed in the XXZ chain (see Sec. IV) but at a *different* value of the compactification radius ($R=\sqrt{2}$), compatible with the bulk roughening transition of the six-vertex model.

IV. SPIN-1/2 XXZ CHAIN AND SIX-VERTEX RK STATES

In this section, we consider the Shannon entropy [Eq. (1)] defined from the ground state $|\psi\rangle$ of the spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain,

$$\mathcal{H} = \sum_j (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z) - h \sum_j \sigma_j^z. \quad (59)$$

This Hamiltonian is related to the transfer matrix of the classical six-vertex model on the square lattice.^{49,50} Thus, using the argument of Sec. II, the Shannon entropy S here can also be interpreted as the entanglement entropy of the RK state built from this vertex model. Since the magnetization per site $M = \frac{1}{L} \sum_i \sigma_i^z$ is a conserved quantity, we can work in a sector with fixed M . We calculate the ground state of $\mathcal{H}$ for finite periodic chains using Lanczos diagonalization (up to $L=32$ for $M=0$ and $L=40$ for $M=1/2$) and evaluate the Shannon entropy S from it.

We first focus on the $c=1$ Tomonaga-Luttinger liquid phase extending over a wide region in $\Delta > -1$. The boson radius R depends on Δ and M (see Refs. 51 and 52 for details). When $M=0$, R is related to Δ via a simple relation

$$R = \sqrt{2 - \frac{2}{\pi} \arccos \Delta}, \quad -1 < \Delta \leq 1. \quad (60)$$

When $M \neq 0$, R can be determined numerically by solving the integral equations obtained from the Bethe-ansatz method.^{52–54} We set M at simple fractions $0, 1/5, 1/4$, and $1/2$ so that we can examine the dependence on the system size L . As in the critical dimer models studied in Sec. III D, the entropy S well obeys the scaling form $S \simeq \alpha L + S_0 + b/L$. The subleading constant S_0 obtained by fitting the data is plotted as a function of R in Fig. 8, which shows a remarkable agreement with

$$S_0 = \log R - \frac{1}{2}. \quad (61)$$

When increasing Δ at $M=0$, the system undergoes a Kosterlitz-Thouless transition at $\Delta=1$ from the critical phase to a massive Néel phase with doubly-degenerate ground states. In a finite-size system, the double degeneracy in the Néel phase is slightly split, and the ground state can be approximated by a macroscopic superposition of ordered states. When $\Delta \rightarrow \infty$, such a state is given by

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\downarrow\dots\rangle + |\downarrow\uparrow\dots\rangle). \quad (62)$$

This state gives $S=S_0=\log 2$. As in the discussion of Sec. III D, one can expect that quantum fluctuations around state (62) occurring in $\Delta < \infty$ produce only extensive contributions and that the constant $S_0=\log 2$ is stable in the massive phase $\Delta > 1$. Our numerical result for S_0 is presented in Fig. 9. The data show deviation from $\log 2$ when decreasing Δ , but it is likely due to finite-size effects. The peak and dip seen in the figure move to the left as we use larger L 's for extracting S_0 . In the thermodynamic limit, we expect a jump from $S_0=\log\sqrt{2}-1/2$ to $S_0=\log 2$ at the transition point $\Delta=1$.

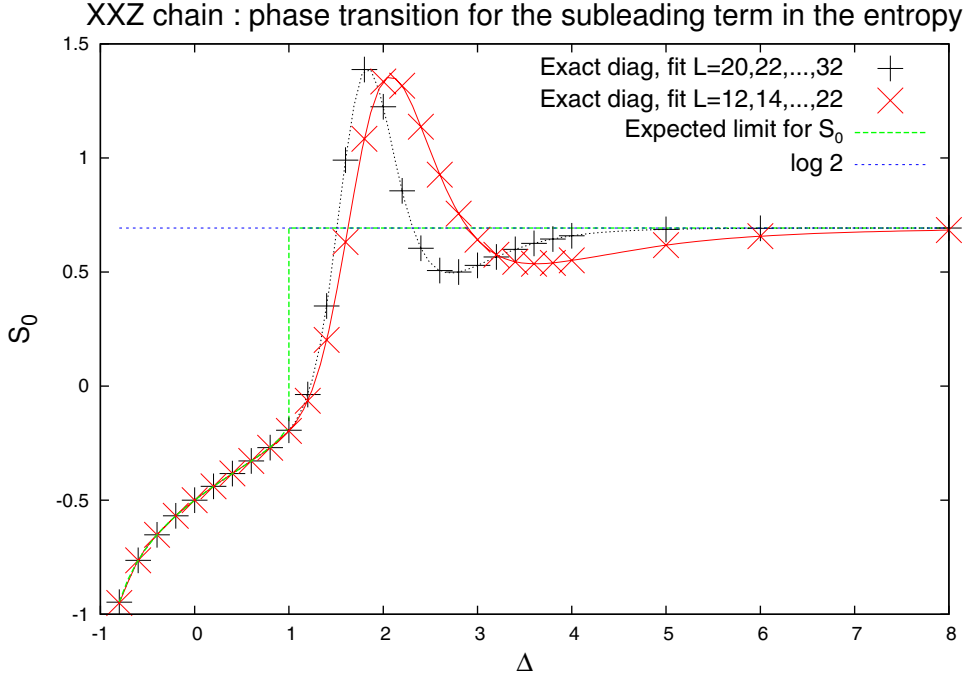


FIG. 9. (Color online) The constant part S_0 of the entropy and the phase transition in the XXZ chain at $M=0$. In the thermodynamical limit, we expect S_0 to be $S_0 = \log R(\Delta) - 1/2$ for $-1 < \Delta \leq 1$ and $S_0 = \log 2$ for $\Delta > 1$.

Finally, we note that the XXZ chain with $\Delta=1/2$ and $h=0$ corresponds to the so-called ice model,^{49,50} where all the configurations satisfying the ice rule (two in and two out around every vertex) occur with equal probabilities. The RK state built from the ice model has been studied for the spin and fermionic models on the checkerboard lattice.^{55,56} The result in this section shows that the half-cylinder entanglement entropy of this state has a subleading constant $S_0 = \log \sqrt{4/3} - 1/2$.

V. ISING CHAIN IN A TRANSVERSE FIELD

As an example showing a $c=1/2$ critical point, in this section, we study an Ising chain in a transverse field,

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^z. \quad (63)$$

This model is related to two types of 2D classical models depending on which basis we work with.⁵⁰ In the σ^x basis, we have a 2D Ising model,

$$E = - \sum_{\langle jj' \rangle} \sigma_j^x \sigma_{j'}^x, \quad (64)$$

where jj' runs over all the nearest-neighbor pairs of sites on the square lattice. This model shows a low-temperature ordered phase and a high-temperature paramagnetic phase. On the other hand, in the σ^z basis, we have an eight-vertex model of special type. The spins σ_j^z are placed on the bonds of the square lattice and satisfy local constraints; the product of four spins around each site must be even,

$$\prod_{j \in +} \sigma_j^z = +1. \quad (65)$$

Then the four spins can take eight states out of 2^4 possibilities, hence it is named eight vertex. The energy is given by

$$E = - \sum_j \sigma_j^z. \quad (66)$$

It is useful to introduce a loop representation of the configurations. We regard the lowest-energy state ($\sigma_j^z = +1$ for all j) as the “vacuum” and place a loop element on every bond j with $\sigma_j^z = -1$. Then only closed loops are formed because of the local constraints [Eq. (65)]. Equation (66) means that the energy cost to generate loops is proportional to their total length. At low temperatures, the system contains only small loops and is dominated by the vacuum (“small-loop” phase). At high temperatures, the formations of large loops are allowed and the system gets disordered (“large-loop” phase). The correspondence among quantum and classical models is shown in Table I, together with our results for the entropy which we present below.

Here we consider the Shannon entropies, $S^{(z)}$ and $S^{(x)}$, defined in the σ^z and σ^x bases, respectively. These correspond to the half-cylinder entanglement entropies of the RK states built from the eight-vertex model and the 2D Ising model, respectively (notice that for the latter, one needs to modify the model slightly in order to simplify the calculation, as presented in Sec. II B 2). The RK state constructed from the eight-vertex model [Eq. (66)] in the large-loop phase is particularly interesting because it possesses topological order. Such a state has been studied as the ground state of a quantum eight-vertex model^{16,36} (also known as an extended toric code model¹⁵).

As is well known, Hamiltonian (63) reduces to a fermionic quadratic form using the Jordan-Wigner transformation. It can then be diagonalized using the Bogoliubov transformation (see Appendix E). The weight $|\langle i|g \rangle|^2$ of each spin configuration $|i\rangle$ in the σ^z basis can be obtained by calculating a Pfaffian, and $S^{(z)}(L)$ is computed numerically by summing over all the 2^L configurations.

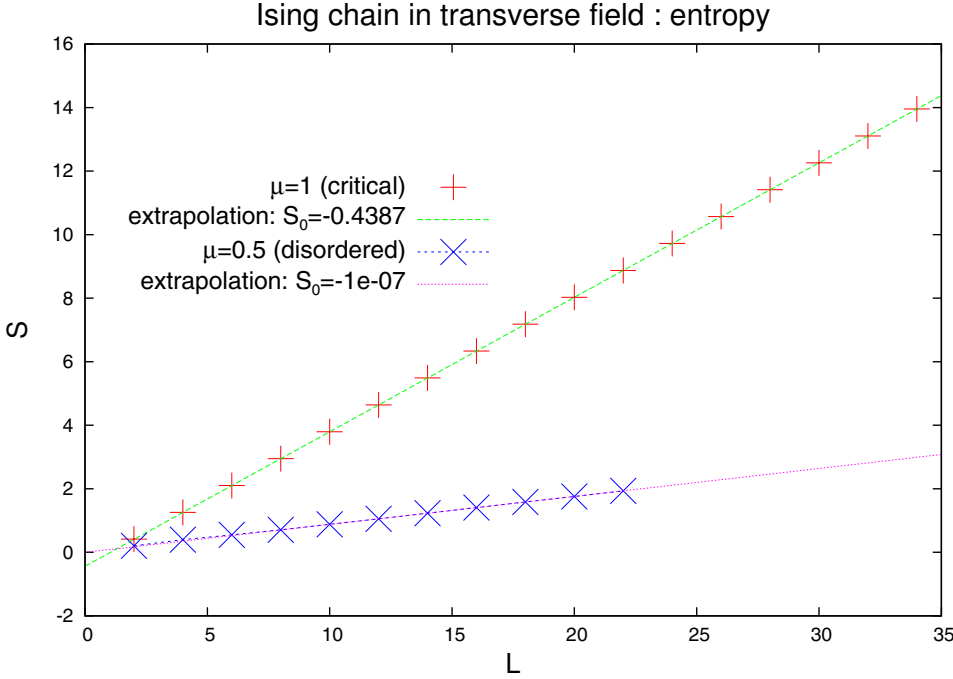


FIG. 10. (Color online) Entropy $S^{(z)}$ computed from the ground state of an Ising chain in a transverse field up to $L=36$ spins. The data for $\mu=1$ (critical point) are well reproduced by $S^{(z)} \simeq \alpha L + S_0^{(z)} + \delta/L$ with $S_0^{(z)} \simeq -0.4387(1)$ (determined from a fit to the last three points $L=32, 34, 36$). For $\mu=0.5$ in the disordered phase, the constant is very close to zero (a fit to the three points $L=18, 20, 22$ gives $|S_0^{(z)}| \leq 10^{-6}$).

The scalings of $S^{(z)}(L)$ are shown in Fig. 10. We again observe nice agreement with a linear scaling $S^{(z)}(L) = \alpha L + S_0^{(z)}$ both in the critical and massive cases. At the critical point ($\mu=1$), we find the subleading constant in the entropy to be

$$S_0^{(z)} = -0.4387 \pm 0.0001. \quad (67)$$

Figure 11 shows the constant part $S_0^{(z)}$ as a function of the coupling constant μ . Away from the critical point, the constant is stable at certain values: $S_0^{(z)}=0$ in the disordered phase ($\mu < 1$) and $S_0^{(z)} = -\log 2$ in the ferromagnetic phase ($\mu > 1$). Deviations from these values near the critical point are likely due to finite-size effects because they decay as we increase the system size. These values can be understood by considering two limits. In the limit $\mu=0$, the ground-state wave function is $|g\rangle = |\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle_z$ and the entropy $S^{(z)}$ is zero. In the limit $\mu \rightarrow \infty$, the wave function is

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle_x + |\downarrow\downarrow\ldots\downarrow\rangle_x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{L-1}}} \sum_{\sigma_1=\uparrow,\downarrow} \cdots \sum_{\sigma_L=\uparrow,\downarrow} |\sigma_1\rangle_z \otimes \cdots \otimes |\sigma_L\rangle_z, \end{aligned} \quad (68)$$

$\prod \sigma_j^z = +1$

where all the configurations have an even number of up spins in the σ^z basis. Therefore, the entropy is

$$S^{(z)}(L) = (L-1) \log 2. \quad (69)$$

As explained in Secs. III D and IV, we expect that quantum fluctuations around these limits produce only extensive contributions and keep the subleading constants stable.

It is useful to interpret these results in terms of the eight-vertex RK state. When the temperature of the eight-vertex model is set to infinity, the corresponding RK state is an equal-amplitude superposition of all the loop configurations.

This is the ground state of Kitaev's toric code model.⁵⁷ Using the method in Ref. 13, the half-cylinder entanglement entropy is shown to scale exactly as Eq. (69), and the constant part $S_0^{(z)} = -\log 2$ can be interpreted as the topological entropy^{9,10} associated with $\mathbb{Z}_2$ topological order. Microscopically, $-\log 2$ comes from the fact that in any configuration, the loops cross an *even* number of times with the boundary separating the two half-cylinders. The result in Fig. 11 therefore demonstrates the stability of this topological entropy for the half-cylinder geometry in the entire large-loop phase. The jump in the entropy around $\mu=1$ is interpreted as a breakdown of topological order. We comment that the stability of topological entropy has also been studied on the same wave function for the disk and annulus geometries in Refs. 15 and 16.

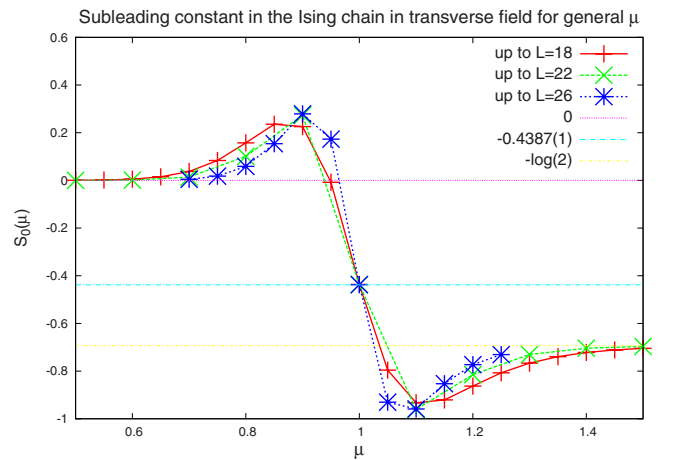


FIG. 11. (Color online) Subleading constant $S_0^{(z)}$ extracted from the entropy $S^{(z)}(L)$ in an Ising chain in a transverse field for different values of μ .

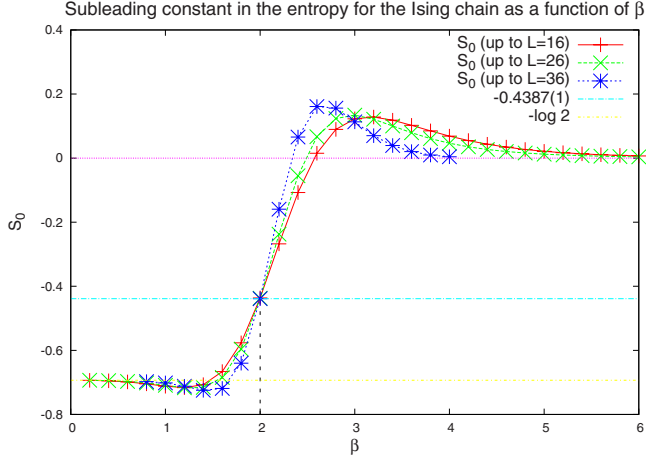


FIG. 12. (Color online) Subleading constant $S_0^{(z)}(\beta)$ extracted from the entropy $S^{(z)}(L; \beta)$ in an Ising chain in a transverse field at the critical point $\mu=1$. The inverse temperature β is introduced as explained in Sec. II D.

We move on to the entropy $S^{(x)}$ in the σ^x basis. It can be related to $S^{(z)}$ using the Kramers-Wannier duality transformation,⁵⁸

$$\sigma_j^z \rightarrow \tilde{\sigma}_{j-1}^x \tilde{\sigma}_j^x, \quad \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \rightarrow \tilde{\sigma}_j^z, \quad (70)$$

by which $\mathcal{H}(\mu)$ is related to $\mathcal{H}(1/\mu)$. Here, $\tilde{\sigma}_j^z = -1$ is identified with a domain wall between σ_j^x and σ_{j+1}^x . Taking into account the two-to-one correspondence between σ^x and $\tilde{\sigma}^z$ configurations, one can show

$$S^{(x)}(\mu) = S^{(z)}(1/\mu) + \log 2. \quad (71)$$

Hence we obtain the results summarized in Table I. Now we have a positive constant $S_0^{(x)} = \log 2$ in the ordered phase $\mu > 1$. This is a consequence of the macroscopic superposition of two ordered states, as discussed for the ordered phase of the XXZ chain in Sec. IV.

We have obtained two constants $S_0^{(z)} = -0.4387(1)$ and $S_0^{(x)} = S_0^{(z)} + \log 2 = 0.2544(1)$ at the critical point, depending on the choice of basis. We believe that these are generic

constants characterizing the $c=1/2$ criticality, although at present we do not have any analytical derivation of these numbers.

We can also introduce a temperature β^{-1} for the entropy $S^{(z)}$ as described in Sec. II D. The constant part $S_0^{(z)}(\beta)$ extracted by fitting $S^{(z)}(L; \beta)$ with a linear scaling changes rapidly around $\beta=2$ (see Fig. 12). It seems reasonable to conjecture that $S_0^{(z)}(\beta)$ becomes a step function in the thermodynamic limit: $S_0^{(z)}(\beta) = -\log 2$ for $\beta < 2$ and $S_0^{(z)}(\beta) = 0$ for $\beta > 2$. If confirmed, this result would suggest that increasing β has a role similar to decreasing μ , i.e., taking the system away from its critical point. In the $c=1$ case, $S_0(\beta)$ was a smooth function of β (see Figs. 6–8). Therefore, it looks like introducing β has a qualitatively different effect, depending on the nature of the critical theory.

Note that there are several directions in which to extend the Ising model. One possibility is to study the q -state Potts model or the restricted solid-on-solid (RSOS) models along the same lines. Another one is to view the Ising model as a special case ($n=1$) of the dilute $\mathcal{O}(n)$ loop model.⁵⁹ In the loop model case, the $p(\mu_i)$ are the probabilities that the equator of the sphere is run across by loops at positions μ_i . In that case, we would find a universal curve $S_0(n)$ extending Eq. (67).

VI. SCALING OF THE LARGEST PROBABILITY

In this section, we study the scaling of the largest probability

$$p_0 := \max_i p_i = |\langle i_0 | g \rangle|^2, \quad (72)$$

i.e., the weight of the most probable configuration i_0 in the 1D wave function $|g\rangle$. In terms of a 2D RK state, this corresponds to the largest eigenvalue of the reduced density matrix ρ_A of a half-cylinder. Very similarly to the entropy S , we find that $-\log p_0$ exhibits a linear scaling with L followed by a subleading universal constant

$$-\log p_0 = \tilde{\alpha}L + \gamma + o(1). \quad (73)$$

Below we evaluate γ in some critical systems.

TABLE I. Correspondence between the Ising chain in a transverse field and related 2D classical models and the results for the constant part of the entropies $S^{(z)}$ and $S^{(x)}$.

Ising chain in a transverse field [Eq. (63)]	Disordered phase $\mu < 1$	$c = \frac{1}{2}$ critical point $\mu = 1$	Ordered phase $\mu > 1$
Constant part of the entropy	$S_0^{(z)} = 0$ $S_0^{(x)} = 0$	$S_0^{(z)} = -0.4387(1)$ $S_0^{(x)} = S_0^{(z)} + \log 2 = 0.2544(1)$	$S_0^{(z)} = -\log 2$ $S_0^{(x)} = +\log 2$
Eight-vertex model [Eq. (66)]	Small-loop phase (low temperature)		Large-loop phase (high temperature)
2D Ising model [Eq. (64)]	Disordered phase (high temperature)		Ordered phase (low temperature)

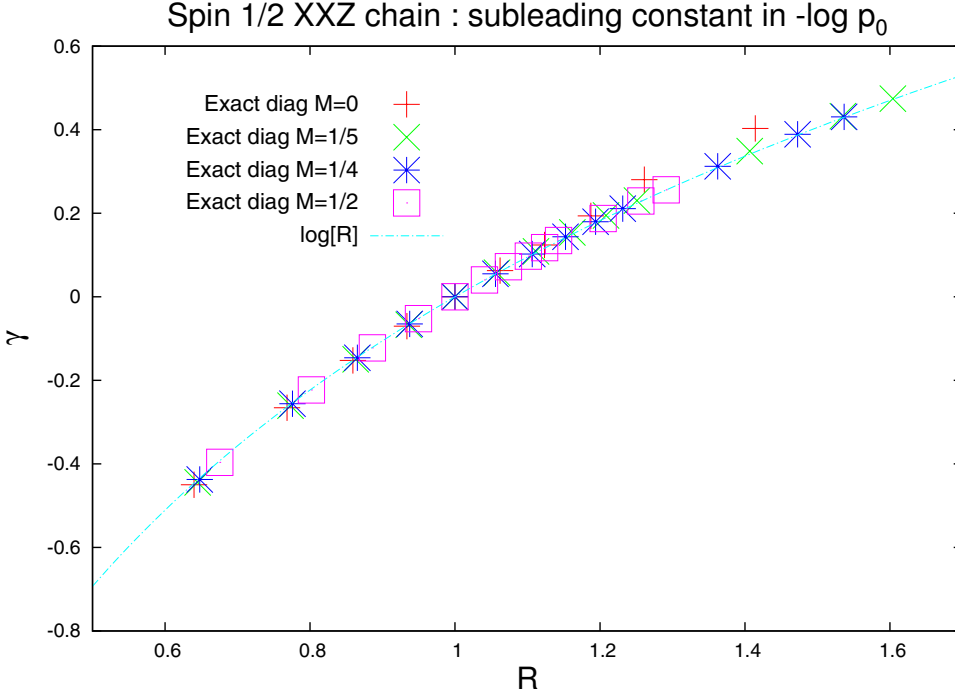


FIG. 13. (Color online) The subleading constant γ in the scaling of $-\log p_0$ [see Eq. (73)] extracted from the critical ground state of the XXZ chain in a magnetic field. The same setting as Fig. 8 is taken.

A. $c=1$ critical systems

We first consider the XXZ chain in a magnetic field [Eq. (59)] in the critical phase. We find that the largest probability $p_0 = |\langle i_0 | g \rangle|^2$ is attained by crystal states. For example, $|i_0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ and $|\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ for $M=0$ and $|i_0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$, etc., for $M=1/2$, independent of $\Delta(>-1)$. The constant γ is extracted by fitting finite-size data with Eq. (73). As shown in Fig. 13, we observe a simple relation

$$\gamma = \log R. \quad (74)$$

The same result can be shown exactly for the largest probability $p_0(\beta) := \max p_i(\beta)$ in the Dyson-Gaudin gas when β

$= 2R^2 = 2\lambda$ with $\lambda \in \mathbb{N}$ and $\lambda < \frac{L}{n-1}$ (see Appendix D). For general β , Eq. (74) can be numerically demonstrated as shown in Fig. 14.

In order to understand the connection between S and $-\log p_0$, it is useful to introduce the Rényi entropy,

$$S^{(N)} := \frac{-1}{N-1} \log \left(\sum_i p_i^N \right), \quad (75)$$

where N is a real number. Then, S and $-\log p_0$ correspond to the limits $N \rightarrow 1$ and ∞ , respectively. Now we assume that the probability distribution is given by the Boltzmann weights $p_i(\beta) = p_i^{\beta/2} / Z(\beta)$ of the Dyson-Gaudin gas in the critical

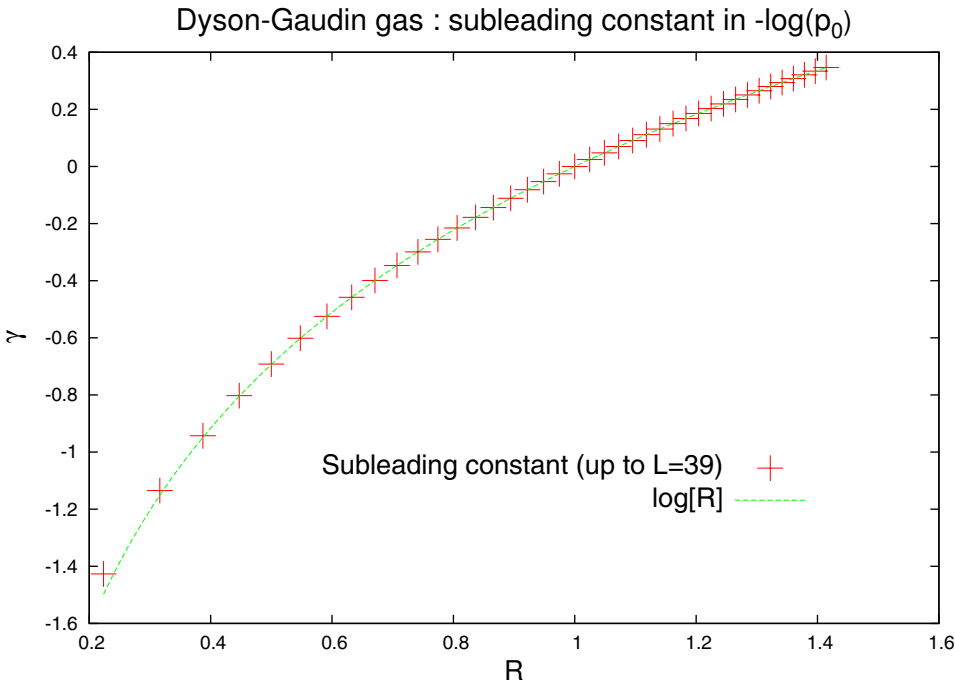


FIG. 14. (Color online) The subleading constant γ in the scaling of $-\log p_0(\beta)$, where $p_0(\beta)$ is the largest probability in the Dyson-Gaudin gas with density $\rho = 1/3$. The data are consistent with Eq. (74). For some special values of R (see the text and Appendix D), Gaudin's formula (33) can be used to show Eq. (74) exactly.

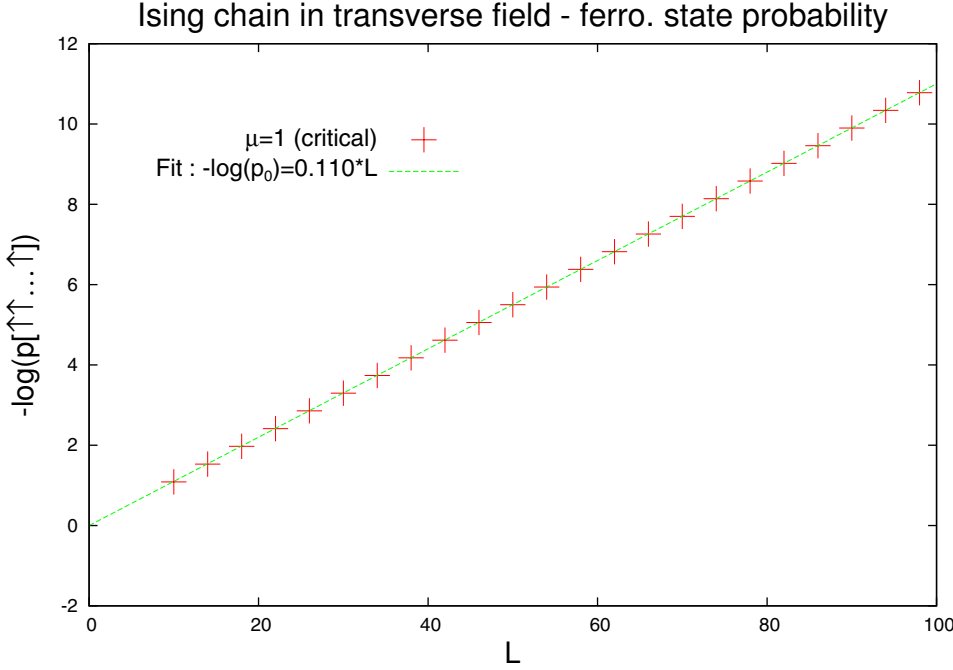


FIG. 15. (Color online) Scaling of $-\log p_0^{(z)}$ in the Ising model in a transverse field at the critical point, calculated in the σ^z basis. The subleading constant $\gamma^{(z)}$ is very close to zero: a fit to the last three points $L=96, 98, 100$ gives $|\gamma| \leq 10^{-6}$.

phase $R = \sqrt{\beta/2} \leq d$. The Rényi entropy [Eq. (75)] can then be expressed as

$$S^{(N)}(\beta) = \frac{-1}{N-1} \log \frac{Z(N\beta)}{[Z(\beta)]^N}. \quad (76)$$

Recalling Eq. (55) for the nonextensive part C of $Z(\beta)$, the subleading constant contribution to $S^{(N)}$ is given by

$$\begin{aligned} \log R - \frac{1}{2(N-1)} \log N, \quad \sqrt{NR} < R_c = d, \\ \frac{N}{N-1} \log R - \frac{1}{N-1} \log d, \quad \sqrt{NR} > R_c = d. \end{aligned} \quad (77)$$

Both expressions give $\gamma = \log R$ in the limit $N \rightarrow \infty$. On the other hand, the former expression is consistent with $S_0 = \log R - 1/2$ in the limit $N \rightarrow 1$.

An alternative strategy to derive Eq. (74) is to adopt the 2D viewpoint of Sec. II, where the probability p_0 was related to classical partition functions,

$$-\log p_0 = -\log \frac{\mathcal{Z}_{i_0}^A \mathcal{Z}_{i_0}^B}{\mathcal{Z}}. \quad (78)$$

Here, $\mathcal{Z}_{i_0}^A$ and $\mathcal{Z}_{i_0}^B$ are partition functions on A and B with spins fixed in a state i_0 at their common boundary. Now we move on to the continuum limit described by the action [Eq. (3)]. Recalling that i_0 is given by a crystal state, the above boundary condition corresponds to locking the field ϕ at a certain constant at the boundary (Dirichlet boundary condition).⁶⁰ Hence, we obtain

$$-\log p_0 = -\log \frac{\mathcal{Z}_D^A \mathcal{Z}_D^B}{\mathcal{Z}}, \quad (79)$$

where D stands for Dirichlet. This expression has been evaluated by Hsu *et al.*²⁴ and by Campos Venuti *et al.*³¹ using boundary CFT. Their results for the nonextensive part are consistent with Eq. (74).⁶¹

In fact, Hsu *et al.*²⁴ proposed the right-hand side of Eq. (79) as the expression of the entanglement entropy S^{vN} of a half-cylinder. Their argument was based on a replica trick; the N th moment $\mathcal{M}^{(N)} := \text{Tr } \rho_A^N = \sum_i p_i^N$ of the reduced density matrix was evaluated for integer $N \geq 2$ and then an analytic continuation $N \rightarrow 1$ was taken. According to their evaluation, the Rényi entropy $S^{(N)} = \frac{-1}{N-1} \log \mathcal{M}^{(N)}$ is expressed by the rhs of Eq. (79) for any integer $N \geq 2$, leading to an N -independent subleading constant $\log R$. On the other hand, we have obtained N -dependent constant [Eq. (77)]. The two results for the subleading constant agree only in the limit $N \rightarrow \infty$. We infer that this discrepancy comes from a difficulty in specifying boundary conditions in the argument of Hsu *et al.*²⁴ In their argument, they took linear combinations of plural compactified fields, which could make the compactification conditions ambiguous. A more careful treatment of the compactification conditions and a derivation of Eq. (77) in boundary CFT are left as important open issues.

B. $c=1/2$ critical system and beyond

We next consider the Ising chain in a transverse field [Eq. (63)] at the $c=1/2$ critical point $\mu=1$. Figure 15 shows the scaling of $-\log p_0^{(z)}$ in the σ^z basis. Here, the largest probability is attained by the ferromagnetic configuration $|i_0\rangle = |\uparrow \uparrow \uparrow \dots\rangle_z$. In this case we have the following exact formula (see Appendix E 3):

$$p_0^{(z)} = \prod_{j=1}^{L/2} \cos^2\left(\frac{(2j-1)\pi}{4L}\right). \quad (80)$$

An Euler-Maclaurin expansion shows that the subleading constant is $\gamma^{(z)}=0$. The data in Figure 15 are consistent with this result and give $\gamma^{(z)} < 10^{-6}$. It can also be shown that $\gamma^{(z)}$ remains zero away from the critical point. Moving to the σ^x basis using the same argument leading to Eq. (71), we obtain $\gamma^{(x)} = \log 2$.

In a 2D viewpoint, p_0 is related to a ratio of partition functions, as shown in Eq. (78). Since the boundary configurations, a_h and b_h , at the upper and lower edges of the cylinder were arbitrary, we can glue these edges by identifying a_h and b_h and integrating them out. Algebraically, we consider

$$p_0 = \frac{\langle i_0 | \mathcal{T}^{2h} | i_0 \rangle}{\text{Tr } \mathcal{T}^{2h}} = \frac{\mathcal{Z}_{i_0 i_0}(L, 2h)}{\mathcal{Z}_P(L, 2h)} \quad (h \rightarrow \infty). \quad (81)$$

Here, the numerator $\mathcal{Z}_{i_0 i_0}$ is the partition function of a long cylinder with boundary configurations fixed in the same state i_0 at both edges. The denominator $\mathcal{Z}_P$ is the partition function of a torus.

A similar quantity has been considered in a rational CFT context. Therein, the fixed boundary conditions imposed in the numerator of Eq. (81) are replaced by conformally invariant ones a . The associated probability p_a can be evaluated as explained in Ref. 62. In the notations in Ref. 62, the result is

$$p_a = \frac{(\psi_a^1)^2}{S_1^1}, \quad (82)$$

where ψ_a^i are certain structure constants, characteristic of the model, and S_1^1 is the identity matrix element of the S matrix implementing the modular transformation. In the simplest case of an A_m $SU(2)_k$ model, the boundary fields correspond to the vertices of the A_m Dynkin diagram. Let $\{d_a\}$ be the Perron-Frobenius eigenvector of the A_m incidence matrix, normalized so that $d_1=1$. Then, each d_a is the so-called quantum dimension of the state a , and $d = \sqrt{\sum_a d_a^2}$ is called the total quantum dimension. In this case, $\psi_a = d_a/d$ and $S_1^1 = 1/d$, hence

$$p_a = \frac{d_a^2}{d}. \quad (83)$$

We study the case where the Dynkin diagram is A_3 and the possible states are $+$, free, $-$ with quantum dimensions 1, $\sqrt{2}$, 1, respectively. The probabilities are, in the σ^x basis,

$$p_+ = p_- = \frac{1}{2}, \quad p_{\text{free}} = 1. \quad (84)$$

A_3 also describes the Ising model and this enables us to confirm the numerical results at the beginning of this section. The ferromagnetic state in the σ^z basis, $|\uparrow\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle_z$, may be regarded as a paramagnetic state in the σ^x basis or the “free” state in CFT. Equation (84) then gives

$$\gamma^{(z)} = -\log p_{\text{free}} = 0, \quad (85)$$

in agreement with our numerical result. The largest probability p_0 in the σ^x basis may be regarded as the probability of the “+” state in CFT, hence

$$\gamma^{(x)} = -\log p_+ = \log 2, \quad (86)$$

in agreement with our calculation.

These results can be extended to A_m RSOS models with central charge $c < 1$. p_0 is in this case with highest probability is in this case

$$p_0 = 2 \sqrt{\frac{2}{m(m+1)}} \sin\left(\frac{\pi}{m+1}\right) \sin\left(\frac{\pi}{m}\right). \quad (87)$$

VII. SUMMARY AND CONCLUSIONS

The starting point of this study was to introduce the Shannon entropy of a 1D ground-state wave function, which measures quantum fluctuations occurring in a given basis.

Like other entanglement measures, we have seen that the scaling behavior of this entropy is essentially controlled by the long-distance correlations. Using a transfer matrix approach, we showed that this entropy can also be interpreted as the entanglement entropy of a half-cylinder for a suitably chosen 2D RK state. This correspondence allowed us to study the entanglement entropy of 2D wave functions using simpler 1D systems, without the need to trace explicitly over the degrees of freedom sitting outside of the subsystem (a formidable task in two dimensions).

To unveil the generic scaling properties of the Shannon entropy of 1D states (equal to the entanglement entropy of 2D states), we have studied several 1D quantum systems: (i) a discretized version of the Dyson gas/Calogero-Sutherland ground-state wave function (relevant to 2D dimer RK states) in Sec. III, (ii) the spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain (relevant to six-vertex RK states) in Sec. IV, and (iii) the Ising chain in transverse field (relevant to 2D Ising RK states and 2D eight-vertex RK states) in Sec. V.

In both critical and massive systems, we found that this entropy is composed of an extensive part and a subleading constant S_0 . There is no logarithmic contribution as anticipated before for half-cylinder geometry.^{23,24} For Tomonaga-Luttinger liquids [cases (i) and (ii) above], described by a compactified boson with radius R , we showed numerically and analytically that $S_0 = \log R - \frac{1}{2}$ (a result which differs from the recent prediction by Hsu *et al.*²⁴). Going back to the 2D entanglement entropy interpretation of this result, it implies that the usual RK states for dimers on the hexagonal or square lattice (with $R=1$) have $S_0 = -\frac{1}{2}$. At present, we do not have a derivation for the value $S_0^{(z)} = -0.4387$ (or $S_0^{(x)} = -0.4387 + \log 2$ depending on the choice of the basis) found numerically for the Ising chain in transverse field at its $c = 1/2$ critical point.

We introduced a temperature β^{-1} to extend the Shannon and entanglement entropies in Sec. II D. This has different consequences depending on the nature of the criticality. For TLLs, changing β gives a natural way to tune the boson

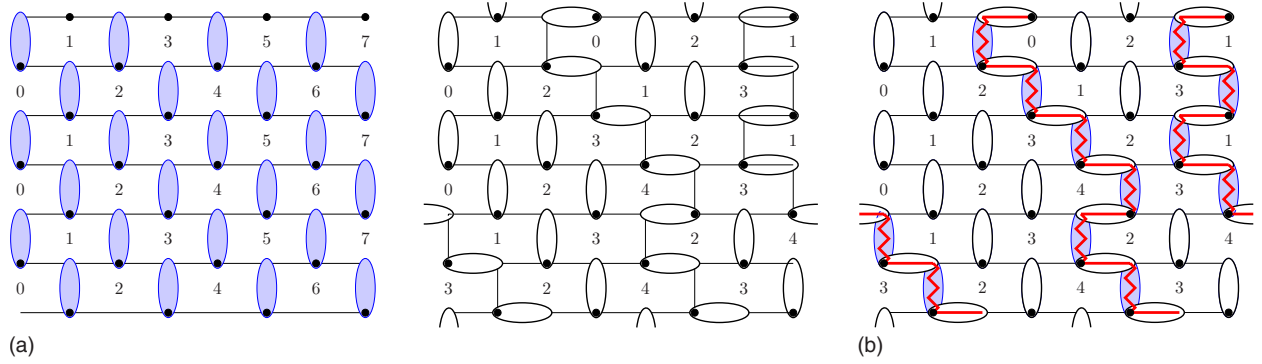


FIG. 16. (Color online) (a) left: reference configuration. (a) right: real configuration. (b): transition graph. Reference dimers are in blue. The fermions are living on the vertical edges of the lattice and are symbolized by red zigzag lines. The integers attached to each plaquette of the lattice form a height configuration associated to the dimer covering. When coarse grained, these microscopic heights become the free field which describe the long-distance properties of the system (Refs. 63 and 64). The heights can be constructed by fixing $h=0$ at some origin and then moving from plaquette to plaquette by turning clockwise around the sites of the even sublattice (marked with a black dot). The rule is the following: the height picks a contribution equal to $+2$ when crossing a dimer and -1 otherwise. Since there is exactly one dimer touching each site, the height difference between two points does not depend on the chosen path on a simply connected domain. With periodic boundary conditions, the height is not single valued. For example, when winding horizontally around the system, the height picks a contribution W_x (also called winding number) equal to twice the number of vertical dimers crossed minus the number of empty bonds. Inserting a fermionic world line going upward shifts the height by -3 by going from the left to the right and thus changes $W_x \rightarrow W_x - 3$. It is simple to check that the configurations with a fermion density equal to $\frac{2}{3}$ have $W_x=0$ and an average “slope” equal to zero.

radius R while retaining the $c=1$ criticality. This allowed us to “deform” a dimer RK problem (or a free fermion problem) and to derive the R dependence of the entropy constant S_0 in Sec. III. When β reaches a critical value, the system undergoes a phase transition to a crystal state, where the entropy constant takes a stable value $S_0 = \log d$, with d being the degeneracy of the ground states. Hence, this transition can be detected through S_0 . In contrast, in the critical Ising chain with $c=1/2$, the entropy constant S_0 shows an abrupt change around $\beta=2$. More generally, the β dependence might offer a valuable fingerprint for clarifying the nature of the undeformed case $\beta=2$.

We also considered the scaling properties of p_0 , the probability of the most likely configuration in a critical 1D state (Sec. VI). This quantity, which corresponds to the largest eigenvalue of the reduced density matrix in the 2D point of view, also contains a universal constant contribution γ in critical states. We found numerically and analytically that $\gamma = \log R$ for TLL states and $\gamma^{(z)}=0$ and $\gamma^{(x)}=\log 2$ for the critical Ising chain. These are related to the probabilities associated with conformally invariant boundary conditions.

The universal R dependence of S_0 and γ found in the present work can be used as a new simple way to determine the boson radius R in a TLL through a ground-state structure. Similar universal R dependence was also found in the mutual information (double-interval entanglement entropy) studied in Refs. 7 and 8. Notice that the mutual information is invariant under the transformation $R \rightarrow 2/R$ while the present quantities are not. This difference is related to the origins of the R dependence: it comes from certain boundary effects in the present case, while it comes from the special topologies of the Riemann surfaces in the case of the mutual information.^{7,8}

In fact, the transfer matrix approach gives access to *all* the eigenvalues $\{p_i\}$ of reduced density matrix ρ_A of a half-

cylinder. (As a first application, the gap p_1/p_0 is computed in Appendix D for dimers on the hexagonal lattice). The present approach therefore provides a convenient tool to study the properties of the “entanglement spectrum”³⁹ in a 2D quantum state.

ACKNOWLEDGMENTS

We wish to thank Jérôme Dubail, Michel Gaudin, Benjamin Hsu, Bernard Nienhuis, Stéphane Nonenmacher, and Keisuke Totsuka for fruitful discussions.

APPENDIX A: FREE FERMIONS AND WICK’S THEOREM

The probabilities of Eq. (26) involve quantities such as $\langle 0 | a_1 a_2 \dots a_{2n} | 0 \rangle$, where the a_j are linear combinations of fermion creation and annihilation operators. Wick’s theorem then gives

$$\langle 0 | a_1 \dots a_{2n} | 0 \rangle = \langle a_1 \dots a_{2n} \rangle = \sum_{\substack{i_1 < \dots < i_n \\ \forall k, i_k < j_k}} \epsilon(\sigma) \times \langle a_{i_1} a_{j_1} \rangle \dots \langle a_{i_n} a_{j_n} \rangle = \text{Pf } A, \quad (\text{A1})$$

where $\epsilon(\sigma)$ is the signature of the permutation which transforms $\{1, 2, \dots, 2n\}$ into $\{i_1, j_1, i_2, j_2, \dots, i_n, j_n\}$. Pf denotes the Pfaffian. A is an antisymmetric $2n \times 2n$ matrix given by

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \langle a_1 a_2 \rangle & \dots & \langle a_1 a_{2n} \rangle \\ -\langle a_1 a_2 \rangle & 0 & \dots & \langle a_2 a_{2n} \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\langle a_1 a_{2n} \rangle & -\langle a_2 a_{2n} \rangle & \dots & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A2})$$

The two following properties of Pfaffians are useful,

$$(\text{Pf } A)^2 = \det A, \quad (\text{A3})$$

$$\text{Pf} \begin{bmatrix} 0 & B \\ -B^T & 0 \end{bmatrix} = \pm \det B, \quad (\text{A4})$$

and allow fast numerical calculations using determinant routines.

APPENDIX B: TRANSFER MATRIX FOR THE CLASSICAL DIMER MODEL ON THE HEXAGONAL LATTICE

1. Transfer matrix as free fermions

Here we consider a hexagonal lattice with periodic boundary conditions and an even number of columns L . The mapping onto free fermions is as follows (see Fig. 16):

We choose a convenient dimer configuration which we call a reference configuration. Any other dimer configuration (real configuration) will be compared to the reference by superposition of the two. We define the particle locations as the vertical edges that are not occupied by a “real” dimer (only a reference one). Particles can jump from a vertical edge to another only if a real horizontal dimer connects the two. This mapping has several interesting properties:

(i) The dimer configuration is totally determined by the trajectories of the particles.

(ii) Two particles cannot go to the same edge. Therefore, they obey a fermionic exclusion rule. This encodes the dimer hardcore constraint.

(iii) The number of fermions is conserved, so that the TM is block diagonal, each block corresponding to a fixed number of fermions. It should be remarked that this property would not hold on nonbipartite lattices (such as the triangular).

2. Fermionic representation and periodic boundary conditions

A state of a row is determined by the number n of fermions and their positions $0 \leq \alpha_1 < \dots < \alpha_n \leq L-1$. We can choose to represent such a state using second-quantized fermion creation operators,

$$|i\rangle = |\alpha_1 \dots \alpha_n\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger \dots c_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle. \quad (\text{B1})$$

As we want to use the translational invariance, we have to set

$$|\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}, L\rangle = |0, \alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}\rangle. \quad (\text{B2})$$

Therefore, to keep the order of Eq. (B1),

$$c_L^\dagger = (-1)^{\hat{n}-1} c_0^\dagger, \quad \hat{n} = \sum_{j=0}^{L-1} c_j^\dagger c_j. \quad (\text{B3})$$

In the following, we will also need the L fermion operators in Fourier space,

$$c_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{L-1} e^{-ikj} c_j^\dagger. \quad (\text{B4})$$

They satisfy $\{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}$, provided $e^{ikL} = (-1)^{\hat{n}-1}$. The set of wave vectors is given by

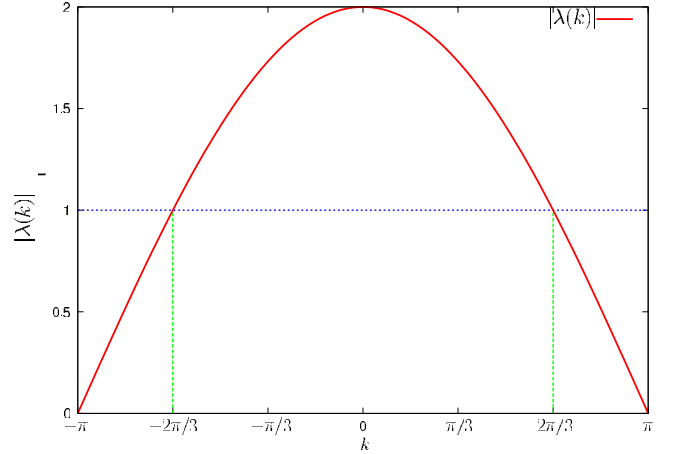


FIG. 17. (Color online) One-particle eigenvalue as a function of k .

$$k \in \left\{ -\pi + \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi l}{L} \mid l=0, \dots, L-1 \right\}, \quad \hat{n} \text{ even},$$

$$k \in \left\{ -\pi + \frac{2\pi l}{L} \mid l=0, \dots, L-1 \right\}, \quad \hat{n} \text{ odd}.$$

3. Diagonalization of the transfer matrix

Each fermion can go to the left or to the right with equal amplitude. We number vertical edges in such a way that a fermion located on j can go to j or $j+1$. $\mathcal{T}$ satisfies

$$\mathcal{T}|0\rangle = |0\rangle, \quad (\text{B5})$$

$$\mathcal{T} c_j^\dagger \mathcal{T}^{-1} = c_j^\dagger + c_{j+1}^\dagger. \quad (\text{B6})$$

So that

$$\mathcal{T} c_k^\dagger \mathcal{T}^{-1} = \lambda(k) c_k^\dagger, \quad \lambda(k) = 1 + e^{ik}, \quad (\text{B7})$$

$c_k^\dagger |0\rangle$ is then eigenvector of $\mathcal{T}$ with eigenvalue $\lambda(k)$. In a similar manner,

$$\mathcal{T} c_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger \dots c_{k_n}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = \lambda(k_1) \dots \lambda(k_n) c_{k_1}^\dagger \dots c_{k_n}^\dagger. \quad (\text{B8})$$

Provided all the wave vectors are different, $c_{k_1}^\dagger \dots c_{k_n}^\dagger |0\rangle$ is an eigenvector with eigenvalue $\lambda(k_1) \dots \lambda(k_n)$. The transfer matrix can also be expressed explicitly,

$$\mathcal{T} = \prod_k (1 + e^{ik} c_k^\dagger c_k). \quad (\text{B9})$$

4. Largest eigenvalue and dominant eigenvector

Since $|\lambda(k)| \geq 1$ for every $k \in [-2\pi/3, 2\pi/3]$ (see Fig. 17), the eigenvalue with largest modulus in a given sector with n fermions is obtained by a product over the n nearest to 0 wave vectors. Let us denote this eigenvalue by Λ_n . Then, $\Lambda_{\max} = \max\{|\Lambda_n|, 1 \leq n \leq L\}$. The eigenvalue with largest modulus is real and has approximately all allowed k lying in the interval $[-2\pi/3, 2\pi/3]$. The dominant sector has there-

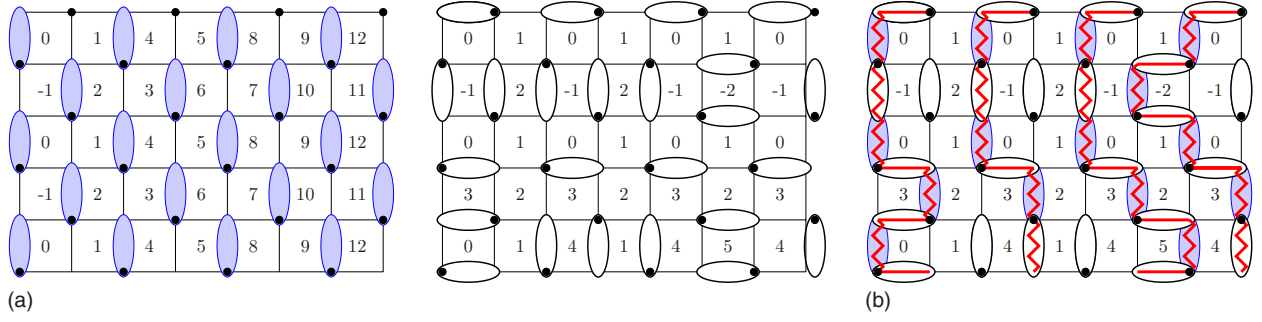


FIG. 18. (Color online) Upper left: reference configuration. Upper right: chosen configuration. Below: the fermions are living on the vertical edges of the lattice and are symbolized by red zigzag lines. Edges are numbered from 0 to $L-1$. The integers attached to each plaquette form a height configuration associated to the dimer covering. The rule is very similar to that of the honeycomb lattice: turning clockwise around the sites of the even sublattice (marked with black dots), the height picks a contribution equal to $+3$ when crossing a dimer and -1 otherwise. $h=0$ is fixed at some origin. For a more detailed presentation, see Ref. 65.

fore $n \approx 2L/3$ fermions. It is easy to understand the fact that the “dominant” fermion density is $2/3$: it corresponds to flat height configurations (see Fig. 16).

If we denote by Ω the set of wave vectors that gives the largest eigenvalue then the dominant eigenvector is

$$|g\rangle = \left(\prod_{k \in \Omega} c_k^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{B10})$$

Let us show what is Ω in the simple case where $L=6p$. We have to distinguish between the even and odd sectors,

$$\Lambda_{\max}^{(e)} = \max\{\Lambda_{2n'}\} = \prod_{l=p}^{5p-1} \lambda\left(-\pi + \pi \frac{2l+1}{6p}\right),$$

$$\Lambda_{\max}^{(o)} = \max\{\Lambda_{2n'+1}\} = \prod_{l=p}^{5p} \lambda\left(-\pi + \frac{\pi l}{3p}\right). \quad (\text{B11})$$

Here, $\Lambda_{\max}^{(e)} > \Lambda_{\max}^{(o)}$ because Euler-Maclaurin expansion gives $\log \Lambda_{\max}^{(e)} - \log \Lambda_{\max}^{(o)} = \frac{\pi\sqrt{3}}{24p} + o(1/p)$. Therefore the leading eigenvalue corresponds to $4p = \frac{2}{3}L$ fermions and

$$\Omega = \left\{ -\pi + \pi \frac{2l+1}{6p} \mid p \leq l \leq 5p-1 \right\}. \quad (\text{B12})$$

5. Probability of a given configuration

The dominant eigenvector has $n=2L/3$ fermions. A configuration i is represented by

$$|i\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger \dots c_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle \quad (\text{B13})$$

and will have a probability [we use Eqs. (A1) and (A4)]

$$p_i = |\langle 0 | c_{\alpha_n} \dots c_{\alpha_1}^\dagger c_{k_1}^\dagger \dots c_{k_n}^\dagger | 0 \rangle|^2 \quad (\text{B14})$$

$$= \left(\frac{1}{L} \right)^n |\det(e^{-i\alpha_j k_{j'}})_{jj'}|^2. \quad (\text{B15})$$

We get a Vandermonde determinant and p_i simplifies into Eq. (30).

APPENDIX C: TRANSFER MATRIX FOR THE CLASSICAL DIMER MODEL ON THE SQUARE LATTICE

1. Free fermions

We consider a square lattice with periodic boundary conditions and an even number of columns L . The mapping is similar to that of the hexagonal lattice. The reference configuration is shown in Fig. 18. Here, a fermion will be defined as an even vertical edge occupied only by a reference dimer or an odd vertical edge occupied only by a real dimer. It can go to the left, straight ahead, or to the right. We introduce a shift in the numbering, so that a fermion located on site j can go to j , $j+1$, or $j+2$.

2. Diagonalization of the transfer matrix

As for the honeycomb case, $\mathcal{T}$ is block diagonal and invariant by translation. It also satisfies

$$\mathcal{T}|0\rangle = |0\rangle, \quad (\text{C1})$$

$$\mathcal{T}c_{2j}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = c_{2j+2}^\dagger + c_{2j+1}^\dagger + c_{2j}^\dagger, \quad (\text{C2})$$

$$\mathcal{T}c_{2j+1}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = c_{2j+2}^\dagger. \quad (\text{C3})$$

As usual we also define Fourier-space fermions,

$$c_{0k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L/2}} \sum_j e^{-ik2j} c_{2j}^\dagger, \quad (\text{C4})$$

$$c_{1k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L/2}} \sum_j e^{-ik(2j+1)} c_{2j+1}^\dagger, \quad (\text{C5})$$

with

$$k \in \left\{ -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi l}{L} \mid l=0, \dots, \frac{L}{2}-1 \right\}, \quad \hat{n} \text{ even},$$

$$k \in \left\{ -\frac{\pi}{2} + \frac{2\pi l}{L} \mid l=0, \dots, \frac{L}{2}-1 \right\}, \quad \hat{n} \text{ odd}.$$

The transfer matrix acts on them in the following way:

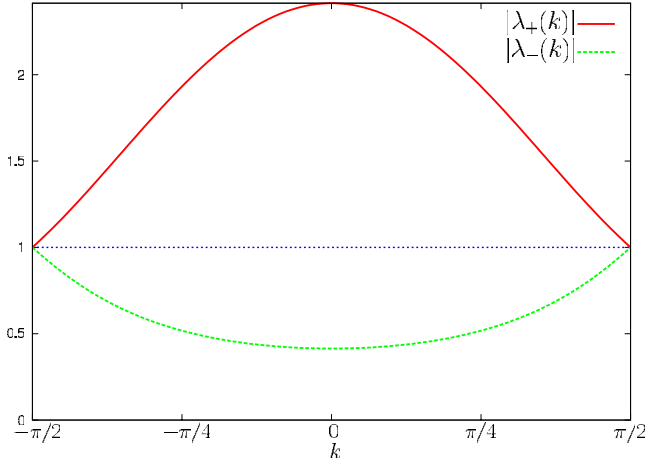


FIG. 19. (Color online) One-particle eigenvalues λ_+ and λ_- as a function of k .

$$\mathcal{T}c_{0k}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = (1 + e^{2ik})c_{0k}^\dagger + e^{ik}c_{1k}^\dagger, \quad (\text{C6})$$

$$\mathcal{T}c_{1k}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = e^{ik}c_{0k}^\dagger. \quad (\text{C7})$$

To diagonalize $\mathcal{T}$, it is therefore sufficient to diagonalize a 2×2 matrix,

$$M = \begin{pmatrix} 1 + e^{2ik} & e^{ik} \\ e^{ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{C8})$$

If one sets

$$\tan \theta_k = \sqrt{1 + \cos^2 k} - \cos k, \quad (\text{C9})$$

$$\lambda_\pm(k) = e^{ik}(\cos k \pm \sqrt{1 + \cos^2 k}), \quad (\text{C10})$$

$$b_{+k}^\dagger = \cos \theta_k c_{0k}^\dagger + \sin \theta_k c_{1k}^\dagger, \quad (\text{C11})$$

$$b_{-k}^\dagger = -\sin \theta_k c_{0k}^\dagger + \cos \theta_k c_{1k}^\dagger, \quad (\text{C12})$$

then

$$\mathcal{T}b_{+k}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = \lambda_+(k)b_{+k}^\dagger, \quad (\text{C13})$$

$$\mathcal{T}b_{-k}^\dagger \mathcal{T}^{-1} = \lambda_-(k)b_{-k}^\dagger, \quad (\text{C14})$$

which gives us all the eigenvalues and eigenvectors of $\mathcal{T}$. It is also possible to express explicitly $\mathcal{T}$,

$$\mathcal{T} = \prod_k \{1 + [\lambda_+(k) - 1]b_{+k}^\dagger b_{+k}\} \{1 + [\lambda_-(k) - 1]b_{-k}^\dagger b_{-k}\}.$$

3. Largest eigenvalue and dominant eigenvector

We assume for simplicity that L is a multiple of 4. Noticing (see Fig. 19) that $\forall k, |\lambda_+(k)| \geq 1$ and also $|\lambda_-(k)| \leq 1$, we can deduce that only the $\lambda_+(k)$ will contribute to the largest eigenvalue. In Ref. 65 it is shown that

$$\lambda_{\max} = \prod_{k \in \Omega} \lambda_+(k), \quad (\text{C15})$$

where $\Omega = \{-\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi}{L}l \mid l=0 \cdots L/2-1\}$. The leading sector has an even number of fermions $L/2$ and the dominant eigenvector will be given by

$$|g\rangle = \left(\prod_{k \in \Omega} b_{+,k}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{C16})$$

4. Probability of a given configuration

The dominant eigenvector has $n=L/2$ fermions. A configuration i is represented by

$$|i\rangle = c_{\alpha_1}^\dagger \cdots c_{\alpha_n}^\dagger |0\rangle \quad (\text{C17})$$

and will have a probability [using Eq. (A1) and also Eq. (A4)]

$$p_i = |\langle 0 | c_{\alpha_n} \cdots c_{\alpha_1} b_{+,k_1}^\dagger \cdots b_{+,k_n}^\dagger | 0 \rangle|^2 \quad (\text{C18})$$

$$= \left(\frac{2}{L} \right)^n |\det m_{jj'}|^2, \quad (\text{C19})$$

where

$$m_{jj'} = \begin{cases} \cos \theta_{k_j} e^{i\alpha_j k_{j'}}, & \alpha_j \text{ even} \\ \sin \theta_{k_j} e^{i\alpha_j k_{j'}}, & \alpha_j \text{ odd.} \end{cases} \quad (\text{C20})$$

This determinant is slightly more complicated than on the honeycomb lattice and cannot be further simplified.

APPENDIX D: 2D COULOMB GAS ON A CIRCLE

We consider a Gaudin model with n charges dispatched on a circle with L sites.

1. Scaling of the ground state

We study the special case where $L/n \in \mathbb{N}$ and we set $\rho = n/L$. We denote by $p_0(\beta)$ the probability associated with the ground-state configuration. It corresponds to the case where the distance between each charges is maximal. Therefore it is obtained when all charges lie on the edges of a polygon. Hence,

$$p_0(\beta) = \frac{1}{Z_n^{(L)}(\beta)} L^{-n\beta/2} \prod_{1 \leq k < l \leq n} |e^{2il\pi/n} - e^{2ik\pi/n}|^\beta.$$

Using the formula $\prod_{l=1}^{n-1} (1 - e^{2il\pi/n}) = n$, we get

$$p_0(\beta) = \frac{\rho^{n\beta/2}}{Z_n^{(N)}(\beta)}. \quad (\text{D1})$$

In the special case where β is an even integer and $\beta < \frac{2L}{n-1}$, it is possible to use Eq. (33) and the subleading term of $-\log p_0(\beta)$ can easily be found,

$$-\log p_0(\beta) = an + \frac{1}{2} \log \frac{\beta}{2}. \quad (\text{D2})$$

This result for the universal part of the probability, $\gamma = \frac{1}{2} \log \frac{\beta}{2} = \log R$, does not depend on L nor n (no finite-size effects).

2. Existence of a gap in the thermodynamical limit

The first excitation is obtained from the ground-state configuration by moving one particle to the next site while keeping all the others in place. The associated probability $p_1(\beta)$ will be given by

$$\frac{p_1(\beta)}{p_0(\beta)} = \left[\prod_{l=1}^{n-1} \frac{\sin\left(\frac{l\pi}{n} - \frac{\rho l\pi}{n}\right)}{\sin\left(\frac{l\pi}{n}\right)} \right]^\beta. \quad (\text{D3})$$

In the limit $n \rightarrow +\infty$ it is possible to expand the sin,

$$\frac{p_1(\beta)}{p_0(\beta)} = \left[\prod_{l=1}^{n-1} \left(1 - \frac{\rho\pi}{n} \cot(l\pi/n) \right) \right]^\beta. \quad (\text{D4})$$

We then consider $P_n(x) = \prod_{l=1}^{n-1} [1 - x \cot(l\pi/n)]$. The trick to calculate $P_n(x)$ is to introduce another polynomial $Q_n(x)$ which satisfies

$$Q_n(\tan t) = \frac{\sin nt}{(\sin t) \cos^{n-1} t}. \quad (\text{D5})$$

$Q_n(x)$ and $P_n(x)$ are of the same degree and share the same zeros: they have to be proportional. $P_n(0)=1$ and $Q_n(0)=n$ yield $P_n(x) = \frac{1}{n} Q_n(x)$. Using Eq. (D5) and Moivre's formula, we get

$$P_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{[(n-1)/2]} (-1)^k C_n^{2k+1} x^{2k}. \quad (\text{D6})$$

Therefore $P_n(\frac{\pi\rho}{n})$ reduces in the limit $n \rightarrow \infty$ to

$$P_n\left(\frac{\pi\rho}{n}\right) = \frac{1}{\pi\rho} \sin(\pi\rho). \quad (\text{D7})$$

Finally,

$$\frac{p_1(\beta)}{p_0(\beta)} = \left[\frac{1}{\pi\rho} \sin(\pi\rho) \right]^\beta. \quad (\text{D8})$$

So that there is a finite gap in the thermodynamical limit,

$$\Delta E = E_1 - E_0 = -\log \left[\frac{1}{\pi\rho} \sin(\pi\rho) \right]. \quad (\text{D9})$$

This calculation can easily be extended (in the thermodynamical limit) to any configuration deduced from the ground state by moving a finite number of particle. For the corresponding RK wave function, ΔE gives an information about the first gap of the reduced density matrix (entanglement spectrum).

APPENDIX E: GROUND STATE OF THE ISING CHAIN IN A TRANSVERSE FIELD

1. Diagonalization

We consider the Hamiltonian of an Ising chain in a transverse field with an *even* number of sites L ,

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^z. \quad (\text{E1})$$

Using a Jordan-Wigner transformation,

$$\sigma_j^+ = \frac{\sigma_j^x + i\sigma_j^y}{2} = c_j^\dagger \exp\left(i\pi \sum_{l=0}^{j-1} c_l^\dagger c_l\right), \quad (\text{E2})$$

$$\sigma_j^z = 2c_j^\dagger c_j - 1, \quad (\text{E3})$$

$\mathcal{H}$ is rewritten as

$$\mathcal{H} = -\sum_{j=0}^{L-1} (2c_j^\dagger c_j - 1) - \mu \sum_{j=0}^{L-2} (c_j^\dagger - c_j)(c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}) + \mu(c_{L-1}^\dagger - c_{L-1})(c_0^\dagger + c_0)e^{i\pi\mathcal{N}}, \quad (\text{E4})$$

where $\mathcal{N} = \sum_{j=0}^{L-1} c_j^\dagger c_j$ is the fermion number operator. Since $\mathcal{P} = \prod_{j=0}^{L-1} \sigma_j^z = \pm 1$ is a conserved quantity, $\mathcal{H}$ may be separately diagonalized in two sectors. Here we are only interested in the ground state of the chain. In the basis of the eigenstates of the σ_j^z , all off-diagonal elements are negative, and it lies in the sector $\mathcal{P}=+1$ (Perron-Frobenius theorem). Using $\mathcal{P} = \exp(i\pi\mathcal{N})$ and the last term of Eq. (E4), we see that in this sector, one has to keep configurations with an even number of fermions satisfying antiperiodic boundary conditions

$$c_L^\dagger = -c_0^\dagger. \quad (\text{E5})$$

To take advantage of the translational invariance, we introduce Fourier-space fermions

$$c_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{L-1} e^{-ikj} c_j^\dagger, \quad (\text{E6})$$

where $k \in \{(2l+1)\frac{\pi}{L} | -L/2 \leq l \leq L/2-1\}$ are the L wave vectors. The Hamiltonian becomes

$$\mathcal{H} = L - \sum_k 2(1 + \mu \cos k) c_k^\dagger c_k + \mu \sum_k (i \sin k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - i \sin k c_{-k} c_k). \quad (\text{E7})$$

This expression can be diagonalized using a Bogoliubov transformation,

$$c_k^\dagger = \cos \theta_k b_k - i \sin \theta_k b_{-k}^\dagger, \quad (\text{E8})$$

$$\theta_{-k} = -\theta_k, \quad (\text{E9})$$

provided the following condition is satisfied:

$$\tan 2\theta_k = \frac{\mu \sin k}{1 + \mu \cos k}. \quad (\text{E10})$$

We then obtain

$$\mathcal{H} = \sum_k \varepsilon(k) [b_k^\dagger b_k - 1/2], \quad (\text{E11})$$

$$\frac{\varepsilon(k)}{2} = (1 + \mu \cos k) \cos 2\theta_k + \mu \sin k \sin 2\theta_k. \quad (\text{E12})$$

In the following, we want the vacuum of the b_k to be the ground state of $\mathcal{H}$, which is true only if $\varepsilon(k) > 0 \ \forall \ k$. One also has to take into account the indetermination of $\theta \bmod \pi$. There are two cases.

(i) $\mu \leq 1$: Here $1 + \mu \cos k$ is always positive. We choose

$$\theta_k = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\mu \sin k}{1 + \mu \cos k}\right) \quad (\text{E13})$$

and the energy spectrum is given by

$$\varepsilon(k) = 2\sqrt{1 + 2\mu \cos k + \mu^2}. \quad (\text{E14})$$

(ii) $\mu > 1$: Here, one has to be careful because $1 + \mu \cos k$ can vanish and change sign. A generic solution of Eq. (E10) is

$$\theta_k = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\mu \sin k}{1 + \mu \cos k}\right) + \frac{\pi}{2} q_k, \quad q_k \in \mathbb{Z}. \quad (\text{E15})$$

The eigenenergies are given by

$$\varepsilon(k) = (-1)^{q_k} \operatorname{sgn}(1 + \mu \cos k) 2\sqrt{1 + 2\mu \cos k + \mu^2}. \quad (\text{E16})$$

$1 + \mu \cos k$ changes sign at $k = \pm k_c = \pm \arccos(-1/\mu)$. A possible choice is therefore

$$q_k = \begin{cases} -1, & k < -k_c \\ 0, & -k_c \leq k \leq k_c \\ 1, & k > k_c. \end{cases} \quad (\text{E17})$$

2. Probability of a given configuration

Since $|0\rangle$ is the ground state of the chain, the probability of each configuration i is (in the σ^z basis)

$$p_i = \langle 0 | P_1^{\uparrow/\downarrow} P_2^{\uparrow/\downarrow} \dots P_L^{\uparrow/\downarrow} | 0 \rangle, \quad (\text{E18})$$

where $P_j^{\uparrow}$ ($P_j^{\downarrow}$) is the projector onto the $|\uparrow\rangle_j$ ($|\downarrow\rangle_j$) state,

$$P_j^{\uparrow} = c_j^{\dagger} c_j, \quad P_j^{\downarrow} = c_j c_j^{\dagger}. \quad (\text{E19})$$

Using Wick's theorem, p_i reduces to a Pfaffian. To compute it, we need to calculate four types of contractions: $\langle c_j^{\dagger} c_{j'} \rangle$, $\langle c_j c_{j'}^{\dagger} \rangle$, $\langle c_j^{\dagger} c_{j'}^{\dagger} \rangle$, and $\langle c_j c_j \rangle$. This can be done by expressing back the Jordan-Wigner fermions in terms of the Bogoliubov fermions,

$$\langle c_j^{\dagger} c_{j'} \rangle = \frac{1}{L} \sum_k \cos^2 \theta_k \cos[k(j - j')], \quad (\text{E20})$$

$$\langle c_j c_{j'}^{\dagger} \rangle = \frac{1}{L} \sum_k \sin^2 \theta_k \cos[k(j - j')], \quad (\text{E21})$$

$$\langle c_j^{\dagger} c_{j'}^{\dagger} \rangle = \frac{1}{L} \sum_k \sin \theta_k \cos \theta_k \sin[k(j' - j)], \quad (\text{E22})$$

$$\langle c_j c_{j'} \rangle = \frac{1}{L} \sum_k \sin \theta_k \cos \theta_k \sin[k(j - j')]. \quad (\text{E23})$$

If we write a generic projector as $P_j^{\uparrow/\downarrow} = a_{2j-1} a_{2j}$, where a is either c or $c^{\dagger}$, then

$$p_i = \operatorname{Pf}(\langle a_j a_{j'} \rangle)_{1 \leq i, j \leq 2L}. \quad (\text{E24})$$

Notice that it is also possible to compute p_i when L is odd. The only difference is that the fermion number operator satisfies

$$\exp(i\pi \mathcal{N}) = -\mathcal{P}. \quad (\text{E25})$$

Therefore, one has to take periodic boundary conditions $c_L^{\dagger} = c_0^{\dagger}$ and only keep configurations with an odd number of fermions. The wave vectors are now in the set $\{2l\pi/L | -L/2 \leq l \leq L/2 - 1\}$. Since the dispersion relation $\varepsilon(k)$ is minimum for $k = -\pi$, the ground-state wave function is

$$|\tilde{0}\rangle = b_{-\pi}^{\dagger} |0\rangle, \quad (\text{E26})$$

and the probabilities

$$p_i = \langle \tilde{0} | P_1^{\uparrow/\downarrow} P_2^{\uparrow/\downarrow} \dots P_L^{\uparrow/\downarrow} | \tilde{0} \rangle \quad (\text{E27})$$

will also be given by Pfaffians.

3. Configuration with highest probability

We study the case where L is even. The configuration with highest probability is attained by the ferromagnetic configuration

$$|i_0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\dots\rangle_z. \quad (\text{E28})$$

Defining

$$P = \prod_{j=0}^{L-1} c_j^{\dagger} c_j, \quad (\text{E29})$$

p_0 is expressed as

$$p_0 = \langle 0 | P | 0 \rangle. \quad (\text{E30})$$

P is a projector onto a state with L fermions.

$$Q = \prod_k c_k^{\dagger} c_k \quad (\text{E31})$$

is also a projector onto a state with L fermions. Since there is only *one* state of the Hilbert space with L fermions, P and Q are in fact identical. Using Eq. (E8), we therefore get

$$p_0 = \prod_k \cos \theta_k, \quad (\text{E32})$$

where θ_k is given by Eq. (E13) or (E15). At the critical point ($\mu = 1$), $\theta_k = k/4$.

- ¹L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- ²C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, *Nucl. Phys. B* **424**, 443 (1994).
- ³G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- ⁴V. E. Korepin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 096402 (2004).
- ⁵P. Calabrese and J. Cardy, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* (2004), 06002.
- ⁶H. Casini and M. Huerta, *Phys. Lett. B* **600**, 142 (2004).
- ⁷S. Furukawa, V. Pasquier, and J. Shiraishi, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 170602 (2009).
- ⁸P. Calabrese, J. Cardy, and E. Tonni, arXiv:0905.2069 (unpublished).
- ⁹A. Kitaev and J. Preskill, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 110404 (2006).
- ¹⁰M. Levin and X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 110405 (2006).
- ¹¹M. Haque, O. Zozulya, and K. Schoutens, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 060401 (2007); O. S. Zozulya, M. Haque, K. Schoutens, and E. H. Rezayi, *Phys. Rev. B* **76**, 125310 (2007).
- ¹²B. A. Friedman and G. C. Levine, *Phys. Rev. B* **78**, 035320 (2008).
- ¹³A. Hamma, R. Ionicioiu, and P. Zanardi, *Phys. Lett. A* **337**, 22 (2005); *Phys. Rev. A* **71**, 022315 (2005).
- ¹⁴S. Furukawa and G. Misguich, *Phys. Rev. B* **75**, 214407 (2007).
- ¹⁵C. Castelnuovo and C. Chamon, *Phys. Rev. B* **76**, 174416 (2007).
- ¹⁶S. Papanikolaou, K. S. Raman, and E. Fradkin, *Phys. Rev. B* **76**, 224421 (2007).
- ¹⁷A. Hamma, W. Zhang, S. Haas, and D. A. Lidar, *Phys. Rev. B* **77**, 155111 (2008).
- ¹⁸N. Anantharaman and S. Nonnenmacher, *Ann. Henri Poincaré* **8**, 37 (2007).
- ¹⁹Y. G. Sinai, *Funct. Anal. Appl.* **2**, 61 (1968).
- ²⁰A measure of phase space which is invariant under a chaotic transformation can sometimes be represented by a probability distribution on the configurations of a spin chain.
- ²¹D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2376 (1988).
- ²²C. L. Henley, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, S891 (2004).
- ²³E. Fradkin and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 050404 (2006).
- ²⁴B. Hsu, M. Mulligan, E. Fradkin, and Eun-Ah Kim, *Phys. Rev. B* **79**, 115421 (2009).
- ²⁵M. A. Metlitski, C. A. Fuertes, and S. Sachdev, arXiv:0904.4477 (unpublished).
- ²⁶Here we take a standard notation used in statistical mechanics and field theory, where $R=1$ for a free fermion and $R=\sqrt{2}$ for a SU(2)-symmetric case. In condensed matter physics, a common notation is $R^{\text{cm}}=R/\sqrt{4\pi}$, and the coupling constant $K=1/R^2$ known as TLL parameter is also widely used.
- ²⁷F. J. Dyson, *J. Math. Phys.* **3**, 140 (1962); **3**, 157 (1962); **3**, 166 (1962).
- ²⁸M. Gaudin, *J. Phys. (France)* **34**, 511 (1973).
- ²⁹F. Calogero, *J. Math. Phys.* **10**, 2191 (1969).
- ³⁰B. Sutherland, *J. Math. Phys.* **12**, 246 (1971).
- ³¹L. Campos Venuti, H. Saleur, and P. Zanardi, *Phys. Rev. B* **79**, 092405 (2009).
- ³²R. Moessner, S. Sondhi, and P. Chandra, *Phys. Rev. B* **64**, 144416 (2001).
- ³³R. Moessner and S. Sondhi, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1881 (2001).
- ³⁴G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137202 (2002).
- ³⁵C. Castelnuovo, C. Chamon, C. Mudry, and P. Pujol, *Ann. Phys. (N.Y.)* **322**, 903 (2007).
- ³⁶E. Ardonne, P. Fendley, and E. Fradkin, *Ann. Phys. (N.Y.)* **310**, 493 (2004).
- ³⁷It is interesting to notice that ρ_Ω ($\Omega=A,B$) is block diagonal in the spin basis, each block being labeled by a spin configuration i at the boundary. Block number i is a card $\mathcal{E}_i^\Omega \times \text{card } \mathcal{E}_i^\Omega$ matrix and has only *one* nonzero eigenvalue p_i , the corresponding eigenvector being $|RK_i^\Omega\rangle$. In the special case where all the energies $E_\Omega(\omega, i)$ vanish, each state $|RK_i^\Omega\rangle$ is an equal-amplitude superposition of spin configurations. Then, each block of ρ_Ω is particularly simple since all its matrix elements are *identical*. The block labeled by the boundary configuration i , of size $\text{card } \mathcal{E}_i^\Omega \times \text{card } \mathcal{E}_i^\Omega$, has all its entries equal to $p_i/\text{card } \mathcal{E}_i^\Omega$ and a trace equal to p_i .
- ³⁸Here the factor 2 is inserted because it will be convenient in Sec. III when identifying $E(i)$ as a Coulomb gas model. One may also think that the interactions occurring in A and B make a contribution $E(i)$ each and that the total contribution is twice of it.
- ³⁹H. Li and F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 010504 (2008).
- ⁴⁰F. D. M. Haldane, Talk at KITP Conference, February 2009 (unpublished), http://online.kitp.ucsb.edu/online/lowdim_c09/haldane/
- ⁴¹The particle coordinates are restricted to be multiple of $2\pi/L$ ground-state wave function of the Calogero-Sutherland model.
- ⁴²Y.-S. Wu and Y. Yu, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 890 (1995).
- ⁴³F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 635 (1988).
- ⁴⁴B. S. Shastri, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 639 (1988).
- ⁴⁵W. Nahm, *Nucl. Phys. B* **124**, 121 (1977).
- ⁴⁶J. Polchinski, *String Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- ⁴⁷M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic Press, San Diego, 1991).
- ⁴⁸A. Schmid, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1506 (1983).
- ⁴⁹R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Dover, Mineola, 1982).
- ⁵⁰P. W. Kasteleyn, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics III*, edited by E. D. G. Cohen (North-Holland, Amsterdam, 1975), p. 103.
- ⁵¹T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford University Press, New York, 2004).
- ⁵²D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).
- ⁵³N. M. Bogoliubov, A. G. Izergin, and V. E. Korepin, *Nucl. Phys. B* **275**, 687 (1986).
- ⁵⁴S. Qin, M. Fabrizio, L. Yu, M. Oshikawa, and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **56**, 9766 (1997).
- ⁵⁵N. Shannon, G. Misguich, and K. Penc, *Phys. Rev. B* **69**, 220403(R) (2004).
- ⁵⁶F. Pollmann, J. J. Betouras, K. Shtengel, and P. Fulde, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170407 (2006).
- ⁵⁷A. Y. Kitaev, *Ann. Phys. (N.Y.)* **303**, 2 (2003).
- ⁵⁸H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
- ⁵⁹P. V. Buividovich and M. I. Polikarpov, *Phys. Lett. B* **670**, 141 (2008).
- ⁶⁰One can recall that at a certain value of R , the sine potential for ϕ becomes relevant and ϕ is locked at a constant value, leading to a crystallization. Conversely, a crystal state can be regarded as a ϕ -locked state.

- ⁶¹Note that for the dimer models on the square and hexagonal lattices, the radius of ϕ is given by $R=1$, not by $R=2$ used by Hsu *et al.* (Ref. 24).
- ⁶²V. Petkova and J. Zuber, *Proceedings of “Nonperturbative Quantum Field Theoretic Methods and their Applications,”* Budapest, Hungary, 14–21 August 2000, edited by Z. Horvath and L. Palla (World Scientific, Singapore, 2001), pp. 1–35.
- ⁶³H. W. J. Blöte and H. J. Hilhorst, J. Phys. A **15**, L631 (1982); B. Nienhuis, H. J. Hilhorst, and H. W. J. Blöte, *ibid.* **17**, 3559 (1984).
- ⁶⁴J. Kondev and C. L. Henley, Phys. Rev. B **52**, 6628 (1995); Nucl. Phys. B **464**, 540 (1996); C. Zeng and C. L. Henley, Phys. Rev. B **55**, 14935 (1997); R. Raghavan, C. L. Henley, and S. L. Arouh, J. Stat. Phys. **86**, 517 (1997).
- ⁶⁵F. Alet, Y. Ikhlef, J. L. Jacobsen, G. Misguich, and V. Pasquier, Phys. Rev. E **74**, 041124 (2006).

Rényi entropy of a line in two-dimensional Ising models

J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier

Institut de Physique Théorique (IPhT), CEA, CNRS, URA 2306, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

(Received 5 July 2010; published 30 September 2010)

We consider the two-dimensional Ising model on an infinitely long cylinder and study the probabilities p_i to observe a given spin configuration i along a circular section of the cylinder. These probabilities also occur as eigenvalues of reduced density matrices in some Rokhsar-Kivelson wave functions. We analyze the subleading constant to the Rényi entropy $R_n = 1/(1-n) \ln(\sum_i p_i^n)$ and discuss its scaling properties at the critical point. Studying three different microscopic realizations, we provide numerical evidence that it is universal and behaves in a steplike fashion as a function of n with a discontinuity at the Shannon point $n=1$. As a consequence, a field theoretical argument based on the replica trick would fail to give the correct value at this point. We nevertheless compute it numerically with high precision. Two other values of the Rényi parameter are of special interest: $n=1/2$ and $n=\infty$ are related in a simple way to the Affleck-Ludwig boundary entropies associated to free and fixed boundary conditions, respectively.

DOI: [10.1103/PhysRevB.82.125455](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.125455)

PACS number(s): 05.70.Jk, 05.50.+q, 75.40.Mg, 03.67.Mn

I. INTRODUCTION

The entanglement (or Von Neumann) entropy is, in general, a difficult quantity to compute in two-dimensional (2D) quantum lattice models.¹ In Ref. 2 it was, however, shown that for a particular type of wave functions, of type dubbed “Rokhsar-Kivelson” (RK), and for particular geometries, the calculation simplifies considerably. A lattice model of statistical mechanics can be used to define a Rokhsar-Kivelson wave function as follows:^{3,4}

$$|\text{RK}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}}} \sum_c e^{-1/2 E(c)} |c\rangle, \quad (1)$$

where the sum runs over the classical configurations and $E(c)$ is the energy associated to c (interactions are assumed to be short ranged), and the normalization factor involves the classical partition function $\mathcal{Z}$. For such a state, it has been shown in Ref. 5 that the eigenvalues of the reduced density matrix of a semi-infinite cylinder (with a finite circumference L , see Fig. 1) are simply the classical probabilities p_i to observe a given configuration i at the boundary between A and B . In turn, these probabilities can be obtained from the dominant eigenvector of the transfer matrix of the classical model. So, the complete entanglement spectrum is encoded in the dominant eigenvector of the classical transfer matrix.⁶ In this work, we concentrate on the situation where the classical model is a two-dimensional Ising model. Each probability p_i is therefore associated to a given configuration i of the spins along the “ring” of length L which separates the regions A and B (Fig. 1). Specifically, we are interested in the behavior of the Rényi entropies

$$R_{n>0} = \frac{\ln(Z_n)}{1-n} \quad Z_n = \sum_i p_i^n, \quad (2)$$

including its limit

$$\lim_{n \rightarrow 1} R_n = - \sum_i p_i \ln(p_i), \quad (3)$$

which is the Shannon entropy (or Von Neumann in the quantum/RK point of view⁵).

As discussed in previous studies,^{5,7,8} $R_n(T, L)$ scales linearly with perimeter L of the cylinder, even at the critical temperature. However, the most interesting piece of information is the first *subleading* correction, $r_n(T)$. For a given temperature T , the latter is defined through an expansion of $R_n(T, L)$ for large L

$$R_n(T, L) \simeq a_n(T)L + r_n(T) + o(1) \quad (4)$$

and is of order 1.⁹ Contrary to the coefficient a_n , r_n has been argued to be universal. In the case of Ising models, $r_1(T > T_c) = 0$ in the high-temperature phase and $r_1(T < T_c) = \ln(2)$ in the low-temperature phase.⁵ At the critical point, the previous numerical calculations (up to $L=36$) lead to $r_1(T=T_c) \simeq 0.2544$.¹⁰ The numerical results presented in Sec. II significantly increase the precision on this number: $r_1(T_c) = 0.2543925(5)$. Furthermore, we confirm its universal character by checking the agreement between three microscopically different realizations of the 2D critical Ising models: on the square and triangular lattices, and using the Ising

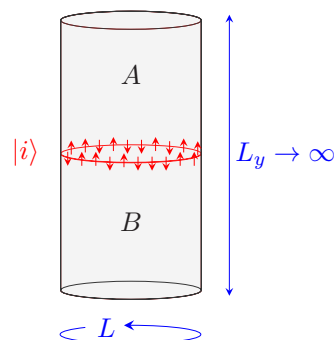


FIG. 1. (Color online) Cylinder geometry with $L_y \gg L$. A probability p_i is associated to each spin configuration i of the boundary (red circle) between A and B .

chain in transverse field (ICTF). At present, we are not aware of any field-theory method which is able to compute this number.

In Sec. III we analyze the finite-size scaling of $r_1(\mu, L)$ in the vicinity of the critical point, using numerical (but exact) calculations for the ICTF. There, the parameter μ measures the ratio of the spin-spin interaction over the strength of the external magnetic field and plays the role of the temperature in the classical Ising model. Away from $\mu = \mu_c$, we conclude that $r_1(\mu, L)$ only depends on $L(\mu - 1)$ in the critical regime, which is consistent with a correlation length diverging as $1/(\mu - 1)$ close to the critical point (located at $\mu_c = 1$). In particular, we confirm the steplike shape of $r_1(\mu, L = \infty)$.

In Sec. IV we analyze the finite-size scaling of $r_n(\mu = \mu_c = 1, L)$ in the vicinity of $n = 1/2$ and $n = 1$, again with the ICTF (up to $L = 44$ sites). The case $n = 1/2$ turns out to be exactly solvable (Sec. IV B) and related to the “ground-state degeneracy” for a critical Ising model with free boundary conditions, as discussed by Affleck and Ludwig.¹¹ In the vicinity of $n = 1$ the numerical data strongly suggests a steplike shape of $r_n(\mu = 1, L = \infty)$ as a function of the Rényi parameter n : $r_n(\mu = 1, L = \infty) = 0$ for $n < 1$ and $r_n(\mu = 1, L = \infty) = \ln 2$ for $n > 1$. This result has some important consequence regarding possible field-theory approaches. In particular, a singularity at $n = 1$ would invalidate any attempt to compute r_1 from a naive analytical continuation to $n = 1$ of the $n \in \mathbb{N}^*$ result (replica trick).

II. SHANNON ENTROPY AT THE CRITICAL POINT

A. Square and triangular lattices

We compute the Shannon entropy R_1 using the transfer matrix $\mathcal{T}$ of the ferromagnetic Ising model. We numerically diagonalize $\mathcal{T}$ (in the full space of dimension 2^L), on the square and on the triangular lattices¹² for sizes up to $L = 14$ and denote by $|L\rangle$ and $|E\rangle$ the left- and right-dominant eigenvectors of $\mathcal{T}$ (corresponding to the eigenvalue with the largest modulus). Then, the probability p_i of a configuration i is given by

$$p_i = \frac{\langle L|i\rangle\langle i|R\rangle}{\langle L|R\rangle} \quad (5)$$

in the limit of a infinitely long cylinder $L_y \gg L$.

The results for $R_1(T_c)$, obtained by summing over the 2^L configurations, are shown in Fig. 2. The linear behavior, $R_1(T_c) \sim L$ is apparent, as well as the fact that the data for the two lattices extrapolate to the same value ≈ 0.254 at $L = 0$. Although the systems are relatively small, it shows that $r_1(T_c) \approx 0.254$ does not depend on the microscopic lattice geometry and is therefore very likely to be *universal*.

B. Ising chain in transverse field

As a third microscopic realization of the Ising 2D universality class, we study the ICTF

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^z. \quad (6)$$

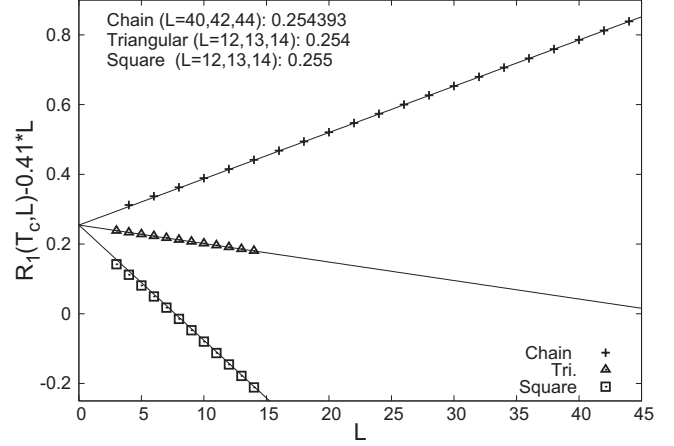


FIG. 2. Shannon entropy $R_1(T_c, L)$ of the Ising models at the critical point, plotted as a function of L (a linear term, $-0.41L$, has been subtracted for clarity). Data for the square and triangular lattices and for the Ising chain in transverse field are compared. The data are well reproduced by $R_1(L) \approx aL + r_1 + b/L$ and the subleading constant r_1 is evaluated using the three largest sizes. Each line represents the leading term and the constant, $aL + r_1$. The subleading term appears to be the same $r_1 \approx 0.254$ for the three microscopic models.

This Hamiltonian proportional to the logarithm of the transfer matrix of an anisotropic Ising model on the square lattice with couplings along the y direction (“time”) which are much stronger than in the x direction (“space”).

This Hamiltonian is transformed into a free-fermion problem using the standard Jordan-Wigner transformation. The later free-fermion problem is then diagonalized using a Bogoliubov transformation. The ground state of $\mathcal{H}$ is then described as the vacuum of the Bogoliubov fermions. The critical point is located at $\mu = 1$. For $\mu > 1$ the system is in the ordered phase with spontaneously broken $\mathbb{Z}_2$ symmetry ($\langle \sigma^x \rangle \neq 0$) and for $\mu < 1$ the system is in the disordered (paramagnetic) phase.

It turns out that the ground state $|G\rangle$ of the chain is simpler to express in σ^z basis. For an Ising spin configuration $|i\rangle$ labeled by the variables $\sigma_i^z = \pm 1$, the probability at $\mu = 1$ is

$$p_i = |\langle i|G\rangle|^2 = p(\sigma_0^z, \dots, \sigma_{L-1}^z) = \det M, \quad (7)$$

where M is an $L \times L$ matrix defined by

$$M_{j\ell} = \frac{1}{2} \delta_{j\ell} + \frac{(-1)^{j-\ell} \sigma_j^z}{2L \sin \left[\pi \left(j - \ell + \frac{1}{2} \right) / L \right]}. \quad (8)$$

This result is derived in Appendix, where the noncritical case $\mu \neq 1$ is also considered. However, going back to the initial 2D classical model, the actual spin directions are measured by σ_j^x . So, we first compute an entropy $R_n^{(z)}$ corresponding to probabilities of z -axis configurations, and then use the Kramers-Wannier duality transformation¹³ to obtain the desired $R_n = R_n^{(x)}$

$$R_n^{(x)}(\mu) = R_n^{(z)}(1/\mu) + \ln 2. \quad (9)$$

TABLE I. Shannon entropy $R_1(L, \mu=1)$ of the critical Ising chain in transverse field as a function of the system size L . The subleading constant r_1 is extracted using three different fits: $r_1^{(1)}$ is obtained by a fit to $R_1(L) \approx aL + r_1 + bL^{-1}$ using the three following system sizes: $L, L-2, L-4$. $r_1^{(4)}$ is obtained by a fit to $R_1(L) \approx aL + r_1 + bL^{-1} + \dots + eL^{-4}$ using the six system sizes $L, L-2, \dots, L-10$. $r_1^{(5)}$ is obtained by a fit to $R_1(L) \approx aL + r_1 + bL^{-1} + \dots + fL^{-5}$ using the seven system sizes $L, L-2, \dots, L-12$. a is the coefficient of the extensive (and nonuniversal) term, extracted from the seven-point fit above. From this analysis, our best estimate for $L=\infty$ is $r_1=0.2543925(5)$.

L	$R_1(L)$	a_1	$r_1^{(1)}$	$r_1^{(4)}$	$r_1^{(5)}$
16	7.02789845748593	0.4232735600	0.2544012149	0.2543924985	0.2543925471
18	7.87432026832476	0.4232735603	0.2543983072	0.2543925177	0.2543925302
20	8.72076710746883	0.4232735604	0.2543965648	0.2543925180	0.2543925183
22	9.56723215961776	0.4232735605	0.2543954570	0.2543925156	0.2543925130
24	10.4137108773778	0.4232735605	0.2543947190	0.2543925136	0.2543925110
26	11.2602001105626	0.4232735606	0.2543942083	0.2543925110	0.2543925072
28	12.1066976079502	0.4232735605	0.2543938437	0.2543925139	0.2543925188
30	12.9532017180203	0.4232735608	0.2543935763	0.2543925001	0.2543924741
32	13.7997112017585	0.4232735600	0.2543933760	0.2543925306	0.2543925939
34	14.6462251114521	0.4232735614	0.2543932227	0.2543924796	0.2543923635
36	15.4927427098430	0.4232735597	0.2543931036	0.2543925326	0.2543926640
38	16.3392634147881	0.4232735610	0.2543930095	0.2543925037	0.2543924262
40	17.1857867605076	0.4232735606	0.2543929343	0.2543924999	0.2543924890
42	18.0323123698967	0.4232735603	0.2543928734	0.2543925161	0.2543925658
44	18.8788399343835	0.4232735602	0.2543928237	0.2543925300	0.2543925757

The calculation of R_n^z amounts to compute 2^L probabilities, each of which is obtained as a determinant of size $L \times L$. Using the translation invariance and the reflection symmetry of the chain, the number of probabilities to compute can be reduced to $\sim 2^L/(2L)$.¹⁴ To do so we generate one representative for each orbit of spin configurations (under the action of the lattice symmetries) using the “bracelets” enumeration algorithm of Ref. 15. For the largest size, $L=44$, computing all the probabilities ($2^L=1.7 \times 10^{13}$) required about 1000 h of CPU time on a parallel machine.

The data for the Shannon entropy R_1 are plotted in Fig. 2 and given in Table I. They significantly extend the results published in Ref. 5. The columns $r_1^{(1)}$, $r_1^{(4)}$, and $r_1^{(5)}$ correspond to three different ways to extract the subleading constant from $R_1(\mu=1, L)$ with three different types of fits (details in the table caption). In all cases the result rapidly converges and, using the largest size ($L=44$ spins) we estimate that $r_1=0.2543925(5)$ at $L=\infty$.

III. μ AWAY FROM THE CRITICAL POINT

In this section, we investigate the behavior of r_1 in the vicinity of the critical point, by considering the Ising chain in transverse field away from $\mu=1$. The results are summarized in Fig. 3.

In this plot, $r_1(\mu)$ is extracted from $R_1(L, \mu)$ using a fit to $a_1(\mu)L + r_1(\mu) + b_1(\mu)/L$ with three consecutive values of L . For the size we have studied (here $L \leq 38$), there is still some visible finite-size effects. In particular, the marked oscillations in the vicinity of $\mu=1$ are not converged to the $L=\infty$ limit. In fact, it is reasonable to expect the curves to gradu-

ally approach a steplike function as L increases: $r_1=0$ for $\mu < 1$ and $r_1=\ln(2)$ for $\mu > 1$.

This scenario, anticipated in Ref. 5, is corroborated by the scaling shown in the inset of Fig. 3. When plotted as a function of $(\mu-1)L$, the data for different system sizes and different values of μ collapse onto a single—and very likely universal—curve. This can be understood from the fact that the correlation length ξ of the Ising model diverges as $1/|\mu-1|$ at the transition, and if one assumes that r_1 is a function of $L/\xi(\mu)$ in the critical region. If correct, it imme-

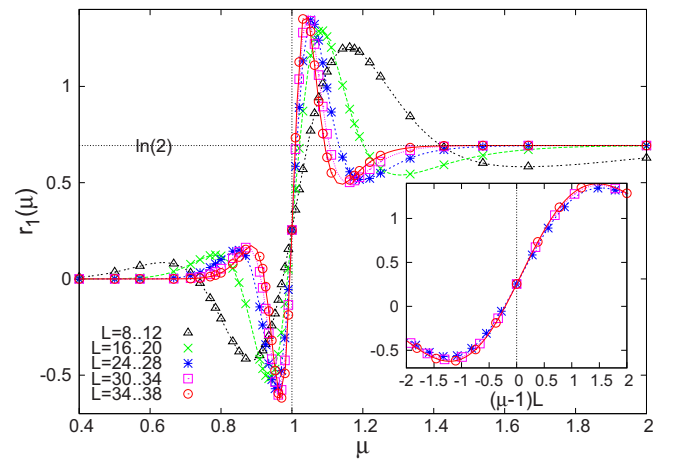


FIG. 3. (Color online) Subleading constant r_1 of the Shannon entropy of the Ising chain as a function of μ . The critical point corresponds to $\mu=1$. Inset: $r_1(\mu)$ for different system sizes, plotted as a function of $(\mu-1)L$.

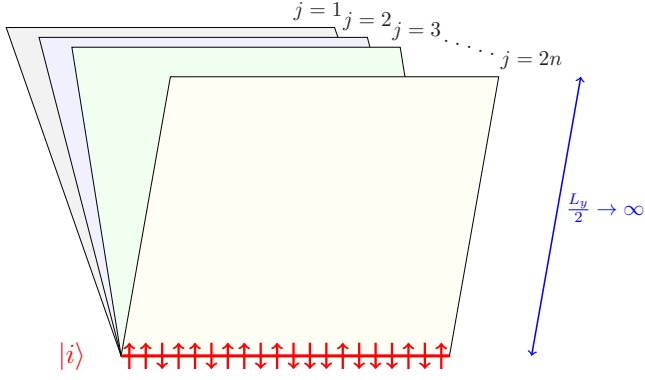


FIG. 4. (Color online) $2n$ Ising models glued together at their boundary (“Ising book”). In our case, each “page” has periodic boundary conditions along the horizontal axis and is semi-infinite in the vertical direction. Figure 1 corresponds to two pages ($n=1$).

diately implies that $r_1(\mu)$ is a steplike function in the thermodynamic limit.

IV. RÉNYI ENTROPY AWAY FROM $n=1$

We now consider the effect of changing the Rényi parameter n . When $2n$ is an integer, R_n has an interpretation in terms of the free energy of $k=2n$ semi-infinite Ising models which are “glued” together at their boundary (see Fig. 4).

Using the transfer matrix point of view, it is simple to see that $p_i^{k/2}$ is (proportional to) the probability to observe the spin configuration i on a circle along which k Ising models (defined on semi-infinite cylinders) are forced to coincide. This was used in Refs. 7 and 8 in some field-theory calculations, but it is also true at the microscopic level. The interpretation above does not apply when $2n$ is not a positive integer, but $R_n(L, \mu)$ can still be computed numerically for any $n \geq 0$.

A. Rényi parameter $n=2$ and above

When n goes to infinity, only the spin configuration with the largest probability contributes to R_n . For the ferromagnetic Ising models we consider (including the quantum chain in transverse field), this configuration is twofold degenerate and corresponds to a fully polarized ferromagnetic state, $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ or $|\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle$. In other words, taking the limit $n \rightarrow \infty$ amounts to study a semi-infinite Ising model with ferromagnetic boundary conditions. The corresponding probability, $p_{\max}$, behaves as $-\ln(p_{\max}) \sim aL + \ln(2)$ at the critical point.⁵ The subleading constant, $\ln(2)$, is nothing but (twice) the “ g factor” associated to this conformally invariant boundary condition (more details in Sec. IV B). This implies for the Rényi entropies that the subleading constant $r_n(\mu_c)$ is $\ln(2)$ at $n=\infty$.

In fact, for $n \geq 2$ the Fig. 5 shows that even relatively small systems give $r_n(\mu_c)$ very close to $\ln 2$. Table II is an analysis showing that $r_2(\mu=1) \approx \ln 2$ with a great accuracy, on the order of 10^{-8} . Since the convergence to $\ln 2$ is even faster when $n > 2$, there is practically no doubt that $r_n(\mu_c)$ is exactly $\ln 2$ for $n \geq 2$.¹⁶

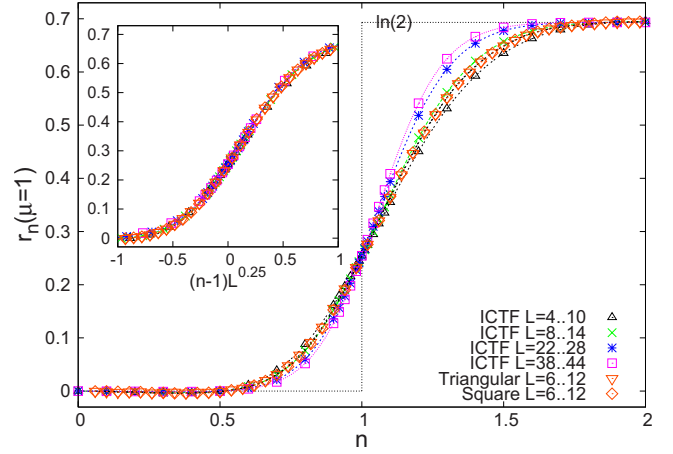


FIG. 5. (Color online) Subleading constant r_n of the Rényi entropy of the Ising chain (ICTF, at $\mu=1$) and classical Ising models (triangular and square lattice, at $T=T_c$) as a function of the Rényi parameter n . The (slow) convergence toward a step function can be observed. Inset: when plotted as a function of $(n-1)L^{0.25}$, the data collapse reasonably well onto a single curve. For each value of n , r_n is obtained by fitting the data for $R_n(L)$ to $\approx aL + r_n + bL^{-1} + cL^{-2}$ using four system size: L , $L-2$, $L-4$, and $L-6$, as indicated.

As a consequence, an analytical continuation of this result to $n=1$ would erroneously give $r_1(\mu_c) = \ln 2$ (instead of 0.25439). In particular, we note that the results of Ref. 8 (which use a replica technique) are in agreement with ours for $n > 1$, but not at $n=1$.

B. $n=\frac{1}{2}$

The special value $n=\frac{1}{2}$ corresponds to the free energy of a *single* Ising model defined on a semi-infinite cylinder (keeping only part A in Fig. 1) and can be treated exactly. Using the transfer matrix point of view, it is indeed simple to see that $\sqrt{p_i}$ is proportional to the probability to observe the spin configuration i at the edge of a semi-infinite Ising model (contrary to p_i which is the probability to observe i in the bulk).

As far as the universal properties are concerned, we can study the ground state of the quantum Ising chain [Eq. (6)] rather than the transfer matrix of the classical 2D model. Denoting by $|G\rangle$ the ground state of the chain, we have $\sqrt{p_i} = \langle G|i\rangle$ and the Rényi entropy $R_{1/2}$ can be written as

$$R_{1/2}(L) = 2 \ln \left(\langle G| \sum_{\{\sigma_i^x = \pm 1\}} |\sigma_1^x, \dots, \sigma_L^x\rangle \right), \quad (10)$$

$$= 2 \ln(2^{L/2} \langle G|\text{free}\rangle), \quad (11)$$

where $|\text{free}\rangle = |\{\sigma_i^z = 1\}\rangle$ is the state where all the spins point in the z direction. It turns out that the latter state is the vacuum of Jordan-Wigner Fermion and that the scalar product in Eq. (11) can be obtained as a particular case of Eqs. (7) and (8). At the critical point ($\mu=1$), the result is particularly simple⁵

TABLE II. Rényi entropy $R_2(L, \mu=1)$ of the critical Ising chain in transverse field as a function of the system size L . The subleading constant $r_2(\mu_c)$ is extracted using three different fits (same as in Table I): $r_2^{(1)}$ is obtained by a fit to $R_2(L) \approx aL + r_1 + bL^{-1}$ using the three following system sizes: $L, L-2, L-4$. $r_2^{(4)}$ is obtained by a fit to $R_2(L) \approx aL + r_1 + bL^{-1} + \dots + eL^{-4}$ using the six system sizes $L, L-2, \dots, L-10$. $r_2^{(5)}$ is obtained by a fit to $R_2(L) \approx aL + r_1 + bL^{-1} + \dots + fL^{-5}$ using the seven system sizes $L, L-2, \dots, L-12$. a is the coefficient of the extensive (and nonuniversal) term, extracted from the seven-point fit above. These data show that r_1 converges to $\ln 2$ (limit $L \rightarrow \infty$). Similar results, with an even faster convergence, show that $r_{n \geq 2}(\mu_c) = \ln(2)$. With the present systems sizes and the present machine accuracy, adding more terms in the $1/L$ expansion does not increase the accuracy on r_2 .

L	$R_2(L)$	a_2	$r_2^{(1)}/\ln 2$	$r_2^{(4)}/\ln 2$	$r_2^{(5)}/\ln 2$
20	4.95205232373074	0.2138075040	0.9989748222	0.9999928713	0.9999877126
28	6.66741530818944	0.2138074244	0.9996525352	0.9999971726	0.9999989449
36	8.38060934985332	0.2138074200	0.9998432968	0.9999991645	0.9999998996
44	10.0928119559937	0.2138074203	0.9999165184	0.9999996643	0.9999997718

$$\langle G | \text{free} \rangle = \prod_{j=0}^{L/2-1} \cos \frac{(2j+1)\pi}{4L} \quad (12)$$

and leads to the following exact expression of the $n=\frac{1}{2}$ -Rényi entropy:

$$R_{1/2}(L, \mu=1) = L \ln 2 + 2 \sum_{j=0}^{L/2-1} \ln \cos \frac{(2j+1)\pi}{4L}. \quad (13)$$

Finally, an Euler-Maclaurin expansion gives the desired finite-size scaling with a vanishing constant $r_{1/2}$

$$R_{1/2}(L, \mu=1) = a_{1/2}L + r_{1/2} + o(1), \quad (14)$$

$$a_{1/2} = \frac{2K}{\pi}, \quad (15)$$

$$r_{1/2} = 0, \quad (16)$$

where $K \approx 0.91596559$ is Catalan's constant.

The constant term in $-\ln \langle G | \text{free} \rangle$ has already been studied in Ref. 5. The situation where $|G\rangle$ is the ground state of an antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain has also been considered.^{5,17-21} Such a scalar product is closely related to the notion of quantum fidelity.¹⁷ In terms of a classical 2D Ising model, $-T \ln \langle G | \text{free} \rangle$ is the boundary contribution to the free energy of a semi-infinite Ising model with free boundary conditions imposed at the edge. At the critical point, this is a well-understood quantity from boundary CFT, and the subleading constant $r_{1/2}$ corresponds to $-2 \ln g$, where g is the ground-state degeneracy discussed by Affleck and Ludwig.¹¹ In the present case of the Ising model, $r_1=0$ is in agreement with $g_{\text{free}}=1$.^{11,22} This result has also been checked numerically in Ref. 23.

C. Critical behavior in the vicinity of $n=1$

The results concerning the subleading constant $r_n(\mu=1)$ are summarized in Fig. 5. The behavior of $r_n(\mu=1)$ has some similarity with that of $r_1(\mu)$: the curves interpolates between 0 and $\ln 2$ with a slope at $n=1$ (respectively, $\mu=1$) which increases as a function of the system size. Here again, it

appears that the data for different values of n and L collapse onto a single curve when plotted as a function of $(n-1)L^{0.25}$ (inset of Fig. 5). The error bar on the exponent 0.25 are unfortunately large and difficult to estimate, but it indicates (a rather slow) divergence of the slope $\partial r_n / \partial n|_{n=1}$ when L increases. r_n has also been computed for the classical Ising models on the square and triangular lattices, as in Sec. II A. The inset of Fig. 5 shows that the r_n obtained from the corresponding transfer-matrix calculations are in good agreement with those calculated from the ground state of the ICTF. This is a strong indication that, in a scaling region around $n=1$, r_n defines a *universal curve*. The analogy between the effects of μ and n suggests that $n-1$ is a “relevant” perturbation: going slightly below (respectively, above) $n=1$ induces a drastic change in $r_n(\mu=1)$, which immediately (when $L=\infty$) goes to 0 (respectively, $\ln 2$), as in the high (respectively, low) temperature phase of the 2D Ising model.

D. Vicinity of $n=\frac{1}{2}$

The value $n=\frac{1}{2}$ can be treated exactly, as explained in Sec. IV B. However, the free-fermion calculation does not extend away from $n=\frac{1}{2}$. Still, at $n=0.5$ we observe (numerically) a crossing of the curves corresponding to different values of L (see Fig. 6). This phenomenon, also observed at $n=1$, is reminiscent of a critical behavior, where the deviation away from $n=1/2$ would play the role of an irrelevant perturbation away from a fixed point. The data can also be collapsed onto a single curve, when the y axis is multiplied by a factor $\approx L^{0.6}$. However, contrary to the case $n=1$, this result indicates a reasonably fast convergence toward $r_n=0$ in the vicinity of $n=1/2$ (see the inset of Fig. 6).

V. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

In the present Ising models, $r_n(\mu)$ seems to take only three discrete values. For example, in the critical case, we find

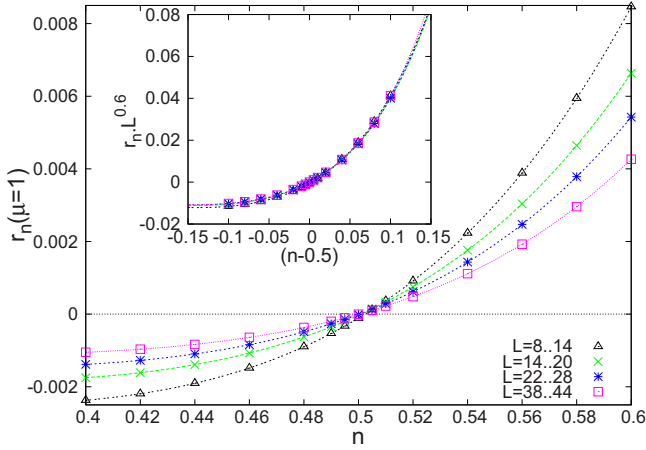


FIG. 6. (Color online) Subleading constant r_n of the Rényi entropy of the Ising chain (at the critical point $\mu=1$), in the vicinity of $n=0.5$. Inset: subleading constant multiplied by $L^{0.6}$ as a function of $(n-0.5)$.

$$r_n(\mu=1) = \begin{cases} 0, & n < 1 \\ 0.2543925(5), & n = 1 \\ \ln 2, & n > 1. \end{cases} \quad (17)$$

Similar nontrivial analytic behavior have already been reported for other models.^{24–26} This is quite different from other models described in terms of a free field compactified (with radius R) in the long-distance limit. In that case, which is better understood from a field-theory point of view, the system describes a line of fixed points and the subleading constant $r_n(R)$ continuously varies along that critical line^{27,28}

$$r_n(R) = \ln R - \frac{\ln n}{2(n-1)}. \quad (18)$$

We have discussed how the special values $n=\frac{1}{2}$ and $n=\infty$ are related to the g factors associated to free and fixed boundary conditions of the Ising model. But so far, we do not know how to understand $r_{n=1}$ for the critical Ising model using CFT. This is certainly an interesting question for future studies. Up to now, the replica trick has been a very successful tool for extracting such universal quantities, especially in one-dimensional quantum spin chains.^{29,30} However, it seems (see Secs. IV A and IV C) that this method cannot be applied to the Ising critical point for our quantity. This makes the analytical computation of $r_{n=1}$ all the more challenging. It is tempting to conjecture that crossings for $r_n(L)$ are observed whenever the underlying probabilities, $\sim p_i(\mu)^n$ describe a conformally invariant setup. It is indeed the case at $n=1/2$ (Ising boundary with free boundary conditions), but it is also realized for $n=1$, since it correspond to the bulk probabilities. We also expect that the nonanalytical behavior of r_n in the vicinity of $n=1$ could be a generic feature of all minimal models. Finally, it would be interesting to investigate possible connections with the theory of line defects in conformally invariant systems.^{31,32}

ACKNOWLEDGMENTS

We wish to thank J. Dubail, S. Furukawa, A. Läuchli, Ph. Lecheminant, M. Oshikawa, and H. Saleur for several useful discussions and suggestions. The numerical calculations were done on the machine titane at the “Centre de calcul centralisé du CEA” under the Project No. p575.

APPENDIX: PROBABILITY OF A SPIN CONFIGURATION

We consider an Ising chain in transverse field

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=0}^{L-1} \sigma_j^z. \quad (A1)$$

We assume L to be even, as well as periodic boundary conditions $\sigma_L^x = \sigma_0^x$. We wish to find the ground state $|G\rangle$ of this Hamiltonian and to compute all of its components in the basis of the eigenstates of the σ_j^z .

1. Diagonalization

As is well known, $\mathcal{H}$ can be expressed in terms of free fermions, using the Jordan-Wigner transformation

$$\sigma_j^x + i\sigma_j^y = 2c_j^\dagger \exp\left(i\pi \sum_{l=0}^{j-1} c_l^\dagger c_l\right), \quad (A2)$$

$$\sigma_j^z = 2c_j^\dagger c_j - 1, \quad (A3)$$

where the $c, c^\dagger$ satisfy the canonical anticommutation relations $\{c_j, c_\ell^\dagger\} = \delta_{j\ell}$. This allows to write the Hamiltonian as a quadratic form

$$\mathcal{H} = -\sum_{j=0}^{L-1} (2c_j^\dagger c_j - 1) - \mu \sum_{j=0}^{L-1} (c_j^\dagger - c_j)(c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}), \quad (A4)$$

where the fermions are subject to boundary condition

$$c_L^\dagger = -\exp(i\pi\mathcal{N})c_0^\dagger, \quad \mathcal{N} = \sum_{l=0}^{L-1} c_l^\dagger c_l. \quad (A5)$$

The parity operator $\mathcal{P}$ commutes with $\mathcal{H}$

$$\mathcal{P} = \prod_{j=0}^{L-1} \sigma_j^z = \exp(i\pi\mathcal{N}) = \pm 1, \quad (A6)$$

and because of Perron-Frobenius theorem, the ground state lies in the sector $\mathcal{P}=+1$. Therefore, fermions are subjected to antiperiodic boundary conditions $c_L^\dagger = -c_0^\dagger$. $\mathcal{H}$ can finally be diagonalized by a Bogoliubov transformation

$$c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikj} (\cos \theta_k d_k - i \sin \theta_k d_{-k}^\dagger), \quad (A7)$$

$$k \in \{(2l+1)\pi/L | -L/2 \leq l \leq L/2 - 1\}, \quad (\text{A8})$$

$$\sin 2\theta_k = \frac{\mu \sin k}{\sqrt{1 + 2\mu \cos k + \mu^2}}, \quad (\text{A9})$$

$$\cos 2\theta_k = \frac{1 + \mu \cos k}{\sqrt{1 + 2\mu \cos k + \mu^2}}. \quad (\text{A10})$$

The new fermions operators $d_k, d_k^\dagger$ satisfy the necessary anticommutation relations and diagonalize $\mathcal{H}$

$$\mathcal{H} = \sum_k \varepsilon_k (d_k^\dagger d_k - 1/2), \quad (\text{A11})$$

$$\varepsilon_k = 2\sqrt{1 + 2\mu \cos k + \mu^2}. \quad (\text{A12})$$

$\varepsilon_k > 0$ ensures that the ground state $|G\rangle$ is the vacuum $|0\rangle$ of the d_k .

2. Exact formulas for the spin probabilities

We define P_j^σ as the projector onto the $|\sigma = \pm 1\rangle_j^\sigma$ state

$$P_j^+ = c_j^\dagger c_j, \quad P_j^- = c_j c_j^\dagger. \quad (\text{A13})$$

p_i is then given by

$$p_i = p(\sigma_0, \dots, \sigma_{L-1}) = \langle 0 | P_0^\sigma P_1^\sigma \dots P_{L-1}^\sigma | 0 \rangle. \quad (\text{A14})$$

Using Wick's theorem, this correlator reduces to a Pfaffian. To compute it, we need to calculate the four types of contractions $\langle c_j^\dagger c_\ell \rangle$, $\langle c_j c_\ell^\dagger \rangle$, $\langle c_j^\dagger c_\ell^\dagger \rangle$, and $\langle c_j c_\ell \rangle$, which can be done using Eq. (A7). It is worth noticing that all these correlators are real in this particular model. We write a generic projector as

$$P_j^\sigma = f_j^\dagger f_j \quad (\text{A15})$$

with $f_j^\dagger = c_j^\dagger$ for $\sigma = +1$ and $f_j^\dagger = c_j$ for $\sigma = -1$. Then

$$p_i^2 = \langle f_0^\dagger f_0 f_1^\dagger f_1, \dots, f_{L-1}^\dagger f_{L-1} \rangle^2. \quad (\text{A16})$$

$$= \langle f_0^\dagger f_1^\dagger, \dots, f_{L-1}^\dagger f_0 f_1, \dots, f_{L-1} \rangle^2, \quad (\text{A17})$$

$$= \text{Pf}^2 \begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix}, \quad (\text{A18})$$

where A is antisymmetric, B is symmetric, and Pf denotes the Pfaffian. The matrix elements of A and B are

$$A_{j\ell} = \langle f_j^\dagger f_\ell^\dagger \rangle, \quad \ell \geq j, \quad (\text{A19})$$

$$B_{j\ell} = \langle f_j^\dagger f_\ell \rangle. \quad (\text{A20})$$

Using the relation $\text{Pf}^2 = \det$, Eq. (A18) simplifies into

$$p_i^2 = \det \begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix}, \quad (\text{A21})$$

$$= \det \begin{pmatrix} A+B & B \\ 0 & B-A \end{pmatrix}. \quad (\text{A22})$$

Equation (A22) follows from Eq. (A21) by adding the second column to the first and then the first row to the second. Finally,

$$p_i = \det(A+B) = \det M, \quad (\text{A23})$$

where M is a $L \times L$ matrix with elements

$$M_{j\ell} = \langle f_j^\dagger (f_\ell^\dagger + f_\ell) \rangle, \quad (\text{A24})$$

$$= \frac{1}{2} \delta_{j\ell} + \frac{\sigma_j^\tau}{2L} \sum_k \cos[k(j-\ell) + 2\theta_k]. \quad (\text{A25})$$

At the critical point ($\mu=1$), $\theta_k = k/4$ and the matrix elements simplify even further

$$M_{j\ell} = \frac{1}{2} \delta_{j\ell} + \frac{(-1)^{j-\ell} \sigma_j^\tau}{2L \sin[\pi(j-\ell+1/2)/L]}. \quad (\text{A26})$$

¹L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).

²S. Furukawa and G. Misguich, *Phys. Rev. B* **75**, 214407 (2007).

³D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2376 (1988).

⁴C. L. Henley, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, S891 (2004).

⁵J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, *Phys. Rev. B* **80**, 184421 (2009).

⁶This quantum/classical correspondence works in a rather straightforward way for simple constrained models (such as dimer models or vertex models). For other models, such as the Ising model considered in this paper, some additional care is needed to define the geometry of the A/B boundary at the microscopic level. In the particular case of 2D classical Ising models, the spins living at the frontier between A and B have to be “duplicated” to insure that the decomposition induced by the classical spin configurations is indeed a proper Schmidt decom-

position of the RK state. See Ref. 5 for more details.

⁷E. Fradkin and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 050404 (2006).

⁸B. Hsu, M. Mulligan, E. Fradkin, and E.-A. Kim, *Phys. Rev. B* **79**, 115421 (2009).

⁹In the quantum point of view, where one studies the entanglement in a RK wave function, the dominant ($\sim L$) contribution is the boundary (also called “area”) law.

¹⁰The field-theory prediction of Ref. 8 is $r_1(T=T_c) = \ln(2)$ and does not agree with our numerical calculations. Remark: r_1 corresponds to $S_0^{(x)}$ in the notations of Ref. 5.

¹¹I. Affleck and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 161 (1991).

¹² $T_c = 2/\ln(1+\sqrt{2})$ on the square lattice (Refs. 13 and 33) and $T_c = 4/\ln(3)$ on the triangular lattice (Ref. 34).

¹³H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).

¹⁴We also use the property that, for periodic boundary conditions, $\Pi_i \sigma_i^\tau = 1$ in the ground state $|G\rangle$. Since we work in the σ^τ basis,

this reduces by another factor two the number of probabilities to compute.

¹⁵J. Sawada, *SIAM J. Comput.* **31**, 259 (2001).

¹⁶In fact, the analysis of Sec. IV C suggests that $r_n(\mu_c)$ flows to its ferromagnetic boundary condition limit, $\ln(2)$, as soon as $n > 1$.

¹⁷L. Campos Venuti, H. Saleur, and P. Zanardi, *Phys. Rev. B* **79**, 092405 (2009).

¹⁸R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Dover, Mineola, 1982).

¹⁹S. Katsura, *Phys. Rev.* **127**, 1508 (1962).

²⁰M. Levin and X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 110405 (2006).

²¹A. Kitaev and J. Preskill, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 110404 (2006).

²²J. L. Cardy, *Nucl. Phys. B* **324**, 581 (1989).

²³J. Dubail, J. L. Jacobsen, and H. Saleur, *Nucl. Phys. B* **834**, 399 (2010).

²⁴M. A. Metlitski, C. A. Fuertes, and S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **80**, 115122 (2009).

²⁵F. Gliozzi and L. Tagliacozzo, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* (2010), P01002.

²⁶The Rényi entropy can be computed for complex values of n and one can detect possible singularities by analyzing the locations of the its zeros in the complex plane, as was done in Ref. 25 for a different model. However, in our case, such an approach does not seem to shed more light on the $n=1$ issue than the real-axis analysis presented here.

²⁷See Eq. (77) in Ref. 5. We use the following normalization: $R=1$ for free fermions and $R=\sqrt{2}$ at $SU(2)$ symmetric (self-dual) point of the XXZ chain. This corresponds to a Lagrangian $\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi}(\partial_\mu\varphi)^2$, where the field is compactified on a circle of radius R : $\varphi = \varphi + 2\pi R$.

²⁸Mo. Oshikawa, [arXiv:1007.3789](https://arxiv.org/abs/1007.3789) (unpublished).

²⁹P. Calabrese and J. Cardy, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* (2004), P06002.

³⁰C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, *Nucl. Phys. B* **424**, 443 (1994).

³¹V. B. Petkova and J.-B. Zuber, *Phys. Lett. B* **504**, 157 (2001).

³²M. Oshikawa and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2604 (1996).

³³L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).

³⁴R. Houtappel, *Physica (Amsterdam)* **16**, 425 (1950).

Geometric entanglement and Affleck-Ludwig boundary entropies in critical XXZ and Ising chains

Jean-Marie Stéphan,¹ Grégoire Misguich,¹ and Fabien Alet²

¹*Institut de Physique Théorique, CEA, IPhT, CNRS, URA 2306, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

²*Laboratoire de Physique Théorique, IRSAMC, Université de Toulouse–CNRS, F-31062 Toulouse, France*

(Received 17 August 2010; published 11 November 2010)

We study the geometrical entanglement of the XXZ chain in its critical regime. Recent numerical simulations [Q.-Q. Shi, R. Orús, J. O. Fjærestad, and H.-Q. Zhou, *New J. Phys.* **12**, 025008 (2010)] indicate that it scales linearly with system size, and that the first subleading correction is constant, which was argued to be possibly universal. In this work, we confirm the universality of this number, by relating it to the Affleck-Ludwig boundary entropy corresponding to a Neumann boundary condition for a free compactified field. We find that the subleading constant is a simple function of the compactification radius, in agreement with the numerics. As a further check, we compute it exactly on the lattice at the XX point. We also discuss the case of the Ising chain in transverse field and show that the geometrical entanglement is related to the Affleck-Ludwig boundary entropy associated to a ferromagnetic boundary condition.

DOI: 10.1103/PhysRevB.82.180406

PACS number(s): 75.10.Pq, 03.67.Mn, 64.60.fd

I. INTRODUCTION

The geometrical entanglement (GE) is a measure of the multipartite entanglement in a wave function, and quantifies the distance to the closest *unentangled* (separable) state.^{1,2} Starting from a wave function $|\Psi\rangle$ for a quantum lattice model with N sites, one defines a maximal overlap $\Lambda_{\max}$ to be

$$\Lambda_{\max} = \lim_{|\Phi\rangle} |\langle \Phi | \Psi \rangle|, \quad (1)$$

where the maximization is carried on states $|\Phi\rangle$, which are tensor products of single-site states

$$|\Phi\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\Phi_j\rangle.$$

The larger $\Lambda_{\max}$, the closer it is to a product state, and the less entangled $|\Psi\rangle$ is. The GE is then defined in logarithmic form as³

$$E(|\Psi\rangle) = -\log_2 \Lambda_{\max}.$$

This quantity allows to quantify the global multipartite entanglement of the wave function $|\Psi\rangle$, and is useful in the context of quantum computation^{4–6} or state discrimination with local measurements.⁷

The GE has also recently gained interest in many-body and condensed-matter physics.^{8–11} Since it generally scales linearly with the volume (N) of the system one also defines the GE per site

$$\mathcal{E}_N(|\Psi\rangle) = N^{-1} E(|\Psi\rangle).$$

As an example of interesting application, it has been shown that derivatives of $\mathcal{E}_N$ on large systems can be used to detect quantum phase transitions.^{9–11}

In this Rapid Communication we focus on the case of the ground state $|\Psi\rangle = |G\rangle$ of the Hamiltonian of a periodic spin-1/2 XXZ chain

$$\mathcal{H} = - \sum_{j=1}^L (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z), \quad (2)$$

where $L=N$ is the number of sites. We consider the anisotropy parameter in the range $|\Delta| < 1$ so that the system is gapless (critical). In Ref. 12 it was shown numerically that the GE per spin admits the following asymptotic expansion:

$$\mathcal{E}_L(\Delta) = \mathcal{E}_\infty(\Delta) + b(\Delta)/L + O(1/L^2). \quad (3)$$

The purpose of this Rapid Communication is to show that the term $b(\Delta)$ appearing in this expansion can be computed analytically in a simple way. Using results of boundary conformal field theory (CFT),¹³ we relate it to an Affleck-Ludwig (AL) boundary entropy.¹⁴

II. RELATION TO THE AL BOUNDARY ENTROPY

The product state $|\Phi\rangle_{\max}$ that maximizes the overlap in Eq. (1) with the ground state of Eq. (2) is known to be a spin configuration where all spins are parallel¹⁵ and lie in the XY plane

$$|\Phi\rangle_{\max} = |\rightarrow \rightarrow \dots \rightarrow\rangle = 2^{-L/2} \sum_{\{\sigma_j^z = \pm 1\}} |\sigma_1^z \sigma_2^z, \dots, \sigma_L^z\rangle = |\text{free}\rangle_z.$$

Computing $b(\Delta)$ amounts to calculating a subleading contribution to the scalar product ${}_z\langle \text{free} | G \rangle$. To do this, we adopt a transfer-matrix point of view where $|G\rangle$ is interpreted as the dominant eigenstate of the transfer matrix M of some two-dimensional classical system (six-vertexlike in our case). The classical model is defined on a cylinder of circumference L and height $L_y \gg L$ with free boundary conditions for the spins (or the six-vertex arrows) at both edges. In this geometry the free energy $F = -\ln {}_z\langle \text{free} | M^{L_y} | \text{free} \rangle_z$ can be written¹⁴ as $F = F_{\text{bulk}} + 2F_{\text{boundary}}$ with $F_{\text{bulk}} \sim LL_y$ and $F_{\text{boundary}} = aL + s + o(1)$. a is the boundary free-energy per unit length, and s is a subleading term in the boundary free energy.

It is easy to check that $F_{\text{boundary}} = -\ln {}_z\langle \text{free} | G \rangle$ in the limit $L_y \gg L$, where only the state $|G\rangle$ contributes. So, $b(\Delta)$ is sim-

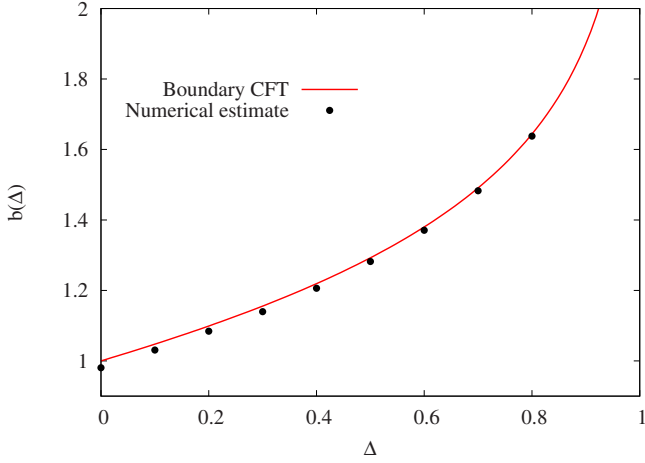


FIG. 1. (Color online) $b(\Delta)$ for the XXZ chain, defined in Eq. (3), as a function of the anisotropy parameter Δ . Symbols are numerical data of Ref. 12 while the solid curve is the field-theoretical calculation [Eqs. (5) and (6)]. At $\Delta=0$, an exact lattice calculation shows that $b=1$.

ply related to the constant s in the boundary free energy

$$b(\Delta) = -\frac{2}{\ln 2} s. \quad (4)$$

For critical systems s is universal and may therefore be computed in the continuum limit. In the XXZ chain (equivalently six-vertex case), it corresponds to a compactified free field with the following (Euclidian) Lagrangian density:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} (\partial_\mu \phi)^2,$$

$$\phi \equiv \phi + 2\pi R.$$

The compactification radius R is related to the decay exponents of the correlation functions and to the Luttinger parameter. In the case of Eq. (2), R is a known function of Δ (Ref. 16)

$$R(\Delta) = \sqrt{\frac{2}{\pi} \arccos(\Delta)}. \quad (5)$$

As well known in boundary CFT,¹³ free boundary condition for the spins (or arrows) are encoded in the continuum limit by a Neumann boundary condition for the free field. So, the boundary entropy s is in fact the AL (Ref. 14) boundary entropy s_N associated to Neumann boundary condition. Its value is known¹⁷ and depends solely on the compactification radius

$$s_N = \ln(g_N), \quad g_N = \sqrt{R/2},$$

where g_N is the so-called “universal noninteger ground-state degeneracy”¹⁴ or “ g factor.” Combining this with Eq. (4), our prediction for $b(\Delta)$ is

$$b(\Delta) = 1 - \log_2 R(\Delta). \quad (6)$$

As can be seen in Fig. 1, this result matches very well the numerical data of Ref. 12. The slight discrepancy for small Δ

is likely due to finite-size effects and/or finite-bond dimension errors in the matrix-product representation of the ground state. This can be confirmed by an exact microscopic calculation¹³ of $b(\Delta)$ at the free fermion point $\Delta=0$.

The free fermion representation of the chain at $\Delta=0$ allows to obtain¹⁸ $\mathcal{E}_L$ on the lattice, as done in Ref. 10

$$\mathcal{E}_L = 1 + \frac{2}{L \ln 2} \sum_{j=1}^{L/4} \ln \tan \left[\frac{(2j-1)\pi}{2L} \right]. \quad (7)$$

From this one gets the expansion in powers of $1/L$ using the Euler-Maclaurin formula.¹⁹ The result is

$$\mathcal{E}_L = \mathcal{E}_\infty + \frac{b}{L} + O(1/L^2),$$

$$\mathcal{E}_\infty = 1 - \frac{2K}{\pi \ln 2} \simeq 0.158733,$$

$$b = 1,$$

where K is Catalan’s constant. The result can be compared with the numerical estimations of Ref. 12: $\mathcal{E}_\infty \simeq 0.1593$ and $b \simeq 0.98$. As expected, the exact lattice calculation confirms the field theory prediction at $\Delta=0$, namely, $b(\Delta=0)=1$ [Eq. (6)].

It is also worth noticing that the calculation extends to finite magnetizations of the chain, and simply amounts to move the fermion density away from $1/2$. In such a case one observes that $b(\Delta=0)=1$ is independent of the magnetization. This again matches the field theory result, since, for $\Delta=0$, the compactification radius R is indeed independent of the magnetization.

III. CRITICAL ISING CHAIN

The GE for the periodic Ising chain in transverse field at the critical point has also been considered numerically in Ref. 12. The Hamiltonian is now

$$\mathcal{H} = - \sum_{j=1}^L \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sum_{j=1}^L \sigma_j^z \quad (8)$$

and the product state which maximizes the overlap turns out to be a tilted configuration¹⁰

$$|\Phi\rangle_{\max} = \bigotimes_{j=1}^N [\cos(\xi/2) |\uparrow_j\rangle + \sin(\xi/2) |\downarrow_j\rangle],$$

$$\xi \simeq 0.897101, \quad (9)$$

where $|\uparrow_j\rangle$ and $|\downarrow_j\rangle$ are the eigenstates of σ_j^z .²⁰ The authors of Ref. 12 found numerically in this case $b \simeq 1.016$. We will now give an argument based on boundary CFT, similar to that presented in the case of the XXZ chain, which shows that $b=1$.

Again, we wish to interpret the scalar product $\Lambda_{\max}$ appearing in the GE as a boundary contribution to a classical two-dimensional free energy. When $|G\rangle$ is the ground state of

Eq. (8), the corresponding classical model is a critical two-dimensional Ising model. If we had to project $|G\rangle$ onto a state where all spins would point in the x direction (corresponding to an angle $\xi = \pm \pi$), it would correspond to a fixed ferromagnetic boundary condition for the Ising model. On the other hand, if we had to project onto a state with all the spins pointing in the z direction ($\xi=0$), it would correspond to a free boundary condition (as in the case of the XXZ chain). We therefore see that the tilted state of Eq. (9) somewhat corresponds to a combination of free and fixed boundary conditions for the classical model. But the important point is that $\xi \neq 0$. For this reason, $|\Phi\rangle_{\max}$ breaks the $\mathbb{Z}_2$ symmetry of the model, which exchanges the x and $-x$ directions. In such situation, where the boundary condition imposes a nonzero magnetization at the edge, the long-distance and universal properties of the boundary will be equivalent to that of a system with fixed ferromagnetic boundary condition (all spins pointing in the x direction).¹⁴ In other words, the constant term s in the boundary free energy will be the same for the tilted boundary condition and for the ferromagnetic one. In this case, the AL entropy s_{fixed} is known to be $-\frac{1}{2} \ln 2$ (corresponding to a g factor $g_{\text{fixed}} = 1/\sqrt{2}$).¹⁴ As conjectured in Ref. 12, we therefore obtain $b=1$. This argument can also be confirmed using the exact formula of Ref. 10 for the GE, and then applying the Euler-Maclaurin formula.²¹

IV. RELATION WITH RÉNYI ENTROPIES FOR ROKHSAR-KIVELSON IN 2+1 DIMENSIONS

As we have seen in Sec. II, the GE for a critical XXZ chain can be expressed using a sum of scalar products with all the spin configurations $|i\rangle$ of the z basis

$$Z = 2^{L/2} \Lambda_{\max} = \sum_i \langle i|G\rangle.$$

Z can be seen as a partition function and generalized by introducing a fictitious inverse temperature $\beta > 0$ (Ref. 22)

$$Z(\beta) = \sum_i (\langle i|G\rangle)^\beta. \quad (10)$$

It turns out that $Z(\beta)$ is related to Rényi entanglement entropies of a semi-infinite cylinder in some two-dimensional

Rokhsar-Kivelson wave functions, as studied in Refs. 23 and 24 (the Rényi parameter being $n = \beta/2$). Using numerical and field-theoretical approaches, it was found that $\ln Z(\beta)$ scales as $\ln Z(\beta) = aL + \gamma$, where the constant term γ is universal and given by

$$\gamma = (1 - \beta/2) \ln R + \frac{1}{2} \ln(\beta/2). \quad (11)$$

So, for the XXZ chain, the GE appears to be a special case $\beta=1$ of this partition function.

We finally comment on the limit $\beta \rightarrow \infty$, where only the spin configuration $|i\rangle_{\max}$ of the z basis which have the largest weight in $|G\rangle$ contributes to $Z(\beta)$. For the present XXZ chain, $|i\rangle_{\max}$ is the ferromagnetic state $|i\rangle_{\max} = |\uparrow \cdots \uparrow\rangle$.²³ Taking $\beta \rightarrow \infty$ in Eqs. (10) and (11) we get $\ln \langle \uparrow \cdots \uparrow | G \rangle = -\frac{1}{2} \ln R$ (omitting the extensive term). So, we see that the scalar product of $|G\rangle$ with both (i) the uniform configuration where spins point in the z direction and (ii) the configuration where spins point in the x direction, have very similar subleading terms related to the logarithm of the compactification radius. In the CFT language, the former scalar product [appearing in $Z(\beta=\infty)$] corresponds to a Dirichlet boundary condition for the free field, as opposed to Neumann for the scalar product appearing in the GE and $Z(\beta=1)$.

V. CONCLUSION

In conclusion, we have related subleading terms of the geometrical entanglement of the critical XXZ and Ising spin chains to their AL boundary entropies, showing that this correction is universal. Whether such universal behavior in the scaling of the geometrical entanglement (or of the scalar product of the ground state with a given separable state in general) can be found for other physical systems is an open issue that is worth pursuing.

ACKNOWLEDGMENTS

We wish to thank Jérôme Dubail and Vincent Pasquier for stimulating discussions. This work is supported by the French ANR program under Grant No. ANR-08-JCJC-0056-01 (F.A.).

¹H. Barnum and N. Linden, *J. Phys. A* **34**, 6787 (2001).

²T.-C. Wei and P. M. Goldbart, *Phys. Rev. A* **68**, 042307 (2003).

³T.-C. Wei, M. Ericsson, P. M. Goldbart, and W. J. Muro, *Quantum Inf. Comput.* **4**, 252 (2004).

⁴O. Biham, M. A. Nielsen, and T. J. Osborne, *Phys. Rev. A* **65**, 062312 (2002).

⁵M. Van den Nest, W. Dür, A. Miyake, and H. J. Briegel, *New J. Phys.* **9**, 204 (2007).

⁶D. Gross, S. T. Flammia, and J. Eisert, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 190501 (2009).

⁷M. Hayashi, D. Markham, M. Murao, M. Owari, and S. Virmani, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 040501 (2006).

⁸R. G. Unanyan, C. Ionescu, and M. Fleischhauer, *Phys. Rev. A* **72**, 022326 (2005); R. Orús, S. Dusuel, and J. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 025701 (2008); A. Botero and B. Reznik, *arXiv:0708.3391* (unpublished); R. Orús, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 130502 (2008).

⁹R. Orús and T.-C. Wei, *Phys. Rev. B* **82**, 155120 (2010).

¹⁰T.-C. Wei, D. Das, S. Mukhopadhyay, S. Vishveshwara, and P. Goldbart, *Phys. Rev. A* **71**, 060305(R) (2005).

¹¹C.-Y. Huang and F.-L. Lin, *Phys. Rev. A* **81**, 032304 (2010).

¹²Q.-Q. Shi, R. Orús, J. O. Fjærestad, and H.-Q. Zhou, *New J. Phys.* **12**, 025008 (2010).

¹³For introductions on boundary conformal field theory, see J.

Cardy, *Encyclopedia of Mathematical Physics* (Elsevier, New York, 2006); *Conformal Field Theory and Statistical Mechanics*, Proceedings of Les Houches Session LXXXIX (Oxford University Press, 2010); P. Di Francesco, P. Mathieu, and D. Sénéchal, *Conformal Field Theory* (Springer-Verlag, Berlin, 1997). The main ideas were introduced in Ref. 25.

¹⁴I. Affleck and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 161 (1991).

¹⁵This was demonstrated numerically in Ref. 9. Notice, however, that in this reference the antiferromagnetic chain was considered. Therefore, the result in this case is $|\Phi\rangle_{\max} = |\rightarrow \leftarrow \rightarrow \leftarrow \dots \rightarrow \leftarrow\rangle$.

¹⁶T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford University Press, New York, 2004); D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).

¹⁷P. Fendley, H. Saleur, and N. Warner, *Nucl. Phys. B* **430**, 577 (1994).

¹⁸For simplicity we only consider the case $L \equiv 0 \pmod{4}$. Notice that using Eq. (10), this result can also be interpreted (and recovered) as the partition function of a discretized gas of particles on an annulus interacting through a 2D Coulomb potential (discretized Dyson gas) at inverse temperature $\beta=1$. See Refs. 23 and 26 for more details.

¹⁹ b can easily be deduced from the constant in the asymptotic expansion of $\sum_{j=1}^m \ln \tan[(j-1/2)\pi/(8m)]$. Then, a way to pro-

ceed is to cut the sum in two: $\sum_{j=1}^m = \sum_{j=1}^{\sqrt{m}} + \sum_{j=\sqrt{m}+1}^m$. In the first sum, the tangent can be linearized so as to apply Stirling's formula. The asymptotics of the second sum can be accessed using the Euler-Maclaurin formula. The dominant term $\mathcal{E}_\infty$ has been previously computed in Ref. 10.

²⁰Introducing $f(\xi) = \sqrt{3} \cos^2(\xi/2) - 2$, the optimal angle ξ is in the thermodynamic limit solution of $\cos(\xi/2)f(\xi) - \frac{2}{\pi} \operatorname{arctanh}\left(\frac{f(\xi)}{\cos(\xi/2)}\right) = 0$.

²¹For example, when L is even $\langle \Phi | G \rangle = \Pi_k [\sin^2(\xi/2) \sin(k/4) + \cos^2(\xi/2) \cot(k/2) \cos(k/4)]$, where $k = (2m+1)\pi/L$, $m \in \{0, \dots, L/2-1\}$. The subleading constant in the asymptotic expansion of $-2 \log_2 \langle \Phi | G \rangle$ can be shown to be $b(\xi) = \begin{cases} 0 & \xi=0 \pmod{2\pi} \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$. In the boundary CFT language, $\xi=0$ corresponds to the free boundary state ($s_{\text{free}}=0$), which is unstable under the renormalization-group flow.

²²With our (ferromagnetic) convention for the XY part of the interactions in the XXZ Hamiltonian, all the $\langle i | G \rangle$ are positive.

²³J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, *Phys. Rev. B* **80**, 184421 (2009).

²⁴J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier, *Phys. Rev. B* **82**, 125455 (2010).

²⁵J. L. Cardy, *Nucl. Phys. B* **240**, 514 (1984); **324**, 581 (1989).

²⁶M. Gaudin, *J. Phys. (France)* **34**, 511 (1973).

LETTER

Universal behavior of a bipartite fidelity at quantum criticality

Jérôme Dubail¹ and Jean-Marie Stéphan²

¹ Department of Physics, Yale University, New Haven, CT 06520, USA

² Institut de Physique Théorique, CEA, IPhT, CNRS, URA 2306,
F-91191 Gif-sur-Yvette, France

E-mail: jerome.dubail@yale.edu and jean-marie.stephan@cea.fr

Received 9 January 2011

Accepted 10 March 2011

Published 28 March 2011

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2011/L03002

[doi:10.1088/1742-5468/2011/03/L03002](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2011/03/L03002)

Abstract. We introduce the (logarithmic) bipartite fidelity of a quantum system $A \cup B$ as the (logarithm of the) overlap between its ground state wavefunction and the ground state that one would obtain if the interactions between two complementary subsystems A and B were switched off. We argue that it should typically satisfy an area law in dimension $d > 1$. In the case of one-dimensional quantum critical points (QCP) we find that it admits a universal scaling form, $\sim \ln \ell$, where ℓ is the typical size of the smaller subsystem. The prefactor is proportional to the central charge c and depends on the geometry. We also argue that this quantity can be useful for locating quantum phase transitions, allows for a reliable determination of the central charge, and in general exhibits various properties that are similar to the entanglement entropy. Like the entanglement entropy, it contains subleading universal terms in the case of a 2D conformal QCP.

Keywords: conformal field theory (theory), spin chains, ladders and planes (theory), quantum phase transitions (theory), entanglement in extended quantum systems (theory)

ArXiv ePrint: [1010.3716](https://arxiv.org/abs/1010.3716)

J. Stat. Mech. (2011) L03002

Contents

1. Introduction	2
2. Bipartite fidelity	3
3. The free energy and the area law	3
4. 1D conformal QCPs	4
5. The conformal field theory derivation	5
6. Numerical checks	6
7. Time evolution after a local quench	7
8. 2D conformal QCPs	8
9. Conclusion	8
Acknowledgments	9
References	9

1. Introduction

A major challenge in the study of quantum many-body systems in condensed matter physics is the understanding and characterization of new exotic phases of matter, such as quantum critical or topological phases. For this purpose, various quantities and concepts have been introduced, some coming from quantum information theory. Amongst them, one of the most heavily studied is the entanglement entropy (EE) [1], defined through a bipartition of a total system $A \cup B$, usually in a pure state $|\psi\rangle$:

$$S = -\text{Tr } \rho_A \ln \rho_A, \quad \rho_A = \text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (1)$$

The EE of a ground state is known to be universal at the one-dimensional quantum critical point (QCP) [2]–[4], and the leading term allows for an accurate determination of the central charge. In higher dimensions $d > 1$, it obeys an area law (with possible logarithmic corrections [5]): if L is the typical size of the smaller subsystem, then S scales as L^{d-1} . In this case, subleading terms [6]–[10] encode universal features of the system, characterizing quantum criticality or topological order. Despite all of these theoretical works, connecting the EE to experimentally measurable quantities remains a formidable task. One reason for that is that characterization of entanglement in a many-particle system generically requires the measurement of a prohibitively large number of observables.

A different class of quantities is the one of overlaps, or fidelities. The idea is perhaps more intuitive and can be traced back to Anderson’s orthogonality catastrophe [11]. Let $H(\lambda)$ be a Hamiltonian which depends on a physical parameter λ that can be varied. If $|\lambda\rangle$ is its ground state, the fidelity is

$$f(\lambda, \lambda') = |\langle\lambda|\lambda'\rangle|^2. \quad (2)$$

Close to a QCP the fidelity susceptibility $\chi(\lambda) = (\partial_{\lambda'}^2 f(\lambda, \lambda'))_{\lambda'=\lambda}$ diverges, so this quantity can be used to detect quantum phase transitions [12]–[14]. The scaling behavior of the fidelity has been studied in various systems both analytically and numerically [15, 16]. Overlaps are also interesting when considering time evolutions. Starting from an initial state $|\Psi(0)\rangle$, one can ask what the overlap of the wavefunction with the initial state after time t is. The Loschmidt echo $\mathcal{L}(t) = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2$ [17, 18] has been studied in connection with NMR experiments [19], and also in the context of quantum criticality [20, 21].

In this letter, we introduce an overlap which shares some common properties with the EE (in particular we keep the idea of cutting the system into two parts), despite being conceptually simpler. We call it the logarithmic bipartite fidelity (LBF), and claim that it provides valuable insights into quantum critical phenomena. We shall see in particular that the LBF obeys an area law in $d > 1$, can be useful for locating QCPs, and has a universal scaling form at one-dimensional QCPs that involves the central charge c , much in the spirit of the EE.

2. Bipartite fidelity

Let us consider an extended quantum system $A \cup B$ described by the Hamiltonian

$$H = H_A + H_B + H_{A \cup B}^{(I)} \quad (3)$$

where $[H_A, H_B] = 0$ and $H_{A \cup B}^{(I)}$ contains all the interaction between A and B . We denote by $|A\rangle$ (resp. $|B\rangle$) the ground state of H_A (resp. H_B), by $|A \otimes B\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle$ the ground state of $H_A + H_B$, and by $|A \cup B\rangle$ the ground state of H . We introduce the bipartite fidelity $|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2$, the overlap between the ground state of the total Hamiltonian H , and the ground state of a Hamiltonian $H_A + H_B$ where all interactions between A and B have been switched off. A more physical way of looking at this quantity is to interpret it as a probability of measuring a given energy after a local quantum quench. Let us imagine that the system is initially disconnected (i.e. it is in the ground state of $H_A + H_B$), and that at time $t = 0$ the interaction between A and B is instantaneously switched on. Then, at time $t > 0$, the system evolves with the total Hamiltonian (3). If one measures the energy of the system just after the quench, the probability of finding the ground state energy is given by $|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2$, which is the bipartite fidelity. For later convenience, we consider (minus) the logarithm of this quantity

$$\mathcal{F}_{A,B} = -\ln(|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2), \quad (4)$$

and call it logarithmic bipartite fidelity (LBF). The symbol $\mathcal{F}_{A,B}$ is chosen because it can be interpreted as a free energy in a classical system.

3. The free energy and the area law

The LBF is nothing but a linear combination of free energies of different $d+1$ -dimensional systems. Indeed, in a Euclidean picture, the ground state $|0\rangle$ of a Hamiltonian H can be seen as the result of an infinite (imaginary) time evolution starting from any state $|s\rangle$, provided $\langle 0 | s \rangle \neq 0$:

$$e^{-\tau H} |s\rangle \underset{\tau \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-\tau E_0} |0\rangle \langle 0 | s \rangle. \quad (5)$$

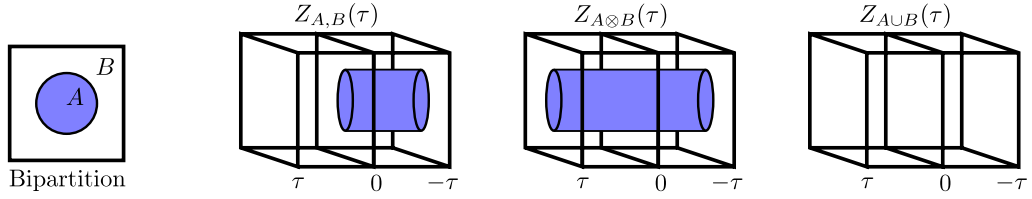


Figure 1. Bipartition of a 2D system (on the left), along with the three partition functions of equation (6) in $d + 1 = 3$ dimensions. Region A is in blue when decoupled from B .

E_0 is the ground state energy. Making use of this, our scalar product can be expressed as a ratio of classical $d + 1$ -dimensional partition functions:

$$\langle A \cup B | A \otimes B \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{Z_{A,B}(\tau)}{\sqrt{Z_{A \cup B}(\tau) Z_{A \otimes B}(\tau)}}. \quad (6)$$

$Z_{A \otimes B} = \langle s | e^{-2\tau(H_A + H_B)} | s \rangle$ is the partition function corresponding to two independent systems A and B , $Z_{A \cup B} = \langle s | e^{-2\tau(H_A + H_B + H_{A \cup B}^I)} | s \rangle$ is the partition function of the total system, and $Z_{A,B} = \langle s | e^{-\tau(H_A + H_B)} e^{-\tau(H_A + H_B + H_{A \cup B}^I)} | s \rangle$ corresponds to the case where A and B are decoupled from $-\tau$ to 0 , and coupled afterward (see the $d = 2$ example in figure 1). In terms of free energies $f = -\ln Z$, the LBF is then

$$\mathcal{F}_{A,B} = 2f_{A,B} - f_{A \otimes B} - f_{A \cup B}. \quad (7)$$

The different terms in (7) are expected to be extensive in the thermodynamic limit. There is a bulk free energy f_{d+1} per unit volume, a ‘surface’ free energy f_d , and a ‘line’ free energy f_{d-1} . The bulk and surface energies are canceled out by the linear combination, and we get

$$\mathcal{F}_{A,B} = f_{d-1} L^{d-1} + o(L^{d-1}), \quad (8)$$

where L^{d-1} is the ‘area’ of the boundary between A and B in the initial d -dimensional system. This is the area law for the LBF. We expect this to be true for generic systems, as is the case usually for the EE; however like for the EE [5], exceptions are possible.

4. 1D conformal QCPs

In general, $\mathcal{F}_{A,B}$ should be finite away from a QCP, because the correlation length ξ is small and the two ground states are very close to each other, except on a thin region of typical size ξ . At a QCP however, this is no longer true and $\mathcal{F}_{A,B}$ can become large. As the calculation of the overlap boils down to a free energy, the scaling behavior should be controlled by the conformal symmetry only. This is indeed the case, and this result constitutes the central point of our work. The geometries considered are shown in table 1, along with the corresponding formulas that we derived for the bipartite fidelity. For example, geometry (a) consists in a finite chain of length ℓ connected to another finite chain of length $L - \ell$. When $\ell \ll L$, the scaling of the fidelity takes the following simple form:

$$\mathcal{F}_{A,B} \sim \frac{c}{8} \ln \ell. \quad (9)$$

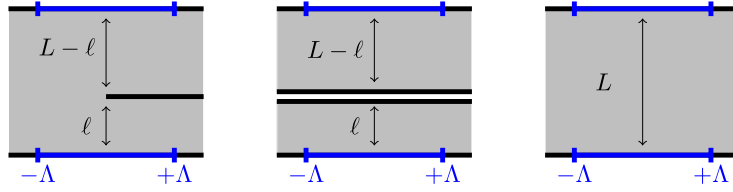


Figure 2. The three geometries giving the terms $f_{A,B}$, $f_{A \otimes B}$ and $f_{A \cup B}$ for the case (a) in table 1. The blue intervals $[-\Lambda, +\Lambda]$ are used for the regularization.

Table 1. Geometries considered, along with the leading term for the two LBFs ($\mathcal{F}_a$ and $\mathcal{F}_b$), as a function of L and $x = \ell/L$.

Geometry (a)	Geometry (b)
$\mathcal{F}_a \sim \frac{c}{8} [\ln L + g_a(x) + g_a(1-x)]$	$\mathcal{F}_b \sim \frac{c}{4} [\ln L + g_b(x) + g_b(1-x)]$
$g_a(x) = \frac{3-3x+2x^2}{3(1-x)} \ln x$	$g_b(x) = \frac{3-6x+4x^2}{6(1-x)} \ln x$

This result is similar to the one for the EE [4]: $S \sim (c/6) \ln \ell$. Another simple result is for the symmetric case $\ell = L/2$, where

$$\mathcal{F}_{A,B} \sim \frac{c}{8} \ln L, \quad (10)$$

whereas the EE behaves as $S \sim (c/6) \ln L$ [4]. There is no general relation between the LBF and the EE though. Our analytical results (table 1) do not match the ones for the EE, $S \sim (c/6) \ln[(L/\pi) \sin(\pi\ell/L)]$, which can be traced back to the fact that the Cardy–Calabrese derivation [4] of the EE involves a local twist operator, whereas the LBF cannot be expressed as a correlator of a local field. The two quantities have similar qualitative behavior however.

5. The conformal field theory derivation

The results in table 1 assume that the boundary conditions at the boundaries of $A \cup B$ (if any), A and B are conformal boundary conditions [22]. Moreover, for simplicity, we assume that these boundary conditions are the same everywhere. For different boundary conditions, the scaling dimensions of the different boundary condition changing operators [22] would modify our results [23]. With those two assumptions at hand, the two special cases of geometry (a) given in (9)–(10) are straightforward applications of the celebrated Cardy–Peschel formula [24]: in the three geometries shown in figure 2 we have one corner with angle 2π and several corners with angle 0 at infinity. The contributions at infinity cancel, and we are left with the contribution of the corner with angle 2π , which gives a total factor of $2 \times (c/16) \ln \ell$ (or $2 \times (c/16) \ln L$).

In the general case (a) in table 1, the calculation goes as follows. $f_{A,B}$, $f_{A \otimes B}$ and $f_{A \cup B}$ in (7) are the free energies in the geometries shown in figure 2. Let $w = x + iy$ be the complex coordinate such that the lower (resp. upper) boundary corresponds to $y = \Im w = 0$ (resp. $y = L$). Let us consider the mapping $w \mapsto w + i\delta\ell$ if $\Im w \in (0, L)$, and $w \mapsto w$ otherwise. Such a mapping keeps L fixed but changes ℓ into $\ell + \delta\ell$. The variation of the free energy can be expressed in terms of the T_{yy} component of the stress tensor as [22]

$$\delta f_{A,B} = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{\delta\ell}{2\pi} \int_{-\Lambda}^{+\Lambda} \left[\langle T_{yy}^{(y=0)} \rangle - \langle T_{yy}^{(y=L)} \rangle \right] dx, \quad (11)$$

and there are similar expressions for $f_{A \otimes B}$ and $f_{A \cup B}$. Each of these expressions diverges when $\Lambda \rightarrow \infty$, but the combination (7) is finite. To evaluate $\delta f_{A,B}$ one needs the stress tensor in the pants-like geometry (figure 2 left). We use a conformal mapping $z \mapsto w(z)$ from the upper half-plane $z \in \mathbb{C}$, $\Im z > 0$ to the pants-like geometry

$$w(z) = \frac{\ell}{\pi} \ln(1+z) + \frac{L-\ell}{\pi} \ln\left(z \frac{\ell}{L-\ell} - 1\right). \quad (12)$$

In the half-plane, one has $\langle T(z) \rangle = 0$, so using the transformation law for the stress tensor [22] we get $\langle T(w) \rangle = -c/12(dw/dz)^{-2}\{w, z\}$, where $\{w, z\} = (w'''/w') - (3/2)(w''/w')^2$ is the Schwarzian derivative of w with respect to z . Since $\langle T_{yy} \rangle = \langle T(w) \rangle + \langle \bar{T}(\bar{w}) \rangle$, we find

$$\frac{12\pi}{c} \frac{\delta f_{A,B}}{\delta\ell} = \int_{x_1}^{x_2} dz \{w, z\} \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-1} - \int_{x_3}^{x_4} dz \{w, z\} \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-1} \quad (13)$$

where $w(x_1) = \Lambda$, $w(x_2) = -\Lambda$, $w(x_3) = \Lambda + iL$, $w(x_4) = -\Lambda + iL$. In a strip of width ℓ the stress tensor is [22] $\langle T(w) \rangle = -(\pi^2 c/24\ell^2)$, so $\delta f_{A \otimes B} = 2\Lambda(\pi c \delta\ell/24)(1/(L-\ell)^2 - 1/\ell^2)$ and $\delta f_{A \cup B} = 0$. Finally, introducing the aspect ratio $x = \ell/L$ and taking the $\Lambda \rightarrow \infty$ limit in the sum (7), we get the following equation for $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{A,B}$:

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta x} = \frac{c}{6} \left[\frac{x^2(2-x)}{2(1-x)^2} \ln x + \frac{x^2-1}{2x} \ln(1-x) + \frac{1}{4} \frac{x-2}{1-x} \right] - (x \rightarrow 1-x).$$

This can be integrated to give the formula (a) in table 1. For the periodic case (b), we need a conformal transformation which maps the upper half-plane onto a cylinder with two slits:

$$w(z) = \frac{L}{2\pi} \ln\left(1 + \frac{\ell}{L}(z^2 - 1)\right) - \frac{\ell}{L} \ln z^2, \quad (14)$$

and the result follows from a similar calculation.

6. Numerical checks

We study the XY chain in transverse field, with boundary conditions $\sigma_{L+1}^x = \sigma_{L+1}^y = 0$:

$$H = - \sum_{i=1}^L \left(\frac{1+r}{2} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{1-r}{2} \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + h \sigma_i^z \right). \quad (15)$$

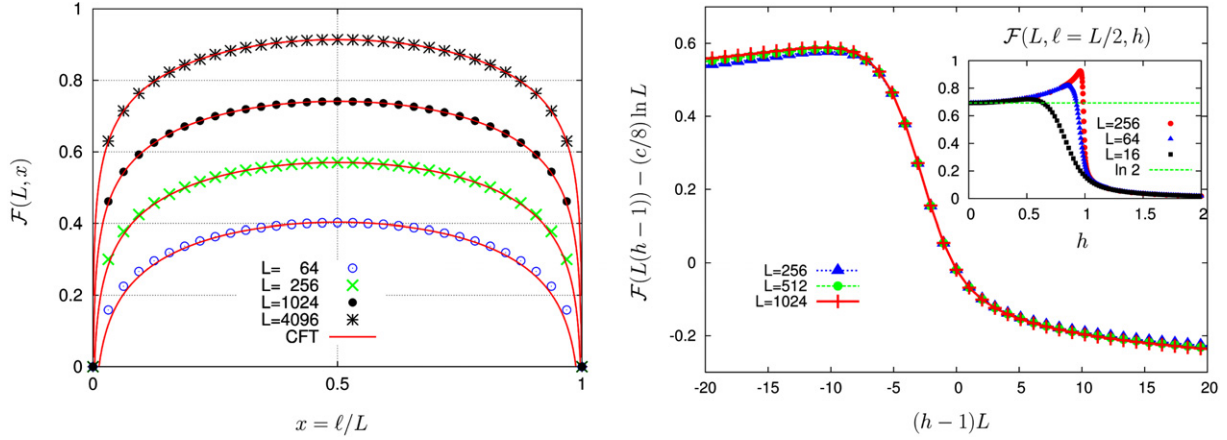


Figure 3. Left panel: XX chain numerical results for the LBF $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{A,B}$ in geometry (a). Right panel: geometry (a) with $\ell = L/2$ for the ICTF. The rescaled LBF $\mathcal{F}(L(h-1)) - (c/8) \ln L$ can be seen to collapse onto a single universal curve in the vicinity of the critical point. Inset: $\mathcal{F}(L, h)$ as a function of h .

Two cases are of special interest: $r = 0$ and $h = 0$ gives the critical XX chain, in the universality class of the free boson ($c = 1$), whereas $r = 1$ gives the Ising chain in transverse field (ICTF), critical at $h = 1$ with $c = 1/2$. Using a Jordan–Wigner transformation, H_A , H_B and $H_{A \cup B}$ can be recast as free fermion Hamiltonians, and diagonalized by a Bogoliubov transformation. Keeping track of the changes of basis, the overlap can be expressed as a fermionic correlator, and reduced to a $L \times L$ determinant after some algebra.

Results for the XX chain are shown in figure 3 for geometry (a), and agree very well with the CFT prediction. We also checked our formula for geometry (b).

Results for the overlap as a function of h in the ICTF are also shown in figure 3. The quantum phase transition at $h = 1$ can be clearly seen, even with relatively small system sizes. In the vicinity of the critical point, the correlation length is known to diverge as $\xi \sim |h - 1|^{-1}$, and the rescaled overlaps can be made to collapse onto a universal curve. Like for the EE [25], we also have the exact relation $\mathcal{F}^{(XX)}(L, \ell) = 2\mathcal{F}^{(\text{Ising})}(L/2, \ell/2, h = 1)$ on the lattice.

7. Time evolution after a local quench

Let us consider again the system in table 1 (geometry a). It is prepared at time $t = 0$ in the state $|A \otimes B\rangle$. Then for $t > 0$ the two parts A and B interact, and the system $A \cup B$ evolves with the total Hamiltonian (3). It is well known that the EE for such a system grows as [26] $S \sim (c/3) \ln t$ for $a \ll v_F t \ll \ell, L$ (a is the lattice spacing and v_F the Fermi velocity). This logarithmic growth has given rise to speculations about a possible relation between the EE and the statistics of fluctuations of the current between the two parts in certain fermionic systems [27], which would open the route to an experimental measure of the EE. Here we stress the fact that the time-dependent LBF grows logarithmically as well. Actually, the bipartite fidelity in that case is nothing but a Loschmidt echo

$$\mathcal{L}(t) = |\langle A \otimes B | e^{iHt} | A \otimes B \rangle|^2 \quad (16)$$

so the LBF is $\mathcal{F}_{A,B}(t) = -\ln \mathcal{L}(t)$. Its universal behavior can be derived in CFT as follows. In imaginary time the scalar product $\langle A \otimes B | e^{-\tau H} | A \otimes B \rangle$ is the partition function of a 2D statistical system in a strip with two slits separated by a distance $v_F \tau$. In the limit $v_F \tau \ll \ell, L$ the two slits almost touch each other. Again, the Cardy–Peschel formula shows that the contribution to the free energy of each of these corners scales as $(c/16) \ln v_F \tau$. The LBF behaves then as $\mathcal{F}_{A,B}(\tau) \sim (c/4) \ln |\tau|$. Going back to real time $\tau \rightarrow \epsilon - it$, we find

$$\mathcal{F}_{A,B}(t) \sim \frac{c}{8} \ln \left(1 + \frac{t^2}{\epsilon^2} \right) \sim \frac{c}{4} \ln t. \quad (17)$$

8. 2D conformal QCPs

As discussed before, in 2D the bipartite fidelity should scale linearly with the system size $\mathcal{F} = f_1 L + o(L)$, where f_1 depends on the microscopic details of the theory. Universal quantities, if present, have to be looked for in subleading corrections. We consider the simple example of critical quantum dimer wavefunctions, whose amplitudes are given by the Boltzmann weights of a 2D classical dimer model. In the continuum limit this wavefunction is related to a free boson CFT with compactification radius R [28]³. For the geometry of a cylinder of height $L_y \gg L_x$ cut into two parts (see [10]), the LBF can be expressed using classical partition functions for the dimers [10], $\mathcal{F} = \ln Z^{\text{DD}}(L_x, L_y) - 2 \ln Z^{\text{DD}}(L_x, L_y/2)$. D stands for Dirichlet and encodes the conformal invariant boundary condition at both end of the cylinders in the continuum limit. The first subleading term is a constant related to the (Dirichlet) Affleck–Ludwig boundary entropy [29] s_D computed in [30]:

$$\mathcal{F} \sim f_1 L - 2s_D = f_1 L + \ln R. \quad (18)$$

It would certainly be interesting to study this idea in more complicated models.

As is the case for the EE [6], we also speculate that subleading terms in the LBF might be used to identify topological order. For certain trial wavefunctions, such as the Rokhsar–Kivelson triangular lattice quantum dimer and Levin–Wen string net wavefunctions, the LBF is nothing but the $n \rightarrow \infty$ Rényi entropy. Then the arguments in [6] would yield the same subleading constant in the LBF and in the EE. Another way of looking at this would be to compare the eigenstate of the reduced density matrix associated with its largest eigenvalue to the actual ground state of the physical Hamiltonian H_A . For a generic Hamiltonian there is no reason why there should be any relation between those two states. However, for special Hamiltonians associated with trial wavefunctions, we speculate that they might be closely related to each other. We leave this important open question for future studies.

9. Conclusion

We have introduced the LBF of an extended quantum system $A \cup B$, and studied some of its properties. We have shown in particular that it generically obeys an area law, and exhibits universal behavior at 1D and 2D QCPs, like the EE. We note that its simple definition

³ We use the conventions of [10] to define R .

makes it easier to grasp intuitively than the EE, and convenient to study using standard analytical and numerical methods. This could be particularly useful in dimensions $d > 1$, where quantum Monte Carlo algorithms allow us to compute efficiently ground state overlaps, as opposed to the von Neumann entropy. Therefore, we believe that the LBF can be a useful and general tool in the study of quantum many-body systems.

Acknowledgments

We wish to thank F Alet, P Calabrese, J Cardy, J-L Jacobsen, G Misguich, V Pasquier and H Saleur for valuable discussions and encouragement.

References

- [1] Amico L, Fazio R, Osterloh A and Vedral V, *Entanglement in many-body systems*, 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 517
- Calabrese P, Cardy J and Doyon B, *Entanglement entropy in extended quantum systems*, 2009 *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 500301
- Eisert J, Cramer M and Plenio M B, *Colloquium: area laws for the entanglement entropy*, 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 277
- [2] Holzey C, Larsen F and Wilczek F, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, 1994 *Nucl. Phys. B* **424** 443
- [3] Vidal G, Latorre J I, Rico E and Kitaev A, *Entanglement in quantum critical phenomena*, 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 227902
- [4] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement entropy and quantum field theory*, 2004 *J. Stat. Mech.* **P06002**
- [5] Wolf M, *Violation of the entropic area law for fermions*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 010404
- Gioev D and Klich I, *Entanglement entropy of fermions in any dimension and the Widom conjecture*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 100503
- [6] Kitaev A and Preskill J, *Topological entanglement entropy*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 110404
- Levin M and Wen X-G, *Detecting topological order in a ground state wavefunction*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 110405
- Hamma A, Ionicioiu R and Zanardi P, *Ground state entanglement and geometric entropy in the Kitaev model*, 2005 *Phys. Lett. A* **337** 22
- [7] Fradkin E and Moore J E, *Entanglement entropy of 2D conformal quantum critical points: hearing the shape of a quantum drum*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 050404
- [8] Haque M, Zozulya O and Schoutens K, *Entanglement entropy in fermionic Laughlin states*, 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 060401
- [9] Metlitski M A, Fuertes C A and Sachdev S, *Entanglement entropy in the $O(N)$ model*, 2009 *Phys. Rev. B* **80** 115122
- [10] Stéphan J-M, Furukawa S, Misguich G and Pasquier V, *Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wavefunctions*, 2009 *Phys. Rev. B* **79** 115421
- Stéphan J-M, Misguich G and Pasquier V, *Rényi entropy of a line in two-dimensional Ising models*, 2010 *Phys. Rev. B* **82** 125455
- Oshikawa M, 2010 arXiv:1007.3729
- [11] Anderson P W, *Infrared catastrophe in Fermi gases with local scattering potentials*, 1967 *Phys. Rev. Lett.* **18** 1049
- [12] Zanardi P and Paunković N, *Ground state overlap and quantum phase transitions*, 2006 *Phys. Rev. E* **74** 031123
- [13] Sirker J, *Finite-temperature fidelity susceptibility for one-dimensional quantum systems*, 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 117203
- [14] Gu S-J, *Fidelity approach to quantum phase transitions*, 2010 *Int. J. Mod. Phys. B* **24** 4371
- [15] Campos Venuti L, Saleur H and Zanardi P, *Universal subleading terms in ground-state fidelity from boundary conformal field theory*, 2009 *Phys. Rev. B* **79** 092405
- [16] Schwandt D, Alet F and Capponi S, *Quantum Monte Carlo simulations of fidelity at magnetic quantum phase transitions*, 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 170501
- [17] Peres A, *Stability of quantum motion in chaotic and regular systems*, 1984 *Phys. Rev. A* **30** 1610
- [18] Gorin T, Prosen T, Seligman T and Znidaric M, *Dynamics of Loschmidt echoes and fidelity decay*, 2006 *Phys. Rep.* **435** 33

- [19] Pastawski H M, Levstein P R, Usaj G, Raya J and Hirschinger J, *A nuclear magnetic resonance answer to the Boltzmann–Loschmidt controversy?*, 2000 *Physica A* **283** 166
- Jalabert R A and Pastawski H M, *Environment-independent decoherence rate in classically chaotic systems*, 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2490
- [20] Quan H T, Song Z, Liu X F, Zanardi P and Sun C P, *Decay of Loschmidt echo enhanced by quantum criticality*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 140604
- [21] Campos Venuti L and Zanardi P, *Universal equilibrium distribution after a small quantum quench*, 2010 *Phys. Rev. A* **81** 022113
- [22] Di Francesco P, Matthieu P and Sénéchal D, 1997 *Conformal Field Theory* (Berlin: Springer)
- [23] Dubail J, Stéphan J-M and Pasquier V, unpublished notes
- [24] Cardy J and Peschel I, *Finite-size dependence of the free energy in two-dimensional critical systems*, 1988 *Nucl. Phys. B* **300** 377
- [25] Iglói F and Juhász R, *Exact relationship between the entanglement entropies of XY and quantum Ising chains*, 2008 *Europhys. Lett.* **81** 57003
- [26] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement and correlation functions following a local quench: a conformal field theory approach*, 2007 *J. Stat. Mech.* **P10004**
- [27] Klich I and Levitov L, *Quantum noise as an entanglement meter*, 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 100502
- Song H F, Rachel S and Le Hur K, *General relation between entanglement and fluctuations in one dimension*, 2010 *Phys. Rev.* **82** 012405
- Song H F, Flindt C, Rachel S, Klich I and Le Hur K, 2010 arXiv:[1008.5191](#)
- [28] Alet F, Jacobsen J L, Misguich G, Pasquier V, Mila F and Troyer M, *Interacting classical dimers on the square lattice*, 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 235702
- [29] Affleck I and Ludwig A, *Universal noninteger ground-state degeneracy in critical quantum systems*, 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 161
- [30] Fendley P, Saleur H and Warner N P, *Exact solution of a massless scalar field with a relevant boundary condition*, 1994 *Nucl. Phys. B* **430** 577

Phase transition in the Rényi-Shannon entropy of Luttinger liquids

Jean-Marie Stéphan, Grégoire Misguich and Vincent Pasquier

Institut de Physique Théorique, CEA, IPhT, CNRS, URA 2306, F-91191 Gif-sur-Yvette, France.

(Dated: April 14, 2011)

The Rényi-Shannon entropy associated to critical quantum spins chain with central charge $c = 1$ is shown to have a phase transition at some value n_c of the Rényi parameter n which depends on the Luttinger parameter (or compactification radius R). Using a new replica-free formulation, the entropy is expressed as a combination of single-sheet partition functions evaluated at n -dependent values of the stiffness. The transition occurs when a vertex operator becomes relevant at the boundary. Our numerical results (exact diagonalizations for the XXZ and $J_1 - J_2$ models) are in agreement with the analytical predictions: above $n_c = 4/R^2$ the subleading and universal contribution to the entropy is $\ln(L)(R^2 - 1)/(4n - 4)$ for open chains, and $\ln(R)/(1 - n)$ for periodic ones ($R=1$ at the free fermion point). The replica approach used in previous works fails to predict this transition and turns out to be correct only for $n < n_c$. From the point of view of two-dimensional Rokhsar-Kivelson states, the transition reveals a rich structure in the entanglement spectra.

PACS numbers: 05.30.Rt, 75.10.Pq, 03.67.Mn

Introduction.— The entanglement entropy (EE) has become an important tool to probe and characterize many-body quantum states. In one-dimensional (1d) systems, the celebrated logarithmic divergence [1–4] of the von Neumann entropy of a long segment provides an efficient way to measure the central charge of a critical spin chain. In higher dimensions, EE can also be used to detect the presence of topological order [5], which is otherwise invisible to conventional local order parameters and correlation functions. Understanding how scales the EE of large subsystems has also opened a route to algorithms able to simulate efficiently these strongly interacting systems in $d > 1$ [6].

In this letter, we use a seemingly completely different entropy to probe the ground-state of quantum spin chains, the *Shannon entropy* (or configuration entropy). For a normalized state $|\psi\rangle$ and a Rényi index $n > 0$ it is defined as :

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln \left(\sum_i p_i^n \right) \quad p_i = |\langle i | \psi \rangle|^2 \quad (1)$$

where the states $|i\rangle$ form a basis of the Hilbert space. The basis states are chosen to be products of local states, and the Ising configurations ($|i\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle$, etc.) are the natural choice for the spin- $\frac{1}{2}$ systems we consider. This entropy was originally introduced as a mean to evaluate the EE in some particular two-dimensional (2d) states – the so called Rokhsar-Kivelson (RK) wave functions – and has allowed to investigate in details the EE at some some 2d conformal quantum critical points [7, 8]. We will interpret our results in terms of 2d entanglement spectra at the end, but we will otherwise mostly concentrate on the 1d spin chain point of view.

A particularly interesting situation is that of the spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain:

$$\mathcal{H} = \sum_i (S_i^x \cdot S_{i+1}^x + S_i^y \cdot S_{i+1}^y) + \Delta \sum_i S_i^z \cdot S_{i+1}^z \quad (2)$$

For a chain of length L , S_n has a leading term proportional to L followed by universal subleading contributions. If the chain is *periodic*, the first subleading term is of order $O(1)$ and was shown to be [7, 9] :

$$S_n^{\text{periodic}} = (\cdots)L + \ln(R) - \frac{\ln n}{2(n-1)}, \quad (3)$$

where R is the compactification radius, related to the anisotropy Δ of the XXZ Hamiltonian ($R(\Delta)^2 = 2 - \frac{\pi}{2} \arccos(\Delta)$). With *open* boundary conditions the first subleading correction is also universal and takes the form of a logarithm of the length L of the chain [8]:

$$S_n^{\text{open}} = (\cdots)L - \frac{1}{4} \ln(L), \quad (4)$$

which, in the 2d-RK language, confirms at $c = 1$ the arguments developed in [10] (from now on the term proportional to L will be omitted).

In this letter we however show that these results are only correct below a critical value n_c of the Rényi parameter. Using a replica-free formulation of the problem we prove that the Rényi parameter n effectively modifies the compactification radius of the chain (in a sense to be defined latter), and that a phase transition takes place at $n = n_c$ when a (boundary) vertex operator becomes relevant. A central result concerns the location of this transition and the behavior of the entropy above n_c :

$$n_c = d^2/R^2 \quad (5)$$

$$S_{n>n_c}^{\text{periodic}} = \frac{1}{n-1} (n \ln R - \ln d) \quad (6)$$

$$S_{n>n_c}^{\text{open}} = \ln(L) \frac{n}{n-1} \left(\frac{R^2}{4} - \frac{1}{4} \right), \quad (7)$$

where d is the degeneracy of the Ising configuration with the highest probability p_{max} in the ground state. At zero magnetization this configuration is $d = 2$ -fold degenerate:

$$|i_{\text{max}}\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\cdots\uparrow\downarrow\rangle \quad \text{or} \quad |i_{\text{max}}\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\cdots\downarrow\uparrow\rangle. \quad (8)$$

Compact free field.— To understand this transition we adopt the 1+1 dimensional (Euclidian) point of view. At long distances, the model is described by a compactified “height field” $h(x, \tau)$ with Gaussian probabilities:

$$S[h] = \frac{\kappa}{4\pi} \int dx d\tau (\nabla h)^2 \quad (9)$$

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[h] \exp(-S[h]). \quad (10)$$

where κ is the stiffness, r the compactification radius ($h \equiv h + 2\pi r$) and the physical Luttinger parameter (which fixes the decay exponents of the correlations functions) is $R = \sqrt{2\kappa}r$. For periodic (resp. open) chains h lives on an infinitely long cylinder (resp. strip) of perimeter (resp. width) L . In this language, the microscopic configurations $|i\rangle$ are replaced by configurations $\phi(x) = h(x, \tau = 0)$ of the height field at $\tau = 0$. To evaluate the probability $p[\phi]$ we decompose the field h into an harmonic function h^ϕ which satisfies the boundary condition $h_{\tau=0}^\phi = \phi$, and a “fluctuating” part δh satisfying a Dirichlet boundary condition: $h = h^\phi + \delta h$ [22]. Exploiting the Gaussian form of the action and $\Delta h_\phi = 0$, the “classical” and “fluctuating” part decouple: $S[h] = S[h^\phi] + S[\delta h]$ and we get

$$p[\phi] = \exp(-S[h^\phi]) \frac{\mathcal{Z}^D}{\mathcal{Z}}, \quad (11)$$

where $\mathcal{Z}^D$ is the partition function of the whole cylinder (resp. strip) with a Dirichlet defect line at $\tau = 0$ [23]. Now $p[\phi]$ is raised to the (possibly non-integer) power n

$$p[\phi]^n = \exp(-nS[h^\phi]) \left(\frac{\mathcal{Z}^D}{\mathcal{Z}} \right)^n, \quad (12)$$

and make the observation that $\exp(-nS[h^\phi])$ is the Boltzmann weight in a system where the stiffness κ has been replaced by $\kappa' = n\kappa$. From now on we explicitly keep track of the value of the stiffness κ (as an index) and write:

$$\exp(-nS_\kappa[h^\phi]) = \exp(-S_{n\kappa}[h^\phi]) = p_{n\kappa}[\phi] \frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}}{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D}. \quad (13)$$

So, Eq. 12 can be written as

$$(p_\kappa[\phi])^n = p_{n\kappa}[\phi] \left(\frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}}{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D} \right) \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa^D}{\mathcal{Z}_\kappa} \right)^n. \quad (14)$$

Inserting this result in Eq. 1 and using the fact that the probabilities $p_{n\kappa}[\phi]$ are normalized, we get the main result of this section:

$$S_n = \frac{1}{1-n} \left[\ln \left(\frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}}{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D} \right) - n \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_\kappa}{\mathcal{Z}_\kappa^D} \right) \right] \quad (15)$$

If we assume $2n = p$ to be an integer the partition function $Z(n) = \sum_i p_i^n$ has a natural interpretation in terms of

p half-infinite systems glued together at their edge, forming a “book” with p sheets [11]. The derivation above, however, never assumes $2n$ to be an integer and is therefore different from the previous derivations involving a replica trick [8, 9]. S_n has been reduced to ratios of standard partition functions with respectively free and Dirichlet boundary conditions at the boundary between upper ($\tau > 0$) and lower ($\tau < 0$) parts of the cylindric (or strip). The complications associated to n -sheeted surfaces [8, 9] have been avoided. For a compactified free field and the cylinder geometry, the ratio $g_D^2 = \mathcal{Z}_\kappa^D / \mathcal{Z}_\kappa$ is a well known “ g -factor” [12, 13]:

$$g_D^2 = R^{-1} = (2\kappa r^2)^{-1/2}. \quad (16)$$

Combining Eq. 15 and 16 we find:

$$S_n = \ln R - \frac{\ln n}{2(n-1)}, \quad (17)$$

in agreement with Refs. [7–9, 14]. For the strip geometry, we also recover the n -independent result of Eq. 4 by applying the Cardy-Peschel formula [15] to Eq. 15, with four angles $\gamma = \pi/2$.

Boundary phase transition.— Eq. 15 is a combination of two g -factors and therefore probes the boundary of the system (the “bookbinding” in the book picture). The action at the lattice scale is not strictly Gaussian and other terms respecting the lattice symmetry and the periodicity $h \equiv h + 2\pi r$ are present, including vertex operators of the type $\cos(\frac{d}{r}h)$. At the boundary such an operator renormalizes to zero in the long distance limit if $d^2 > 2\kappa r^2$ [16]. Otherwise it would lock the field to a flat configuration with degeneracy d . But the Eq. 15 cannot be valid anymore in this locked/massive phase since its derivation assumes Gaussian probabilities. A boundary phase transition therefore takes place when the most relevant vertex operator become marginal in presence of a stiffness $\kappa' = n\kappa$ [24]. This gives the critical value of the Rényi index:

$$n_c = \frac{d^2}{2\kappa r^2}. \quad (18)$$

In the case of the antiferromagnetic XXZ chain the two Ising configurations $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots\rangle$ and $|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \dots\rangle$ become the ground-states when $\Delta \rightarrow \infty$, which shows that an operator with two minima is present at the microscopic level. Taking $2\kappa r^2 = R(\Delta)$ and $d = 2$, we find Eq. 5. We also note that the same argument applies to the $J_1 - J_2$ (or “zig-zag”) chain, and to any Luttinger liquid phase with umklapp terms $\sim \cos(2h/r)$. [25]

In this locked phase, the universal contribution to S_n is given by these d configurations only, so that

$$S_{n>n_c} = \frac{1}{1-n} \ln [d(p_{\max})^n]. \quad (19)$$

In the periodic case, $p_{\max}$ simply corresponds to $g_D^2 = \mathcal{Z}^D / \mathcal{Z}$ and we recover Eq. 6.

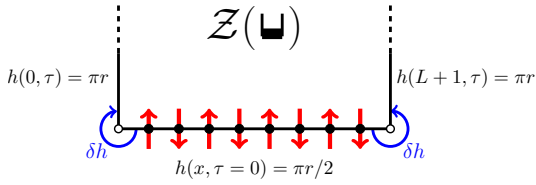


FIG. 1: (Color online) Height shift $\delta h = \pi r/2$ for the semi-infinite strip with bottom boundary condition $|i_{\max}\rangle$.

The open chains turn out to be even more interesting. The universal contribution to $S_{n>n_c}$ is encoded in

$$p_{\max} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{|\langle s|e^{-\tau H}|i_{\max}\rangle|^2}{\langle s|e^{-2\tau H}|s\rangle} = \frac{\mathcal{Z}(\mathbf{U})^2}{\mathcal{Z}(\mathbf{I})}, \quad (20)$$

where $\mathcal{Z}(\mathbf{U})$ is the partition function of a semi-infinite strip with bottom boundary condition $|i_{\max}\rangle$ (see Fig. 1). The ratio in Eq. 20 is similar, but not identical to the one used below the transition ($n < n_c$). As before, four corners with angle $\pi/2$ will contribute to $-\ln p_{\max}$ by a logarithm: $-\frac{1}{4} \ln L$. However, the configuration with highest probability does not exactly correspond to Dirichlet in the continuum limit since there is a height shift δ between the vertical edges of the strip, and the horizontal boundary (see Fig. 1). It can be treated by subtracting an harmonic function $h_\delta(x, \tau) = (2\delta/\pi) \arg(x+i\tau)$, equal to 0 on the horizontal boundary $\tau = 0$ and δ on the vertical boundary at $x = 0$. The resulting contribution to the free energy is

$$\delta F \sim \frac{\kappa \delta^2}{2\pi^2} \ln L. \quad (21)$$

The value shift δ can be obtained using, for instance, a bosonization approach. The free boundary condition for the spins at the end of the open chain corresponds to Dirichlet for the free field and we have to set $h(x=0, \tau) = h(x=L+1, \tau) = \pi r$ to insure vanishing spin operators at both ends [17]. Then, the continuum limit of the configuration $|i_{\max}\rangle$ corresponds to locking $h(x, \tau=0)$ to the minima of the umklapp term $\cos(2h/r)$ [18], which has two degenerate minima in $h = \pi r/2$ and $3\pi r/2$. In both cases the height difference between the $x = 0$ boundary and that at $\tau = 0$ is $\delta = \pi r/2$. Summing up the contributions coming from Eq. 21 and from the Cardy-Peschel term, we recover our main result Eq. 7.

Numerical simulations.— So far, for periodic chains, only the case $n = 1$ has been investigated numerically [7]. Fig. 2 shows the full n dependence of S_n (constant term extracted by fitting the finite-size data) for different values of Δ . Although the system sizes are very small ($L \leq 28$) there is a good agreement with the theoretical predictions, including the change of behavior at the predicted value of n_c (which depends on Δ). It is only close to the Heisenberg point ($\Delta = 1$) and above n_c that the finite-size results deviate from Eq. 7. We attribute

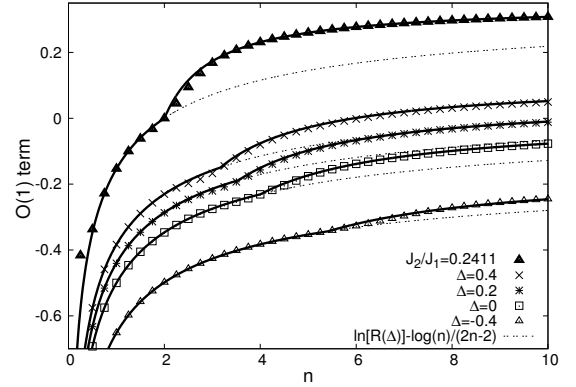


FIG. 2: Constant term in the Shannon-Rényi entropy of periodic XXZ and $J_1 - J_2$ chains for different values of Δ and at the critical point $J_2/J_1 = 0.2411$. Each point comes from fitting the data for $L = 20, 22, 24, 26$ and 28 to $aL + b + c/L + d/L^2$. Fat lines: theoretical prediction (Eq. 15). Eq. 3 is also plotted above n_c (dashed lines) for comparison.

these enhanced finite-size effects to the marginal operators present at the $SU(2)$ symmetric point. To circumvent this difficulty we also studied the $J_1 - J_2$ chain at the critical value $J_2/J_1 \sim 0.2411$ [19], which has the same radius $R = \sqrt{2}$ but where finite-size effects are much smaller. The data again agrees well with our prediction.

Open chains were investigated in Ref. [8] for various values of n and Δ , but the transition at n_c was overlooked. In Fig. 3 we see a clear tendency for the logarithmic term to approach the theoretical curves, although the finite size data are still far from the thermodynamic limit. Interestingly, the entropies curves extracted from different system sizes cross in the immediate vicinity of the predicted value of n_c . This lead us to conjecture that the coefficient of the logarithm may take a universal value at the transition point which only depends on the compactification radius R . At $\Delta = 0$ we pushed the numerics to $L = 40$ spins (see below) and the inset of Fig 3 shows a collapse of the data for different system sizes onto a single curve in the vicinity of $n_c = 4$. This indicates a slow ($\sim L^{-1/4}$) but steady convergence towards a step function. We also get $S_{n=n_c}^{\text{open}} = -(1/6) \ln L$ with a high precision at $\Delta = 0$, although we have no theoretical understanding of this value.

$\Delta = 0$ in open chains.— This corresponds to free fermions and each probability p_i is a determinant (Wick's theorem). Denoting by $\{x_k\}$ the positions of the up spins (fermions) and setting $\theta_k = \pi x_k/(L+1)$ we have:

$$p_i = p(\{\theta_k\}) = \left(\frac{2}{L+1}\right)^{L/4} \det_{1 \leq j, k \leq n} (\sin[j\theta_k]) \quad (22)$$

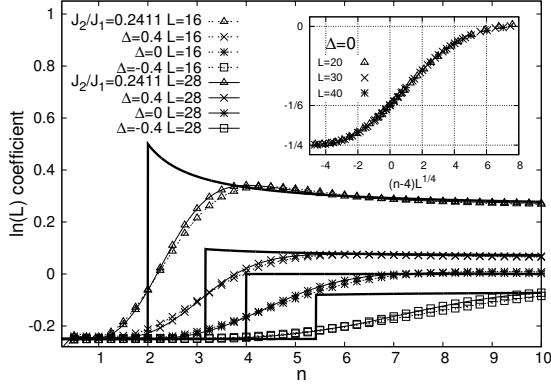


FIG. 3: Logarithmic term in the Shannon-Rényi entropy of open XXZ and J_1 - J_2 chains, extracted using a fit $aL + b \ln L + c + d/L$ to four consecutive even systems sizes ($L, \dots, L-6$) with $L = 16$ and $L = 28$. Fat lines: Eq. 15. Inset: scaling close to $n_c(\Delta = 0) = 4$.

This determinant can be computed exactly [20]:

$$p_i = \prod_{j=1}^{L/2} \frac{2 \sin^2 \theta_j}{L+1} \prod_{k>j} 16 \sin^2 \left(\frac{\theta_j - \theta_k}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta_j + \theta_k}{2} \right)$$

and allows to go get $p_{\max}$: $p_{\max} = 2^{-L/2}$. The absence of a logarithmic term in $S_{n \rightarrow \infty} \sim -\ln p_{\max}$ is consistent with Eq. 7, because the contribution from the height shift exactly compensates for the Cardy-Peschel term at $R(\Delta = 0) = 1$. This also rigorously confirms at $\Delta = 0$ the value of δ . We also checked the validity of Eq. 7 for the square lattice quantum dimer (2d-RK) wave function, for which $d = 1$. In this case the microscopic height representation of dimer coverings allows to obtain δ exactly at the lattice level.

Conclusion.— The Rényi-Shannon entropy of critical 1d systems does not only give a simple access to the Luttinger parameter of the system, it also shows that taking powers of the wave function gives rise to a whole line of critical points ending at a phase transition to an ordered state. In fact, going back to the 2d RK point of view, this transition reveals a rich structure in the entanglement spectrum $\{E_i\}$ of these 2d wave-functions. In some appropriate geometry [7] the probabilities p_i are nothing else but the eigenvalues of the RK reduced density matrix and the probabilities directly give the entanglement spectrum $E_i = -\ln p_i$. The phase transition at n_c shows that the spectrum has two sharply distinct regions in the thermodynamic limit: at high “energy” (small inverse “temperature” n) the universal contributions to the probabilities are Gaussian whereas at low energy (large n) they are dominated by the ordered configurations. This contrasts with the fractional quantum Hall situation where the universal part of the entangle-

ment spectrum only exist at low E_i [21]. These findings may open new directions in the study of quantum critical wave-functions – in 1d and in higher dimensions – as well as their connection to boundary critical phenomena and g -factors in particular.

Acknowledgments.— We are indebted to Edouard Boulat for suggesting us the bosonization argument to compute δ , and thank Hubert Saleur for insightful discussions.

-
- [1] C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, Nucl. Phys. B **424**, 443 (1994).
 - [2] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003) .
 - [3] V. E. Korepin, Phys. Rev. Lett. **92**, 096402 (2004) .
 - [4] P. Calabrese and J. Cardy, J. Stat. Mech. , P06002 (2004).
 - [5] A. Kitaev and J. Preskill, Phys. Rev. Lett. **96**, 110404 (2006) ; M. Levin and X.-G. Wen, *ibid* , 110405 (2006).
 - [6] J. I. Cirac and F. Verstraete, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 504004 (2009).
 - [7] J.-M. Stéphan *et al.*, Phys. Rev. B **80**, 184421 (2009) .
 - [8] M. P. Zaletel, J. H. Bardarson, J. E. Moore, preprint [arXiv:1103.5452](https://arxiv.org/abs/1103.5452) .
 - [9] M. Oshikawa, preprint [arXiv:1007.3739](https://arxiv.org/abs/1007.3739) .
 - [10] E. Fradkin and J.E. Moore, Phys. Rev. Lett. **97**, 050404 (2006) .
 - [11] J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier, Phys. Rev. B **82**, 125455 (2010) .
 - [12] I. Affleck and A. W. W Ludwig, Phys. Rev. Lett. **67**, 161 (1991) .
 - [13] P. Fendley, H. Saleur and N. Warner, Nucl. Phys. B **430**, 577 (1994).
 - [14] B. Hsu and E. Fradkin, J. Stat. Mech , P09004 (2010).
 - [15] J. Cardy and I. Peschel, Nucl. Phys. B **300**, 377 (1988).
 - [16] S. Coleman, Phys. Rev. B **11**, 2088 (1975) .
 - [17] S. Eggert and I. Affleck, Phys. Rev. B **46**, 10866 (1992)
 - [18] I. Affleck, *Fields, Strings and Critical Phenomena*, p563-640, proceedings of Les Houches Summer School, 1988.
 - [19] K. Okamoto and K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, 433 (1992).
 - [20] C. Krattenthaler, preprint [math/9902004](https://arxiv.org/abs/math/9902004).
 - [21] H. Li and F. D. M Haldane, Phys. Rev. Lett. **101**, 010504 (2008) ; R. Thomale, A. Sterdyniak, N. Regnault and B. A. Bernevig, Phys. Rev. Lett. **104**, 180502 (2010) .
 - [22] The winding numbers W need not be summed over since only $W = 0$ contributes in the limit of infinite length in the imaginary time direction.
 - [23] Z^D is thus the square of the partition function a half-infinite cylinder (strip).
 - [24] A locking transition in the *bulk* is expected at $d^2 = 4\kappa r^2$. It however turns out that the latter does not affect Eq. 15, as confirmed by our numerical results. In the “book” picture and sufficiently far from the boundary it is indeed clear that all the pages (with a *fixed* stiffness κ) remain gapless in the bulk, whatever n .
 - [25] Such a behavior has already been observed in a dimer problem [7].

Local quantum quenches in critical one-dimensional systems: entanglement, the Loschmidt echo, and light-cone effects

Jean-Marie Stéphan¹ and Jérôme Dubail²

¹ Institut de Physique Théorique, CEA, IPhT, CNRS, URA 2306, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

² Department of Physics, Yale University, PO Box 208120, New Haven, CT 06520-8120, USA

E-mail: jean-marie.stephan@cea.fr and jerome.dubail@yale.edu

Received 9 June 2011

Accepted 19 July 2011

Published 30 August 2011

Online at stacks.iop.org/JSTAT/2011/P08019

[doi:10.1088/1742-5468/2011/08/P08019](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2011/08/P08019)

Abstract. We study a particular type of local quench in a generic quantum critical one-dimensional system, using conformal field theory (CFT) techniques, and providing numerical checks of the results in free fermion systems. The system is initially cut into two subsystems A and B which are glued together at time $t = 0$. We study the entropy of entanglement (EE) between the two parts A and B , using previous results obtained by Calabrese and Cardy (2004 *J. Stat. Mech.* P06002; 2007 *J. Stat. Mech.* P10004), and further extending them. We also study in detail the (logarithmic) Loschmidt echo (LLE). For finite size systems both quantities turn out to be (almost) periodic in the scaling limit, and exhibit striking light-cone effects. While these two quantities behave similarly immediately after the quench—namely as $c/3 \log t$ for the EE and $c/4 \log t$ for the LLE—we observe some discrepancy once the excitations emitted by the quench bounce on the boundary and evolve within the same subsystem A (or B). The decay of the EE is then non-universal, as noticed by Eisler and Peschel (2007 *J. Stat. Mech.* P06005). In contrast, we find that the evolution of the LLE is less sensitive than the EE to non-universal details of the model, and is still accurately described by our CFT prediction. To further probe these light-cone effects, we also introduce a variant of the Loschmidt echo specifically constructed to detect the excitations emitted just after the quench.

Keywords: conformal field theory, spin chains, ladders and planes (theory), entanglement in extended quantum systems (theory)

ArXiv ePrint: [1105.4846](https://arxiv.org/abs/1105.4846)

Contents

1. Introduction	3
2. Finite size critical systems in one dimension	4
3. Local quenches from conformal field theory	7
3.1. Cut and glue: the type of the local quench	7
3.2. Space-time geometry and conformal mappings	8
3.2.1. The Loschmidt echo.	8
3.2.2. The entanglement entropy.	10
3.3. A simple finite size example	12
3.3.1. The Loschmidt echo.	12
3.3.2. The entanglement entropy.	13
3.4. The semi-analytic method for the Loschmidt echo in other geometries	14
3.5. Extension to arbitrary aspect ratios	15
3.5.1. The Loschmidt echo.	15
3.5.2. The entanglement entropy.	16
4. Light-cone effects: plateaus of the LLE and non-universal decay of the entanglement entropy	16
4.1. The XY spin chain in a transverse field	17
4.1.1. The XX chain: the free boson critical line.	17
4.1.2. The Ising critical line.	19
4.2. Non-universal decay of the entanglement entropy	20
4.3. Plateaus of the LLE	22
4.4. ‘Detector’ geometries	24
5. Conclusion	25
Acknowledgments	27
Appendix A. The Loschmidt echo and free fermions	27
A.1. Diagonalization	27
A.2. The Loschmidt echo and bipartite fidelity	28
A.3. Bipartite fidelity	29
Appendix B. Details of the detector geometries	29
B.1. The ‘symmetric detector’	29
B.2. The ‘infinite detector’	30
Appendix C. Intriguing trajectories in the complex plane	31
References	32

1. Introduction

The characterization of entanglement in quantum many-body systems has become increasingly important over the last few years. It has been at the heart of a fruitful interdisciplinary work, with strong motivations coming both from quantum information [4] and from ‘conventional’ condensed matter theory. These studies include topics as diverse as the investigation of computational complexity of algorithms such as DMRG [5, 6], and the development of new numerical tools such as PEPS [7] and MERA [8]—which aim to give access to far larger system sizes than exact diagonalization techniques—and the hunt for theoretical tools able to grasp some of the features of topologically ordered phases of matter [9]–[11].

Among all the competing quantities that have been proposed as (theoretical) measures of quantum entanglement, the von Neumann entanglement entropy (EE) is the most widely accepted [4, 12, 13]. It is defined through a bipartition of the Hilbert space $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Most of the time, the bipartition corresponds to a spatial cut of the system, the subsystem A being thought of as the physical system of interest, and B as the ‘environment’. Usually, one starts with a pure state $|\Omega\rangle \in \mathcal{H}$, then defines its reduced density matrix $\rho_A = \text{Tr}_{\mathcal{H}_B} |\Omega\rangle\langle\Omega|$, and its EE as the von Neumann entropy of ρ_A :

$$S = -\text{Tr}_{\mathcal{H}_A} \rho_A \log \rho_A. \quad (1)$$

Intuitively, the more entangled the system is, the less separable it is, and therefore the larger the EE is. While the EE has been computed numerically or analytically for a large variety of systems, its experimental measurement would generically require the knowledge of a prohibitively large number of correlation functions, which can be traced back to the intrinsic non-locality of this quantity. However, some methods have been proposed for direct measurements in free fermion systems [14]–[16] (see also the discussion in [17] about interacting systems), and for an original experimental implementation of the replica trick which could possibly lead to a measure [18] of the Rényi entropies $S_n = [1/(1-n)] \log \text{Tr} \rho_A^n$.

In [19] we introduced a quantity which shows a behaviour that is similar to that of the EE: the (logarithmic) bipartite fidelity (LBF). The LBF is in principle simpler to measure than the EE, because it is defined as an overlap of two states (see below). The common feature of the ‘experimental’ methods that have been proposed for measuring both the EE and the LBF is that they rely on probing some of the non-equilibrium properties of the system. More specifically, the relation between entanglement and time evolution of quantum systems after a sudden change of parameters in the Hamiltonian, i.e. after a *quantum quench*, has been emphasized. In that sense, the methods proposed for a measurement of the Rényi entropy [18] and for the LBF [19] are the same, and rely on the probability of observing the system in the ground state of the Hamiltonian H' after a sudden local quench $H \rightarrow H'$. An experimental device would be considerably more involved in the case of the Rényi entropies [18] than for the LBF though. The theoretical study of quantum quenches has been very active [20]–[28] (this list is far from exhaustive), in part triggered by the recent experimental achievements in ultracold atoms [29, 30], which now allow us to build atomic systems without dissipation, and with large ranges of tunable parameters. Another fascinating question is that of thermalization in quantum systems after quenches [31]–[35].

One of the most interesting aspects of some of the results on entanglement and quantum quenches is their universality [36]–[38]. Various scaling laws, critical exponents and universal functions have been discovered. In the case of one-dimensional systems, in particular, it is well known that, at quantum criticality, the low energy excitations are generically described by a conformal field theory (CFT). The CFT formalism has been successfully applied to derive a variety of results in that context (see for example [1, 2, 19, 27] and references therein).

In this paper, we fill some of the gaps that still appear in this already large literature. Indeed, to our knowledge, the question of finite size systems and quantum recursion at criticality has not been addressed in general (see, however, [39] for partial results). Neither has the LBF after a local quench in such systems been studied, apart from by [19]. Therefore we focus on local quantum quenches in finite size systems, which we study by CFT methods, extending the results of the pioneering papers by Calabrese and Cardy [2] and Eisler and Peschel [3, 41] and providing numerical checks of our results in free fermion systems. We study both the EE and the LBF, emphasizing the differences between the behaviours of these two quantities. We find that there are striking light-cone effects, both for the EE and for the LBF. Since for a system evolving in time the LBF is nothing but (minus the logarithm of) the *Loschmidt echo*

$$\mathcal{L}(t) = |\langle \psi(t) | \psi(0) \rangle|^2, \quad (2)$$

as noted in [19], in the rest of this paper we will prefer the latter terminology, as it is more often used in the context of quantum quenches. We will therefore name as the *logarithmic Loschmidt echo* (LLE) the quantity $\mathcal{F}(t) \equiv -\log \mathcal{L}(t)$, keeping in mind that it is the same as the LBF defined in [19] evolving with time t .

The paper is organized as follows. In section 2 we first describe some basic consequences of a local quantum quench in a one-dimensional critical system. In particular, we explain why the time evolution of the wavefunction after the quench should be periodic. In section 3 we derive several results for the time evolution of the entanglement entropy as well as the Loschmidt echo. This section relies mainly on CFT methods, and may be skipped at first reading. Finally, section 4 focuses on the results, providing physical interpretations and numerical checks of these in free fermion systems.

2. Finite size critical systems in one dimension

In this paper we consider 1 + 1-dimensional systems which are described by a CFT at sufficiently large distances and timescales (see for example [42, 43] for an introduction to CFT). We are interested mainly in finite size systems. Typically, such a system can be a gapless spin chain of finite size L , for sufficiently large L . For a system with open boundary conditions, which are assumed to correspond to a single conformal boundary condition throughout the paper, the lower energy part of the spectrum of the gapless Hamiltonian H_L is given by [44, 45]

$$E_\alpha = L E_{\text{bulk}} + E_{\text{boundary}} + \frac{\pi v_F}{L} \left(h_\alpha - \frac{c}{24} \right) + O(1/L^2) \quad (3)$$

where $L E_{\text{bulk}}$ is the (bulk) extensive part of the energy, and E_{boundary} is the boundary energy. E_{bulk} and E_{boundary} are both non-universal. v_F is the Fermi velocity, c is the

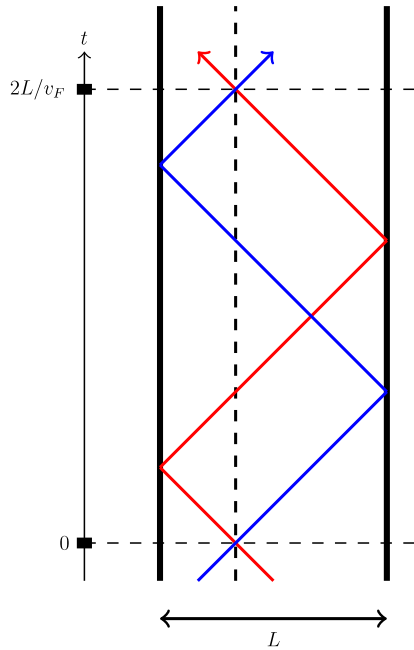


Figure 1. The ‘quasi-particle’ picture gives a useful though heuristic way of thinking about the time evolution of finite size critical systems in 1D. All the quasi-particles move at speed v_F . After time $2L/v_F$, the particles come back at the same position. Therefore, up to possible phase factors due to the reflection against the boundaries, the system is periodic.

(universal) central charge of the CFT and the h_α are the conformal dimensions of the operators ϕ_α appearing in the low energy part of the spectrum.

There are two kinds of such operators: the *primary fields* and their *descendants*. The descendants can always be constructed out of a single primary field, and correspond to some combinations of its derivatives. The primary fields cannot in general be expressed as descendants of other fields. The primary fields that appear in the spectrum (3) depend both on the CFT and on the boundary condition that we are dealing with. Typically, in unitary CFTs that are of interest for condensed matter applications (for example as scaling limits of spin chains), there is a discrete (often finite) set of primary fields. If a primary field is present in the spectrum (3), then all its descendants must appear as well. The conformal dimensions of a descendant $\phi_{a,k}$ and of the primary field ϕ_a are always separated by an integer. This property is crucial when we deal with time evolution. Indeed, if the system is initially in the state $|\psi(0)\rangle$, then $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$, and in particular after time $t = 2L/v_F$ all the descendants of a primary field ϕ_α pick up the same phase, up to additive $O(1/L^2)L = O(1/L)$ corrections.

This can be interpreted intuitively with the following semi-classical picture (see also figure 1). Low energy excitations can be seen as some ‘quasi-particles’ moving at fixed speed v_F . There can be different species a of quasi-particles in the system, which correspond to the different *primary* fields ϕ_a in the CFT. The behaviour of these different species of quasi-particles differs at the boundary: they pick up a phase factor $e^{-i\pi h_a}$. This ‘quasi-particle’ picture is heuristic and is useful for predicting light-cone behaviours, as explained below; however it fails to give quantitative predictions in general.

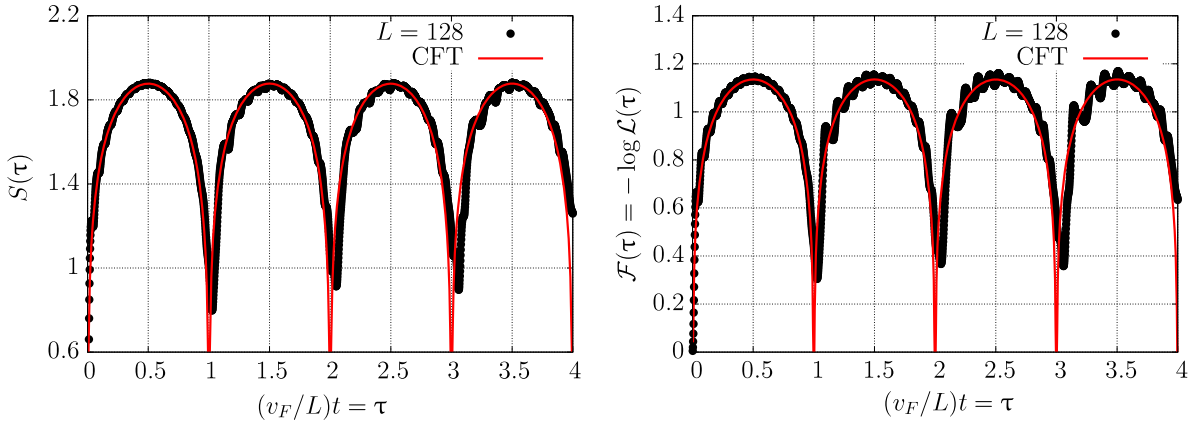


Figure 2. The entanglement entropy and the logarithmic Loschmidt echo against rescaled time $(v_F/L)t = \tau$ after a local quench in the middle of a system of size $L = 128$. A couple of oscillations of the finite size system can be observed after the local quench. They are very well described by the CFT (slightly anticipating equation (33) and equation (37)). The rapid oscillations appearing in the plots are analogous to the one observed at equilibrium (see for example [46]–[48]). Their amplitude decreases for bigger and bigger system sizes, and we will not discuss them in this paper. After longer times, the non-universal $O(1/L^2)$ terms in (3) spoil the CFT oscillations, and the periodic behaviour is lost.

It is important at this stage to emphasize that the commensurability of the spectrum (more precisely of each subsector of the spectrum corresponding to each primary field ϕ_a and its descendants) can only occur in the scaling limit. This is not true for a finite system, because of the $O(1/L^2)$ corrections in (3). The crucial requirement is that the dispersion relation must be linear $E_k = v_F|k|$ (if k is the momentum in a translation-invariant system). In our numerical checks we will focus on finite size lattice systems, and although the dispersion relation can be linearized close to the Fermi energy, there are subleading terms which spoil the commensurability of the spectrum (see [26] for a detailed discussion of this point). However, as we shall see, the periodic behaviour will be a very good approximation in the case of the local quenches that we are interested in: see figure 2 for a first example. There are two reasons why this is the case.

- We look at the behaviour of the system at sufficiently large scales of distance and time (typically large compared to the lattice spacing a), such that the continuum description is relevant. However, we restrict our analysis to times $t \ll L^2/(av_F)$, such that the $O(1/L^2)$ terms in (3) are still small. For larger times, these terms spoil the periodicity. Typically, for systems with a number of sites of order $L/a \approx 100$, we expect to see about ten oscillations that are well described by the CFT calculations, and after that the non-universal corrections become too large.
- We are interested in local quenches only. The Hamiltonian $H_L \rightarrow H'_L$ is changed only locally. This is radically different from a *global* quench case, where parameters of the Hamiltonian would be changed suddenly everywhere in the system. After a local quench, there are far fewer excitations in the system than after a global one. In particular, for a local quench, we expect only the lower energy part of the spectrum

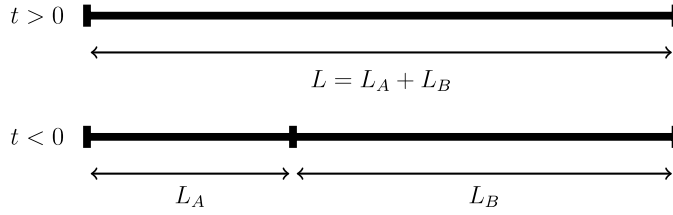


Figure 3. The system is initially prepared in the ground state of $H_A + H_B$, then at time $t > 0$ it evolves with the total Hamiltonian $H = H_A + H_B + H_{AB}^I$.

to be significantly excited. For these excitations the formula (3) applies. For *global* quenches however, we would expect also high energy excitations with non-universal scaling behaviour. Lattice effects would be presumably much more important in that case, and would spoil the commensurability of (the different sectors of) the spectrum almost immediately, leading to chaotic or turbulent behaviour, as observed in [34].

3. Local quenches from conformal field theory

We now specify the kinds of local quenches that we are interested in, and we show how these can be studied using CFT techniques, following previous works [2, 41, 19].

3.1. Cut and glue: the type of the local quench

In this paper we study one type of local quench only. Let us consider a one-dimensional system of length L , with open boundary conditions. We cut the system into two parts A and B , of lengths L_A and $L_B = L - L_A$ respectively. The system is initially prepared in the ground state of the Hamiltonian $H_A + H_B$, which is of course the tensor product $|A\rangle \otimes |B\rangle$ of the ground state $|A\rangle$ of H_A and the ground state $|B\rangle$ of H_B . For later convenience we define $|A \otimes B\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle$. At time $t = 0$, the interaction H_{AB}^I between A and B is switched on instantaneously. The system then evolves with the total Hamiltonian $H = H_A + H_B + H_{AB}^I$ (see figure 3).

Throughout this paper we consider situations where the boundary condition (BC) is always the same. Namely, if we are dealing with a spin chain of size L with free BC, then the boundary conditions at the cut between A and B are also free. Moreover, we assume that this is a conformal BC [49]. This is always true at least in the scaling limit, since every BC should renormalize towards a conformal BC under the renormalization group (RG) flow. In this paper we address neither the question of different BC, which would involve boundary condition changing operators, nor that of boundary RG flows.

There is an important consequence to these assumptions. In general, the initial state $|A \otimes B\rangle$ should be decomposed as

$$|A \otimes B\rangle = \sum_a \sum_k c_{a,k} |\phi_{a,k}\rangle \quad (4)$$

where the index a runs over the different primary fields in the spectrum of the CFT, and k runs over the descendants of each primary field. This, in principle, gives the time evolution after the quench, since by definition the $|\phi_{a,k}\rangle$ are the eigenstates of the Hamiltonian H ,

with eigenvalues (3). The calculation of the coefficients $c_{a,k}$ is difficult though. For the particular type of quench that we are looking at, however, only the identity and its descendants have non-zero overlaps $c_{a,k} = \langle \phi_{a,k} | A \otimes B \rangle$. This huge simplification occurs because we assume that the conformal BC are the same everywhere. Since the initial state $|A \otimes B\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle$ is built out of the ground states of H_A and H_B , which are both Hamiltonians with the same BC on the left and right boundaries, $|A\rangle$ and $|B\rangle$ both correspond to the identity operator. Then the fusion of these two states has to be the identity as well. This, composed with some conformal transformation of the space-time geometry (as will become clear below), cannot generate any operator but the identity and its descendants.

Since only the sector of the identity appears in the spectrum, the evolution of the system should be truly periodic (up to the $O(1/L^2)$ corrections discussed in section 2). There is no additional phase corresponding to different primary operators which could presumably affect the periodicity any longer. In the ‘quasi-particle’ picture this means that there is only one species of quasi-particles which can be emitted by the local quenches that we are considering.

Let us stress again the fact that this conclusion would not hold if we were considering different BC in the system. Changing the BC, for example on both sides of the quench, would generate other species of quasi-particles.

3.2. Space-time geometry and conformal mappings

As a warm-up exercise, let us consider the simpler case of two semi-infinite systems A and B that are glued together at time $t = 0$. This of course corresponds to the limiting case $a \ll v_F t \ll L_A, L_B$ in the above setting (figure 3). We review the CFT calculation of the Loschmidt echo [19] and of the entanglement entropy [2] in that case.

3.2.1. The Loschmidt echo. The CFT calculation is performed in imaginary time τ . For the Loschmidt echo we need to compute

$$\mathcal{L}(\tau) = |\langle A \otimes B | e^{-\tau H} | A \otimes B \rangle|^2, \quad (5)$$

where $H = H_{A \cup B}$ is the Hamiltonian of the total system. This can be done using the relation

$$|A \otimes B\rangle = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} e^{-\lambda(H_A + H_B)} e^{\lambda E_0} |s\rangle / \langle s | A \otimes B \rangle, \quad (6)$$

which is valid for any state $|s\rangle$ such that $\langle s | A \otimes B \rangle \neq 0$. E_0 is the ground state energy of $H_A + H_B$. The relation (5) becomes (for $\tau > 0$)

$$\mathcal{L}(\tau) = \text{const} \left| \lim_{\lambda \rightarrow \infty} Z_{A,B}(\tau) \right|^2 \quad (7)$$

where $Z_{A,B}(\tau) = \langle s | e^{-\lambda(H_A + H_B)} e^{-\tau H} e^{-\lambda(H_A + H_B)} | s \rangle$. This is the partition function of a statistical mechanical system defined in the geometry shown in figure 4. The normalization constant in (7) will be fixed later.

There is an extensive part in the free energy $\mathcal{F}_{A,B}(\tau) = -\log Z_{A,B}(\tau)$ coming from the region of size τ between the two corners in figure 4. This part will contribute only to a phase factor when we come back to real time ($\tau \rightarrow it$), which disappears in the

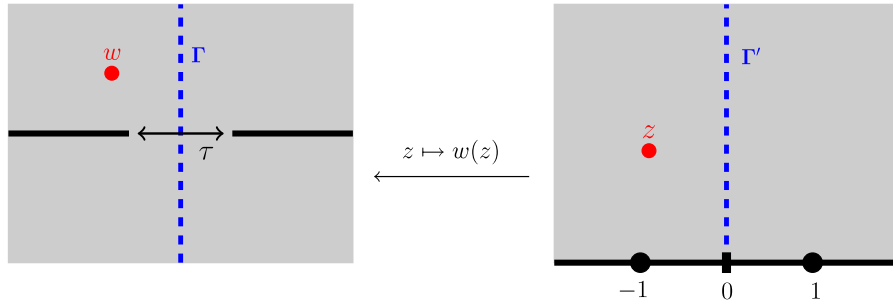


Figure 4. The geometry used to define the partition function $Z_{A,B}$. It can be obtained by a conformal mapping from the upper half-plane $z \mapsto w(z) = (\tau/4)(z + z^{-1})$. Notice that the imaginary time flows in the left-right direction. The distance between the two slits is τ . The infinitesimal transformation $w \mapsto w + \delta\tau$ is applied at the right of Γ in the w region. Γ' is the image of Γ through the inverse conformal mapping: $\Gamma' = w^{-1}(\Gamma)$.

norm (5). Also, there is an extensive free energy which grows with the size of the system and diverges as $\lambda \rightarrow \infty$. We can absorb this contribution in the normalization constant however, which will be fixed later when we come back in real time. Thus, the interesting part in the calculation of the time evolution of the Loschmidt echo is precisely the universal part coming from the corners in figure 4. As already emphasized in [19], the simplest way to get the result at this point is to apply the Cardy–Peschel formula [50]. However, we wish to compute the Loschmidt echo in more complicated geometries later on, and for pedagogical purposes we will follow a slightly different route.

The dependence of $\mathcal{F}(\tau) = -\log \mathcal{L}(\tau)$ on the distance τ in figure 4 can be evaluated as follows [50]. Consider the transformation $w \mapsto w + \delta\tau$ for w at the right of the path Γ in figure 4, and $w \mapsto w$ at the left of Γ . Notice that this mapping changes the distance τ into $\tau + \delta\tau$. The variation of $\mathcal{F}$ can be expressed in terms of the stress tensor $T(w)$ (and its anti-holomorphic part $\bar{T}(\bar{w})$) as

$$\frac{1}{2}\delta\mathcal{F} = \frac{\delta\tau}{2\pi} \int_{\Gamma} \langle T(w) \rangle dw + \text{c.c.} \quad (8)$$

and the one-point function of the stress tensor can be obtained from a conformal mapping from the half-plane (see figure 4)

$$w(z) = \frac{\tau}{4}(z + z^{-1}). \quad (9)$$

The one-point correlation function of $\langle T(z) \rangle$ is zero in the half-plane. $\langle T(w) \rangle$ can be calculated using the transformation law of the stress tensor [42, 43]:

$$T(w) = (dw/dz)^{-2} \left[T(z) - S(w, z) \frac{c}{12} \right], \quad (10)$$

where $S(w, z)$ is the Schwarzian derivative of the conformal transformation $w(z)$:

$$S(w, z) = \frac{w'''(z)}{w'(z)} - \frac{3}{2} \left(\frac{w''(z)}{w'(z)} \right)^2. \quad (11)$$

We therefore get

$$\frac{1}{2}\delta\mathcal{F} = -\frac{c\delta\tau}{12\pi} \int_{\Gamma'} dz S(w, z) \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-1} \quad (12)$$

where the path Γ' is the image of Γ under the inverse map $w \mapsto z$. For the mapping in equation (9), the integrand $f(z)$ is

$$f(z) = S(w, z) \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-1} = -\frac{24}{\tau} \frac{z^2}{(z-1)^3(z+1)^3}. \quad (13)$$

Notice that $f(z)$ has singularities at $z = \pm 1$, which are the images of the two tips of the slits in figure 4 through the inverse mapping $w \mapsto z$. In this case we have $\Gamma = i\mathbb{R}$ and $\Gamma' = i\mathbb{R}_+$. The integral can be evaluated as follows. First we consider both $\Gamma' = i\mathbb{R}_+$ and its mirror image: $i\mathbb{R}_+ \rightarrow i\mathbb{R}$, which multiplies the integral by 2. Then we close the contour by means of a big half-circle to the right. We call this contour $\mathcal{C}$; then

$$\int_{\Gamma'} f(z) dz = \frac{1}{2} \int_{i\mathbb{R}} f(z) dz = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{C}} f(z) dz. \quad (14)$$

Finally the integral over $\mathcal{C}$ can be computed using the residue theorem. Only the pole at $z = 1$ will contribute, and we obtain

$$\boxed{\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\tau} = \frac{c}{6} \times \text{Res}[f(z); z = 1].} \quad (15)$$

This equation is particularly useful because the computation of the Loschmidt echo for all the other geometries will lead to a similar result. Namely, the calculation boils down to a residue at the image of one of the tips through the inverse mapping. Here we get $\delta\mathcal{F}/\delta\tau = c/4\tau$, which gives finally

$$\mathcal{F}(\tau) = -\log \mathcal{L}(\tau) = \frac{c}{4} \log |\tau| + \text{const.} \quad (16)$$

Now we can perform the Wick rotation $\tau \rightarrow iv_{\text{F}}t + \epsilon$ and come back in real time. An UV cut-off ϵ is needed here in order for the Loschmidt echo to be defined at time $t = 0$ (note that $\mathcal{L}(t = 0) = 1$). It is of the order of a lattice spacing in the case of spin chains. The logarithmic Loschmidt echo (LLE) is then

$$\mathcal{F}(t) = -\log \mathcal{L}(t) = \frac{c}{4} \log \sqrt{1 + (v_{\text{F}}t)^2/\epsilon^2} \simeq \frac{c}{4} \log t + \text{const} \quad (17)$$

when $t \gg \epsilon$, which is the result of [19].

3.2.2. The entanglement entropy. We recall quickly the calculation of the entanglement entropy, following Calabrese and Cardy [2]. The Rényi entropy

$$S_n = \frac{1}{1-n} \log (\text{Tr } \rho^n), \quad (18)$$

gives the EE in the limit $n \rightarrow 1$, assuming that S_n is analytic in n :

$$S = -\text{Tr } \rho \log \rho = \lim_{n \rightarrow 1} S_n. \quad (19)$$

When $n \geq 2$ is an integer, $\text{Tr } \rho^n$ admits a simple interpretation in terms of partition functions on an n -sheeted Riemann surface, and can be computed in CFT [1, 36]. While

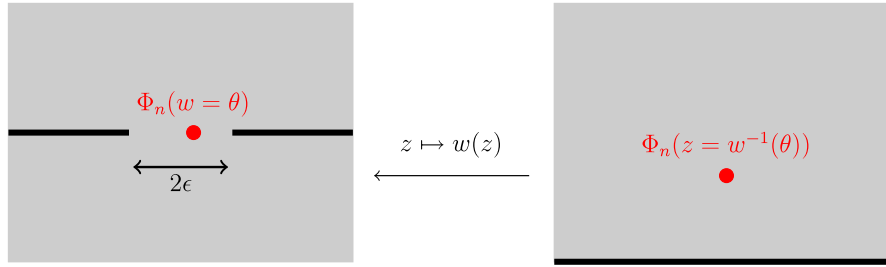


Figure 5. The geometry used to compute the entanglement entropy. Φ_n is the twist operator introduced by Calabrese and Cardy in [1].

the validity of the replica trick here is by no means obvious, the method has enjoyed considerable success so far and has proved to be very powerful in the context of 1D quantum critical systems.

As explained in detail in [1, 2], $\text{Tr } \rho^n$ transforms as a one-point function of a primary field Φ_n under a conformal transformation. Its conformal dimension is

$$x_n = \frac{c}{12} \left(n - \frac{1}{n} \right). \quad (20)$$

The conformal mapping needed is the same as for the Loschmidt echo, with τ changed into 2ϵ (see figure 5):

$$w(z) = \frac{\epsilon}{2}(z + z^{-1}). \quad (21)$$

The Rényi entropy is given in this CFT calculation by

$$S_n \sim \frac{1}{1-n} \log |\langle \Phi_n(w) \rangle|. \quad (22)$$

The one-point function can be obtained by mapping back to the z half-plane (figure 5):

$$\langle \Phi_n(w) \rangle \propto \left| \frac{1}{\text{Im}(z)} \frac{dz}{dw} \right|^{x_n}, \quad (23)$$

and the entropy is expressed as

$$S_n \sim -\frac{c}{12} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \log \left| \frac{1}{\text{Im}(z)} \frac{dz}{dw} \right|. \quad (24)$$

Since the initial cut coincides with the bipartition, the operator lies between the two slits at some point $w = \theta$ on the real axis, with $-\epsilon < \theta < \epsilon$ (see figure 5). Inverting (21), we get

$$\left| \frac{1}{\text{Im}(z)} \frac{dz}{dw} \right| = \frac{\epsilon}{\epsilon^2 - \theta^2}. \quad (25)$$

Performing the Wick rotation $\theta \rightarrow i v_F t$ we recover the celebrated result [2] for the EE ($n = 1$)

$$S(t) = \frac{c}{3} \log t + \text{const} \quad (26)$$

in the limit $t \gg \epsilon$.

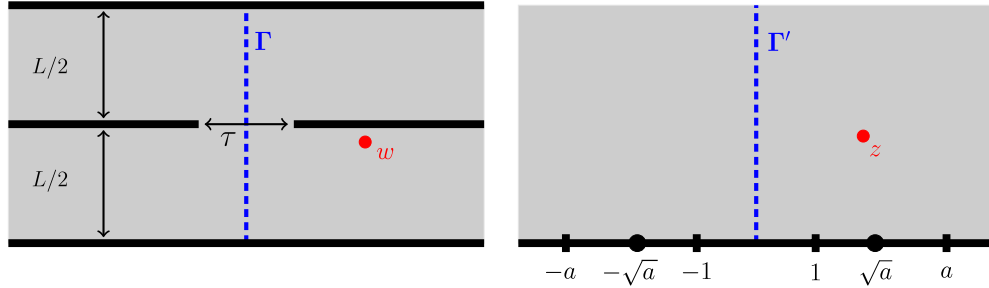


Figure 6. The pants geometry (left) and the upper half-plane $\mathbb{H}$ (right). The conformal transformation $w(z)$ is given by equation (27).

3.3. A simple finite size example

3.3.1. The Loschmidt echo. We consider now the case of a cut in the middle of the chain $L_A = L_B = L/2$. The conformal transformation which maps the upper half-plane onto the ‘double-pants’ geometry in figure 6 is

$$w(z) = \frac{L}{2\pi} \left[\log \left(\frac{z-1}{z+1} \right) + \log \left(\frac{z-a}{z+a} \right) - i\pi \right]. \quad (27)$$

This Schwarz–Christoffel mapping has singularities at $z = \pm 1, \pm a$, and extrema at $z = \pm\sqrt{a}$. The distance between the two slits is

$$\tau = |w(\sqrt{a}) - w(-\sqrt{a})| = \frac{4L}{\pi} \operatorname{arctanh}(1/\sqrt{a}). \quad (28)$$

Inverting this relation, we get

$$a(\tau) = \coth^2 \left(\frac{\pi\tau}{4L} \right). \quad (29)$$

Defining as before $f(z) = S(w, z)(dw/dz)^{-1}$, the residue that we have to calculate is then

$$\operatorname{Res}[f(z); z = \sqrt{a}] = \frac{3\pi a^2 + 6a + 1}{8L \sqrt{a}(a+1)}, \quad (30)$$

and the variation of the (logarithmic) Loschmidt echo with the imaginary time τ is

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \tau} = -\frac{\delta \log \mathcal{L}}{\delta \tau} = \frac{\pi c}{16L} \frac{a^2 + 6a + 1}{\sqrt{a}(a+1)} = \frac{\pi c}{4L} \frac{1}{\tanh(\pi\tau/L)}. \quad (31)$$

Integrating over τ , we get

$$\mathcal{F}(\tau) = -\log \mathcal{L}(\tau) = \frac{c}{4} \log |\sinh(\pi\tau/L)| + \text{const}. \quad (32)$$

Of course, the constant in (32) can still have a non-trivial dependence in L . This is indeed the case as can be shown using once again the Cardy–Peschel formula [50], with two angles 2π .³ This yields another logarithmic contribution $(c/4) \log L$. Performing the analytic continuation $\tau \rightarrow iv_F t + \epsilon$, the result can be written as

$$\mathcal{F}(t) \simeq \frac{c}{4} \log \left| \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi v_F t}{L} \right| + \text{const} \quad (t \gg \epsilon). \quad (33)$$

³ One can also use the method described here using an infinitesimal transformation $L \rightarrow L + \delta L$.

3.3.2. The entanglement entropy. We will here compute the EE for the case of an initial cut in the middle of the chain $L_A = L_B = L/2$. The bipartition coincides with the cut for now. As emphasized before [2], the calculation of the EE requires the analytic inversion of the conformal mapping (equations (27) and (28) with $\tau \rightarrow 2\epsilon$ as in section 3.3.1 and the same goes for figure 6). This is important in order for the final analytic continuation $\theta \rightarrow iv_F t$ to be meaningful. In this simple geometry it is indeed possible:

$$z(w) = \coth\left(\frac{\pi\epsilon}{2L}\right) \frac{1+\zeta}{1-\zeta} \quad \text{with} \quad \zeta = \sqrt{\frac{\sinh(\pi/L)(w+\epsilon)}{\sinh(\pi/L)(w-\epsilon)}}. \quad (34)$$

The one-point function of the Calabrese–Cardy twist operator must be evaluated at some point $w = \theta$, with θ real and $-\epsilon < \theta < \epsilon$:

$$\langle \Phi_n(w) \rangle \propto \left| \frac{1}{\text{Im}(z)} \frac{dz}{dw} \right|^{x_n} \quad (35)$$

$$\propto \left| \frac{\pi \sinh[(\pi/L)2\epsilon]}{2 \sinh[(\pi/L)(\epsilon+\theta)] \sinh[(\pi/L)(\epsilon-\theta)]} \right|^{x_n}. \quad (36)$$

Taking the analytic continuation $\theta \rightarrow iv_F t$, we find that in the limit $v_F t \gg \epsilon$.

$$S(t) = \frac{c}{3} \log \left| \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi v_F t}{L} \right| + \text{const.} \quad (37)$$

This precise result had already been guessed from numerical simulations in the quantum Ising chain in a transverse field; see [39, 40]. It is also possible to treat the more general case when the bipartition (i.e. the position of the twist operator) does not coincide with the position of the quench, as in [2] for the finite case. In our set-up the quench still happens at $L/2$, but the EE is measured for a subsystem A of length $L_A = L/2 - l$. The twist operator must therefore be evaluated at $w = \theta + il$, with $-\epsilon < \theta < \epsilon$. The calculation is more cumbersome, but can nevertheless be carried on to the end. We find after the analytic continuation $\theta \rightarrow it$, setting $v_F = 1$ for convenience,

$$S(t) \sim \frac{c}{12} \log \left| \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \left(\cos^2 \frac{\pi(t+i\epsilon)}{L} - \cos^2 \frac{\pi l}{L} \right) \times \left(\cos \frac{2\pi l}{L} \cosh \frac{2\pi\epsilon}{L} - \cos \frac{2\pi t}{L} + 2 \left| \cos^2 \frac{\pi(t-i\epsilon)}{L} - \cos^2 \frac{\pi l}{L} \right| \right) \right|. \quad (38)$$

For $t \gg \epsilon$ this expression can be further simplified (we reintroduce v_F in the formulae):

$$S(t) = \begin{cases} \frac{c}{6} \log L + \text{const}, & 0 < v_F t < l \quad \text{or} \quad L - l < v_F t < L \\ \frac{c}{6} \log \left\{ \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \left[\sin^2 \left(\frac{\pi v_F t}{L} \right) - \sin^2 \left(\frac{\pi l}{L} \right) \right] \right\} + \text{const}', & l < v_F t < L - l \end{cases} \quad (39)$$

$S(t)$ is of course periodic with period L/v_F . Notice also that the EE is constant at the beginning, until time l/v_F . A limit of interest is that of an infinite system $l, t \ll L$:

$$S(t) = \begin{cases} \frac{c}{6} \log l + \text{const}, & t < l \\ \frac{c}{6} \log (t^2 - l^2) + \text{const}', & t > l \end{cases} \quad (40)$$

where we recover the Calabrese–Cardy [2] result. Actually, one finds here that our results

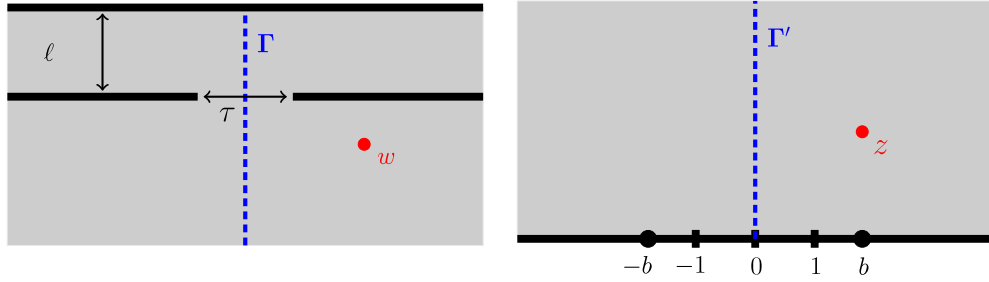


Figure 7. The semi-infinite geometry (left) and the upper half-plane $\mathbb{H}$ (right). The conformal transformation $w(z)$ is given by equation (41).

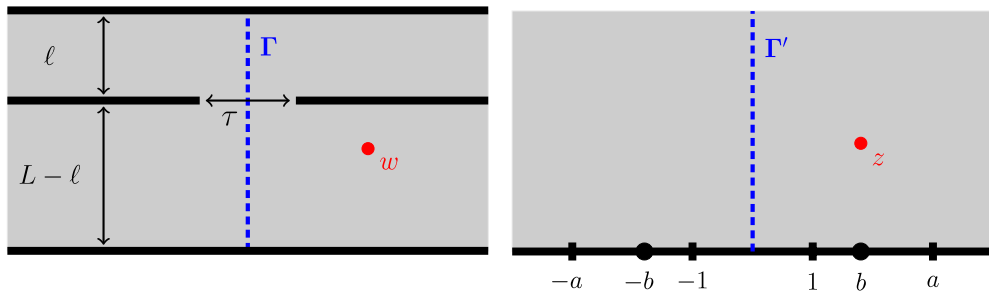


Figure 8. The ‘asymmetric double-pants’ geometry (left) and the upper half-plane $\mathbb{H}$ (right). The conformal transformation $w(z)$ is given by equation (47).

are nothing but the Calabrese–Cardy results in an infinite geometry, where $v_F t$ and l have been replaced by their ‘chord counterparts’ $(L/\pi) \sin(\pi v_F t/L)$ and $(L/\pi) \sin(\pi l/L)$. This simple relation with the infinite case is standard in CFT [2], but breaks down as soon as the quench is not located exactly in the middle of the strip (like in figure 8 if $L_A = \ell \neq L/2$). See equations (51) and (52) for an example where this trick does not apply (with $L_A = L/3$, $L_B = 2L/3$).

3.4. The semi-analytic method for the Loschmidt echo in other geometries

We are now interested in geometries where the cut is not in the middle of the chain ($L_A \neq L_B$). Usually, the loss of the left–right (when $L_A = L_B$) symmetry makes the problem much more complicated, and a full explicit solution for the EE and the LLE becomes less likely. However, we wish to show here that the difficulty can be circumvented, at least for the Loschmidt echo. The idea is to perform the analytic continuation semi-numerically. We explain this procedure in the case of the semi-infinite geometry $\ell = L_A \ll L_B, L$, and will use it extensively in the rest of this paper.

We consider a subsystem of size $L_A = \ell$, coupled at time $t = 0$ to a semi-infinite chain. In imaginary time, we need the semi-infinite geometry shown in figure 7. The Schwarz–Christoffel transformation mapping the upper half-plane to this semi-infinite geometry reads in this case

$$w(z) = \frac{\ell}{\pi} \left[\frac{2b^2}{1-b^2} \frac{1}{z} + \log \left(\frac{z+1}{1-z} \right) \right]. \quad (41)$$

Our parametrization of $w(z)$ ensures that $w'(\pm b) = 0$. The distance τ between the two slits is given by

$$\tau(b) = w(b) - w(-b) = \frac{2\ell}{\pi} \left[\frac{2b}{1-b^2} + \log \left(\frac{b+1}{b-1} \right) \right], \quad (42)$$

and the variation of the (logarithmic) Loschmidt echo $\mathcal{F} = -\log \mathcal{L}$ can be expressed as a residue of $f(z) = S(w, z)(dw/dz)^{-1}$ at $z = b$:

$$\delta \mathcal{F} = \frac{c}{6} \text{Res}[f(z); z = b] \delta \tau \quad (43)$$

$$= \frac{c}{6} \text{Res}[f(z); z = b] \frac{\delta \tau}{\delta b} \delta b. \quad (44)$$

We get

$$\mathcal{F}(b) = \frac{c}{6} \left(\text{Re} \left[\frac{2}{1-b^2} \right] + \frac{3}{2} \log |b| - \log |b^2 - 1| \right) \quad (45)$$

where $\text{Re}[a]$ is the real part of a . This is important because we now want to go back to real time. As already suggested, one important difference from the two preceding cases is that the equation (42) relating τ to b cannot be explicitly inverted. The analytical continuation ($\tau \rightarrow iv_{\text{F}}t + \epsilon$) can nevertheless be performed numerically. For each time t , we solve

$$iv_{\text{F}}t + \epsilon = \tau(b) = \frac{2\ell}{\pi} \left[\frac{2b}{1-b^2} + \log \left(\frac{b+1}{b-1} \right) \right], \quad (46)$$

and the solution $b(t)$ can be injected into equation (45). Some further technicalities are presented in appendix C.

3.5. Extension to arbitrary aspect ratios

3.5.1. The Loschmidt echo. The method developed in section 3.4 can be pushed further, to treat any aspect ratio $x = \ell/L = L_A/(L_A + L_B)$. The conformal transformation which maps the upper half-plane onto the ‘asymmetric double-pants’ geometry in figure 8 is given by

$$w(z) = \frac{L}{\pi} \left[x \log \left(\frac{z-1}{z+1} \right) + (1-x) \log \left(\frac{z-a}{z+a} \right) - i\pi \right]. \quad (47)$$

As before, we first need to determine the distance between the two slits $\tau = w(b) - w(-b)$, where b is the solution of $w'(\pm b) = 0$. We find

$$b^2 = a \frac{xa + (1-x)}{(1-x)a + x} \quad (48)$$

$$\tau = \frac{2L}{\pi} \left[x \log \left(\frac{b-1}{b+1} \right) + (1-x) \log \left(\frac{a-b}{a+b} \right) \right]. \quad (49)$$

Then the free energy can again be computed as a residue at $z = b$, and we get after some algebra

$$\mathcal{F}(a) = \frac{c}{6} \left[\frac{3}{4} \log |a| + \frac{3x^2 - 3x + 1}{x(1-x)} \log |a+1| - \frac{x^2 - x + 1}{x(1-x)} \log |a-1| + \frac{1}{4} \log |ax + (1-x)| + \frac{1}{4} \log |a(1-x) + x| \right]. \quad (50)$$

When x is the inverse of some integer ($x = 1/p$, $p \in \mathbb{N}$), getting a as a function of $\exp(\pi\tau/2L)$ amounts to finding the roots of a polynomial of degree $2p - 2$. Doing so for $\tau = iv_F t + \epsilon$, we get a whole set of solutions, but only one of them corresponds to the actual real-time LLE.

3.5.2. The entanglement entropy. The entanglement entropy turns out to be much more complicated in the asymmetric geometries. As already stated, the calculation of the one-point function requires the inversion of the conformal mapping of equation (47). When $x = 1/q$ where q is some integer, inverting the mapping amounts to finding the roots of a polynomial of degree q . An analytic expression for these is in principle available only for $q = 3$ and 4. Such an analytic expression is needed in order to perform the analytic continuation to real time. In practice, the expressions that we get for the entanglement entropy are gruesome, and not particularly illuminating. We managed to treat the $x = 1/3$ case, and present our result here for the sake of completeness. First we introduce the auxiliary function

$$f_\epsilon(t) = \frac{\{4(1-3\epsilon)[17 - \cos(3\pi t)] \cos(3\pi t/2) - 24i\sqrt{2}(1-\epsilon)\sqrt{1+16\epsilon - \cos(3\pi t)} \sin(3\pi t/2)\}^{1/3}}{(4+2\epsilon) \sin(3\pi t/2)}. \quad (51)$$

We denote by $g_\epsilon = \text{Re}(f_\epsilon)$ and $h_\epsilon = \text{Im}(f_\epsilon)$ the real and imaginary parts of f_ϵ . We also set $v_F L = 1$ for convenience. The EE can then be expressed using $f_\epsilon(t)$ and its derivative $f'_\epsilon(t) = g'_\epsilon(t) + ih'_\epsilon(t)$:

$$S(t) = \frac{c}{12} \log \left\{ \frac{[h_\epsilon(t)]^2}{[(3\pi/2) \csc^2(3\pi t/2) + g'_\epsilon(t)]^2 - 3[h'_\epsilon(t)]^2} \right\} + \text{const.} \quad (\epsilon \ll t < 2/3), \quad (52)$$

where $\csc u = 1/\sin u$. It is important to keep the regulator ϵ finite in equation (52), because the denominator is of order ϵ . We also note that this expression can probably be further simplified. A comparison with numerical simulations is shown in section 4.

4. Light-cone effects: plateaus of the LLE and non-universal decay of the entanglement entropy

We wish now to interpret some of the results that we derived for the Loschmidt echo, as well as for the entanglement entropy. As emphasized in the introduction, we are focusing here mainly on finite size effects. These are especially interesting in the case of a local quench, because the quasi-particles emitted at $t = 0$ can bounce back on the boundaries. Now something interesting happens when the left-right periodicity is broken, $L_A \neq L_B$: for certain periods of time, all the quasi-particles can be in the same subsystem (see figure 9). Since they are supposed to transport information about entanglement and

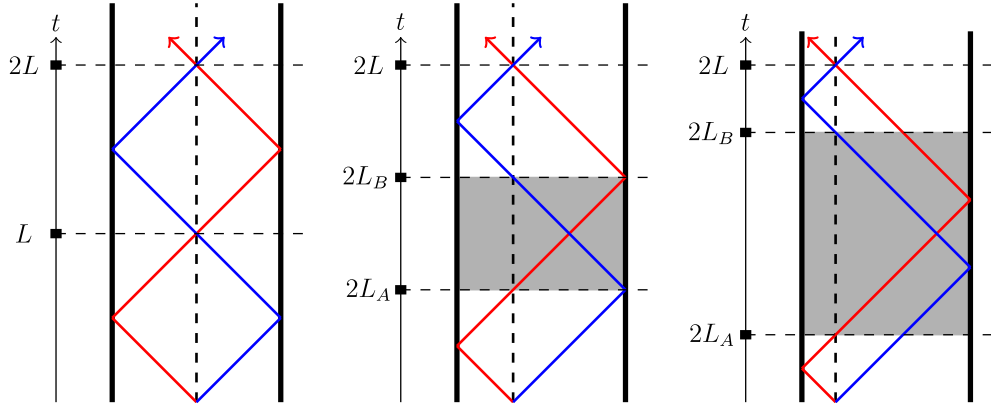


Figure 9. A diagram showing quasi-particles emitted at $t = 0$ by the local quench. They propagate at the speed of light v_F and bounce against the wall. Left: $x = 1/2$; centre: $x = 1/3$; right: $x = 1/5$. The plateau regions (shaded in grey) correspond to the case where the two quasi-particles are in the same subsystem.

correlations, it is reasonable to expect the behaviours of both the (logarithmic) Loschmidt echo and the EE to drastically change. This is indeed the case; both quantities exhibit light-cone effects. However, we will see that they are quite different. For the EE we see a slow non-symmetric decay, whereas we get striking plateaus for the LLE.

We also wish to compare our analytic results to several numerical simulations for free fermionic spin chains, which are described in the continuum limit by CFT with central charges $c = 1$ or $1/2$. This section is organized as follows. First we give some details about the model—the so called *XY* chain in a transverse field—and show how the quasi-particles can be identified. We then discuss separately the behaviours of the entanglement entropy and the Loschmidt echo. Finally we introduce a variant of the Loschmidt echo (‘detector geometry’) specifically constructed to probe the light-cone effect, and discuss the results.

4.1. The *XY* spin chain in a transverse field

We consider the following Hamiltonian:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{L-1} \left[\left(\frac{1+r}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-r}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \right] - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z, \quad (53)$$

where the boundary conditions for the spins are free and L is assumed to be even. As is well known, H can also be expressed as a quadratic form in fermionic operators, which makes it one of the simplest exactly solvable spin chains. The fermionic structure also allows us to calculate numerically both the entanglement entropy and the Loschmidt echo for very large system sizes. The phase diagram is quite rich. In particular there are two critical lines, lying in different universality classes.

4.1.1. The XX chain: the free boson critical line. This corresponds to $r = 0$ and $-1 < h < 1$. H can in this case be rewritten up to an unimportant constant as

$$H = \sum_{m=1}^L \epsilon_m c_m^\dagger c_m, \quad \epsilon_m = -h - \cos \left(\frac{m\pi}{L+1} \right), \quad (54)$$

where we have the usual anticommutation relations $\{c_m, c_n^\dagger\} = \delta_{mn}$ and $\{c_m, c_n\} = \{c_m^\dagger, c_n^\dagger\} = 0$ for the fermions. The quasi-momenta are the $k_m = m\pi/(L+1)$ and the Brillouin zone extends over the interval $(0, \pi)$. At zero magnetic field $h = 0$, the ground state can simply be obtained by filling half of the first quasi-momentum:

$$E_0(L) = - \sum_{m=1}^{L/2} \cos\left(\frac{m\pi}{L+1}\right). \quad (55)$$

The asymptotics of E_0 when $L \rightarrow \infty$ can be accessed using the Euler–Maclaurin formula:

$$E_0(L) = \alpha L + \beta - \frac{\pi}{24L} + \mathcal{O}(1/L^2) \quad (56)$$

α and β are non-universal constants and direct comparison with equation (3) yields $v_F c = 1$. The Fermi velocity can simply be calculated from the dispersion relation, $v_F = |d\epsilon/dk|_{k=k_F=\pi/2} = 1$ and we get the textbook result that the XX chain lies in the $c = 1$ (free boson) universality class. As already explained, we expect that the local quench will mainly generate low energy excitations, and therefore at energies close to the Fermi level. In this region, the dispersion relation can be linearized, and this is precisely what the CFT describes.

At non-zero magnetic field, the filling fraction is no longer $1/2$ and the number of fermions is an integer $n \neq L/2$. This case turns out to be trickier. Let us focus for the moment on the case where $n = \rho L$, where ρ is some rational number. The ground state energy is

$$E_0(L) = - \sum_{m=1}^{\rho L} \cos\left(\frac{m\pi}{L+1}\right), \quad (57)$$

and applying the Euler–Maclaurin formula we get ($v_F = \sin k_F \sim \sin \rho\pi$)

$$E_0(L) = \alpha' L + \beta' - \frac{\pi v_F}{24L} [1 - 12(\rho - 1/2)^2] + \mathcal{O}(1/L^2). \quad (58)$$

To understand this result and its implications, we follow Zagoskin and Affleck [51]. Let us first define our convention for the Fermi level. We choose to place it between the last occupied and the first empty wavevector:

$$k_F = \pi \frac{n + 1/2}{L + 1} = \pi \frac{\rho L + 1/2}{L + 1}. \quad (59)$$

Except at half-filling $\rho = 1/2$, the particle–hole symmetry is not exact on the lattice: $\epsilon(k_n) - \epsilon(k_F) \neq \epsilon(k_F) - \epsilon(k_{n+1})$. This effect has surprisingly important consequences in the continuum limit. In a bosonization picture, it acts as a phase shift [51] and changes the effective boundary conditions on the boson field.

As explained in [51], this difficulty can usually be circumvented by choosing appropriate conventions for the length of the chain and the number n of fermions. For example at quarter-filling, choosing the length of the chain as $L = 4n + 1$ restores the particle–hole symmetry and therefore cancels the anomalous term $12(1/4 - 1/2)^2$. This yields the desirable result $c = 1$ for the central charge. In this case the boundary conditions at either end of the chain are the same, which is easier to treat from a CFT perspective.

However, we are interested here in the effect of a local quench, where the interaction between two subsystems A and B is switched on. For parity reasons this trick cannot be applied to the chains A , B and $A \cup B$ at the same time. In other words, it is not possible (away from half-filling) to maintain the same boundary condition everywhere and we must introduce boundary changing operators in the CFT calculation. It is known that they do not affect the leading term in the entanglement entropy, and we therefore expect our formulae to hold away from half-filling in that case. However, these operators can have a noticeable effect on the scaling behaviour of the (logarithmic) Loschmidt echo and we expect our results to break down away from half-filling. Although these effects can be treated by standard CFT techniques, we do not study them in this paper. Therefore, we will stick to numerical checks at half-filling. Finally, let us mention that this discussion also applies to the XXZ chain in a magnetic field. There is also a phase shift away from half-filling. It takes a more complicated form which has been computed using Bethe-ansatz techniques [52, 53].

4.1.2. The Ising critical line. This corresponds to $h = 1$ and $r > 0$. In this case the Hamiltonian can be diagonalized by a Bogoliubov transformation:

$$H = \sum_{m=1}^L \varepsilon_m (d_m^\dagger d_m - 1/2) \quad (60)$$

and the one-particle energies are given by

$$\varepsilon_m = \sqrt{(h + \cos k_m)^2 + r^2 \sin^2 k_m}. \quad (61)$$

The wavevectors k_m can be obtained as solutions of an implicit equation, and lie in the interval $(0, \pi)$. For $r = 1$ we have the Ising chain in transverse field, and they take a simple form:

$$k_m = \frac{m\pi}{L + 1/2}, \quad m = 1, \dots, L. \quad (62)$$

This model is known to have central charge $c = 1/2$ for all values of $r > 0$. In the continuum limit, the dispersion relation is

$$\varepsilon(k) = \sqrt{(1 + \cos k)^2 + r^2 \sin^2 k}, \quad (63)$$

the Fermi momentum is at $k_F = \pi$, the Fermi velocity is $v_F = d\varepsilon/dk|_{k=\pi} = r$, and the CFT again describes excitations close to the Fermi point. For $r < \sqrt{3}/2$, something interesting happens: $\varepsilon(k)$ is not convex and the Fermi speed v_F is not the fastest speed available for the excitations (see figure 10 for an example). This maximum speed

$$v_{\max} = \max_k v(k) = \max_k \left| \frac{d\varepsilon}{dk} \right| \quad (64)$$

is sometimes called the Lieb–Robinson speed [54] and corresponds to the maximum velocity allowed for the propagation of a signal in the quantum system. Its role in the context of global quenches has been emphasized [55]–[57]. As we shall see, these fast particles—which propagate faster than the CFT particles discussed in the introduction—affect both the entanglement entropy and the Loschmidt echo. Conversely, in the case $r > \sqrt{3}/2$, the Fermi speed is the fastest available speed, and the behaviours of the EE and the Loschmidt echo are both rather affected by particles which propagate slowly (compared to v_F).

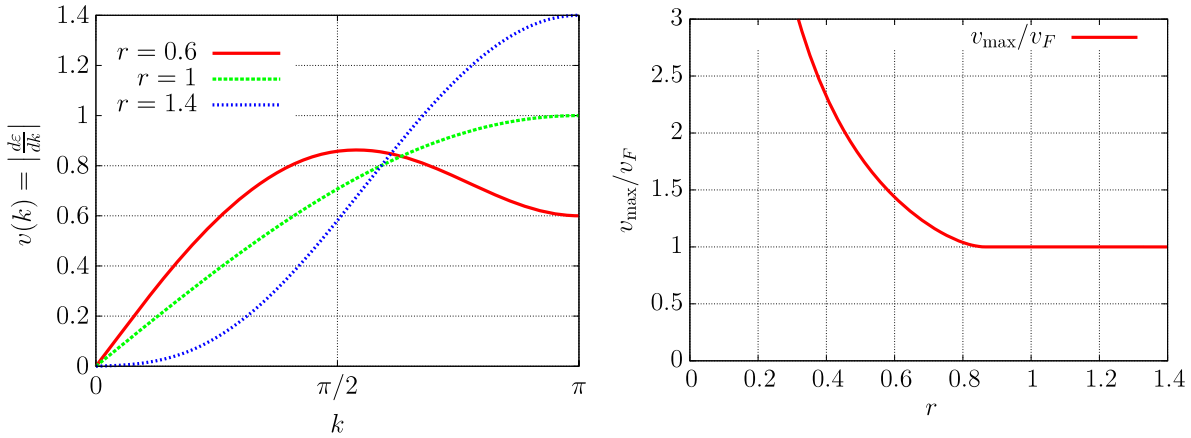


Figure 10. Left panel: the group velocity $v(k) = |d\varepsilon/dk|$ for three different values of r ($r = 0.6, 1, 1.4$). $v_{\max}$ is the maximum group velocity allowed. Right panel: the ratio $v_{\max}/v_F$, where v_F is the Fermi velocity $v_F = v(k = \pi)$. For $r < \sqrt{3}/2$, the ratio is greater than 1.

4.2. Non-universal decay of the entanglement entropy

We first focus our attention on the EE. The only asymmetric finite size system that we have been able to treat corresponds to the aspect ratio $x = L_A/L = \ell/L = 1/3$. The solution given by equations (51) and (52) can be compared to numerical simulations in free fermionic systems. Figure 11 shows such a comparison for the XX chain for very large system sizes, up to $L = 3072$. The agreement between the two is excellent at the beginning, but suddenly breaks down precisely at the time ($t = 2L_A/v_F$) when the two light-cone boundaries (or positions of left-moving and right-moving CFT quasi-particles) both lie in subsystem B (see figure 9, in the middle). Then the entropy slowly decays up to time $t = 2L_B/v_F$, when the CFT calculation becomes accurate again. Such a decay was already observed in the semi-infinite geometry in [41], also for the XX chain. This can be attributed to the slower quasi-particles progressively entering the subsystem B .

Several interesting observations can be made:

- Global scaling with the system size L : in the ‘CFT region’ (corresponding to $t < 2L_A/v_F$ and $t > 2L_B/v_F$ in the first period) the numerical simulations show a global scaling $(c/3) \log L$. This is a consequence of the presence of two slits in the CFT set-up, which both contribute [1] to the $(c/6) \log L$ for open chains. This is not true in the ‘decay region’ ($2L_A/v_F < t < 2L_B/v_F$) where the global scaling is half of the previous one: $(c/6) \log L$. This can be interpreted as follows. From the point of view of the subsystem A , there are no longer CFT quasi-particles in A and thus A sees—up to non-universal contributions—a wavefunction close to the ground state wavefunction $|A \cup B\rangle$ of the total system, which contributes exactly to $(c/6) \log L$.
- At $t = 2L_B$, the CFT particles are again in their own subsystem and contribute to the EE as predicted by CFT. However, one could expect non-universal contributions to degrade the agreement with the numerics. This effect seems to be negligible (figure 11).

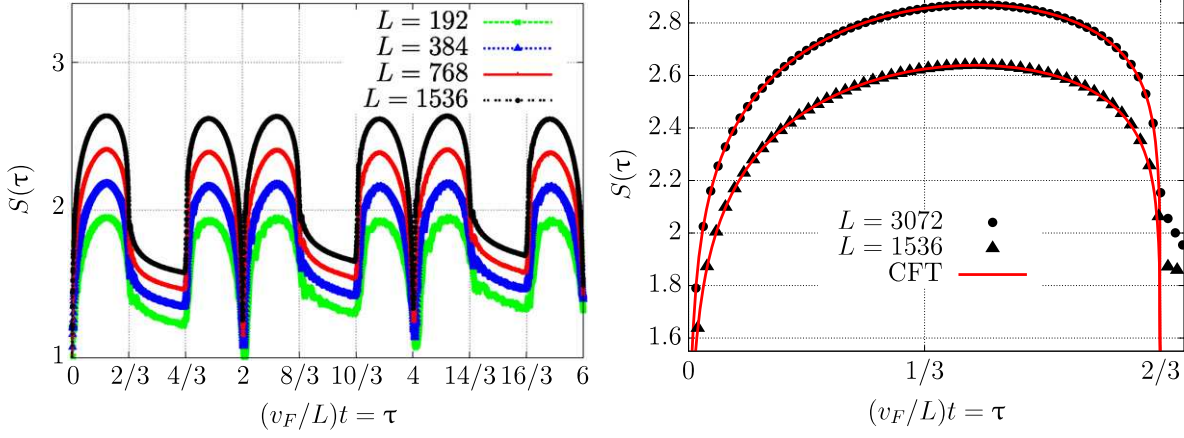


Figure 11. Entanglement entropy for the aspect ratio $x = 1/3$. Left panel: numerical simulations for the XX chain, shown against the rescaled time $(v_F/L)t$. Right panel: a zoom on the ‘CFT region’ $0 < t < 2L/(3v_F)$, and comparison with the analytical calculation of equations (51) and (52).

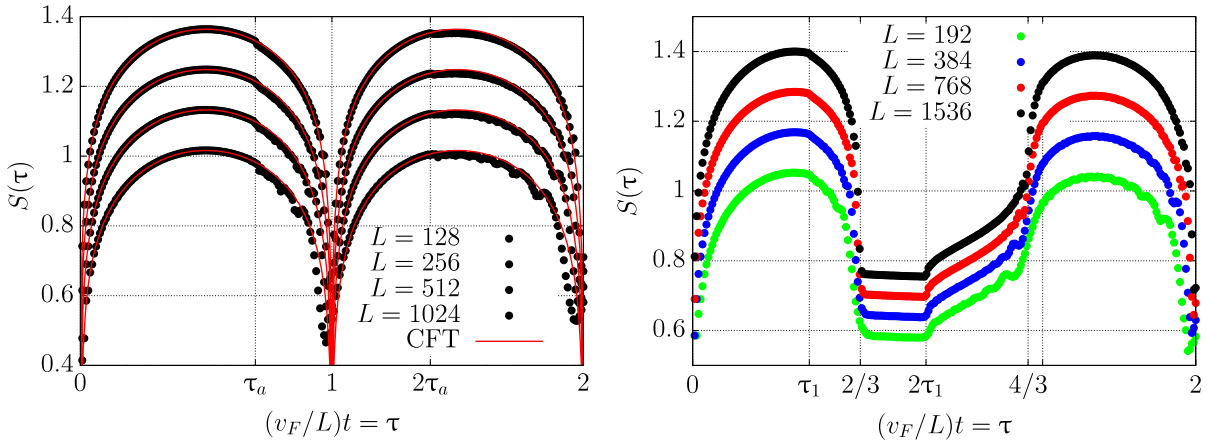


Figure 12. Left panel: the entanglement entropy as a function of the rescaled time $\tau = (v_F/L)t$ for the ratio $x = 1/2$, the anisotropy $r = 0.6$ and for systems sizes $L = 128, 256, 512, 1024$. At rescaled times $\tau_a = v_F/v_{\max}$ and $2\tau_a$ the CFT calculation breaks down, although it remains a good approximation. Right panel: the entanglement entropy for $x = 1/3$, $r = 0.6$ and for system sizes $L = 192, 384, 768, 1536$. The rescaled times of interest are $\tau_1 = 2v_F/(3v_{\max})$, $2\tau_1$ and $3\tau_1$.

To test the universality of the EE, and the effect of the non-CFT quasi-particles, we also performed numerical checks for the XY chain in a transverse field, for various values of the r parameter in the Ising critical line. As explained in section 4.1, the case $r < \sqrt{3}/2$ is particularly interesting, and puts the CFT calculation to a more serious test. Some results are presented in figure 12, for $r = 0.6$ and the aspect ratios $x = 1/2$ and $1/3$.

As explained in section 4.1.2, the maximum speed is not the Fermi speed in this case, and some quasi-particles will therefore enter the subsystem B before their CFT

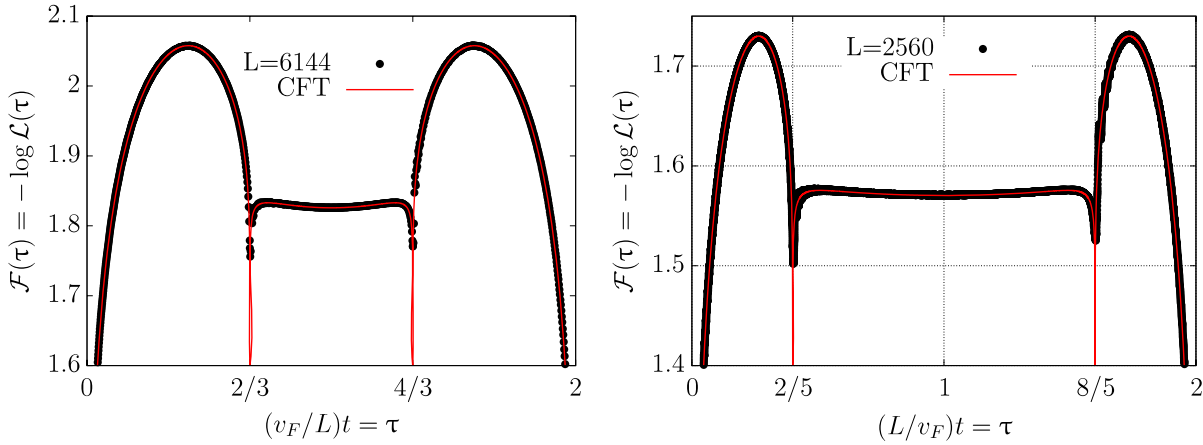


Figure 13. The logarithmic Loschmidt echo $\mathcal{F}(t) = -\log \mathcal{L}(t)$ for the aspect ratios $x = L_A/(L_A + L_B) = 1/3$ (left panel) and $x = 1/5$ (right panel). Red curve: CFT calculation. Black points: numerical calculation for the XX chain.

counterparts do. Although the effect of these fast particles should be small, it does not seem to disappear in the thermodynamic limit. For example in the symmetric case $x = 1/2$, there is *a priori* no decay region, and one expects the EE to be periodic with period $T = L/v_F$. However, at time $t = L/v_{\max}$ the fast particles suddenly change subsystem, and a small deflation—analogueous to the one observed in [57] for a global quench—can clearly be seen for the EE. The CFT calculation does not seem to hold any more, due to these non-universal effects. The same phenomenon happens at time $t = 2L/v_{\max}$. For the aspect ratio $x = 1/3$ the same interpretation holds. Their influence is however quite visible in the decay region.

4.3. Plateaus of the LLE

We now turn to the (logarithmic) Loschmidt echo. In the symmetric case $L_A = L_B$, its behaviour is very similar to that of the EE, and the two quantities are given by very similar formulae, (33)–(37). For an asymmetric system $L_A \neq L_B$ such a close similarity between the EE and the LLE does not hold any more, especially when the two quasi-particles are in the same subsystem (i.e. the ‘decay region’). The behaviour of the LLE is particularly striking: we get very flat plateaus, which can be accurately calculated in CFT (equations (48) and (50)). See for example figure 13, for a comparison with the numerics in the cases $x = \ell/L = L_A/(L_A + L_B) = 1/3$ and $x = 1/5$. Contrary to the EE case, these plateaus are also symmetric with respect to $t \mapsto 2L/v_F - t$, and have the same global scaling $(c/4) \log L$ as the other parts of the curve. To check the universality of our calculation, we also performed numerical checks for the XY chain in the case $v_{\max} > v_F$. The results are shown in figure 14 for the aspect ratios $x = 1/2$ and $1/3$. Interestingly, the Lieb–Robinson quasi-particles have a different effect on the LLE compared to the EE. Finite size effects are enhanced when they change subsystem, but these diminish on increasing L . For very big system sizes the numerical calculations match our analytical prediction very well, even in the ‘plateau region’. It therefore seems that the Loschmidt echo is less sensitive to non-universal effects than the EE. It is also interesting to study

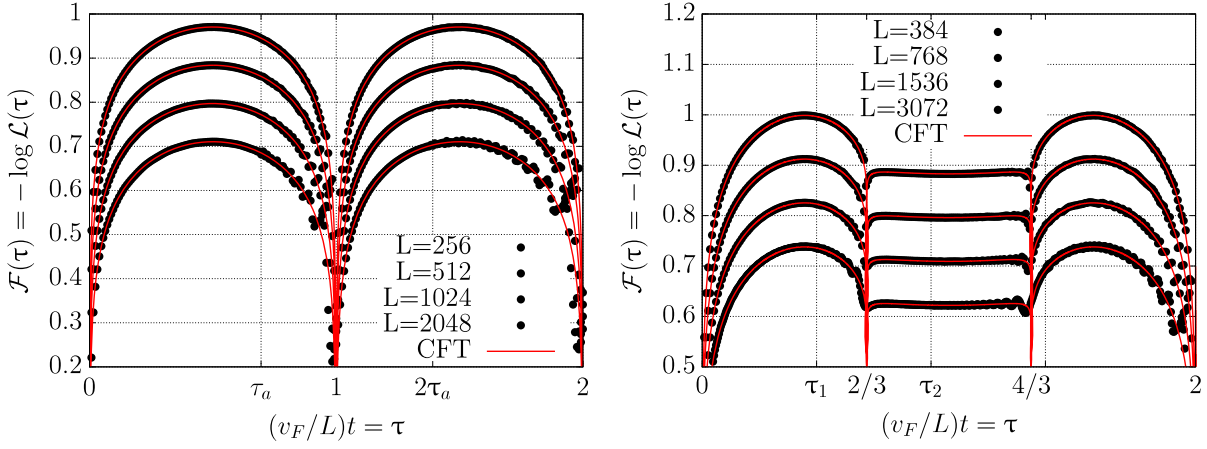


Figure 14. Left panel: the logarithmic Loschmidt echo as a function of rescaled time $\tau = (v_F/L)t$ for the aspect ratio $x = 1/2$, the anisotropy $r = 0.6$ and for system sizes $L = 256, 512, 1024, 2048$. Right panel: the logarithmic Loschmidt echo as a function of rescaled time $\tau = (v_F/L)t$ for the aspect ratio $x = 1/3$, the anisotropy $r = 0.6$ and for system sizes $L = 384, 768, 1536, 3072$. In both cases, finite size effects decrease for bigger and bigger system sizes. Note that, contrary to the entanglement entropy case, the presence of fast particles ($v_{\max} > v_F$) does not spoil the plateaus.

the semi-infinite geometry $L_A = \ell \ll L = L_A + L_B$. In this case the period is infinite, and one gets a single plateau starting at time $t = 2\ell/v_F$. Although the analytical solution is given in implicit form, we can extract some interesting quantitative features of the small time and long time behaviours of the LLE. $\mathcal{F}(t) = -\log \mathcal{L}(t)$ is shown in figure 15. We now discuss this curve (equations (45) and (46)) in some detail. At small time $t \ll \ell$, we recover the expected behaviour [19]

$$\mathcal{F}(t) = \frac{c}{4} \log t + \text{const.} \quad (65)$$

This is simply a consequence of the fact that the quasi-particles do not feel the left boundary yet, and behave as if the system was infinite. Then $\mathcal{F}(t)$ keeps growing, up to a certain time when it reaches a maximum. This time $t_{\max}$ can even be calculated exactly:

$$t_{\max} = \frac{2}{\pi} \left[\frac{\sqrt{2\sqrt{3}-3}}{\sqrt{3}-1} + \arctan \left(\frac{\sqrt{2\sqrt{3}-3}}{2-\sqrt{3}} \right) \right] \frac{\ell}{v_F} \simeq 1.3538 \frac{\ell}{v_F}. \quad (66)$$

Also, the long time behaviour can be extracted⁴:

$$\mathcal{F}(t) - \mathcal{F}(\infty) = \frac{c}{6\pi^2(v_F t/\ell)^2} + \mathcal{O}((v_F t/\ell)^{-3}). \quad (67)$$

The decay is algebraic, with a small—but universal—prefactor. This is actually the main reason for the plateau being so flat.

⁴ For $t \rightarrow \infty$, the solution $a(t)$ of equation (46) can be written as $a(t) = \frac{b(t)+1}{b(t)-1}$, where $b(t) = \alpha(t) - i\beta(t)$ is a complex number with very small modulus. One can then obtain the following asymptotic expansions: $\beta(t) \sim \frac{1}{\pi(v_F t/\ell+1)}$ and $\alpha(t) \sim -2\beta(t)^2 \log \beta(t)$. Injecting these into equation (45) and expanding around $a = 0$, we get the result.

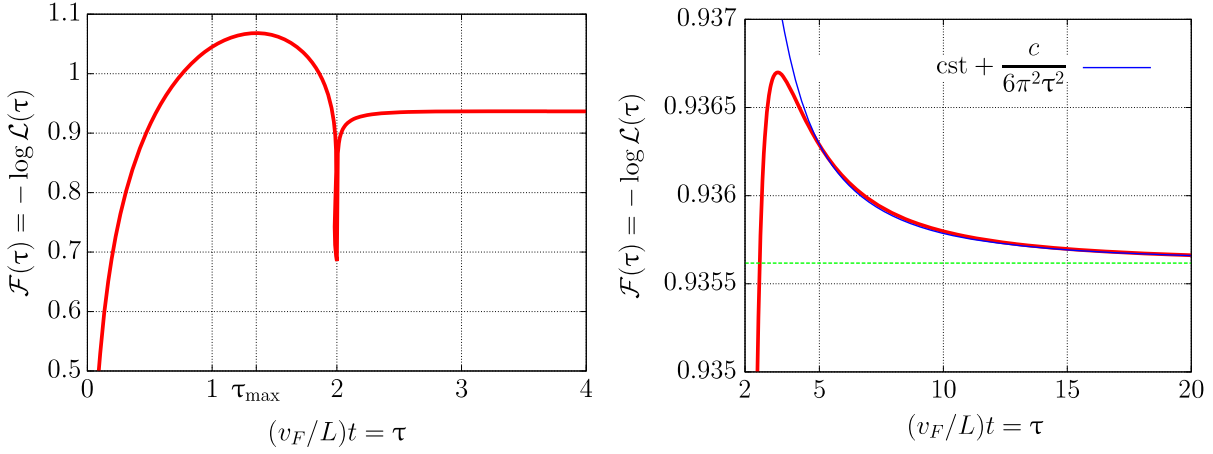


Figure 15. Left panel: the (logarithmic) Loschmidt echo $\mathcal{F}(t) = -\log \mathcal{L}(t)$ for the semi-infinite geometry and central charge $c = 1$. Right panel: a zoom on the plateau, for $v_F t/L > 2$. The red curve is $\mathcal{F}(t)$ and the thin blue curve is the asymptotic expansion of equation (67).

4.4. ‘Detector’ geometries

To further probe the light-cone effects, and confirm the appearance of the plateaus as a generic phenomenon, we introduce here a variant of the (logarithmic) Loschmidt echo. We call it a ‘detector’ for reasons which will become transparent later. It is defined as

$$\mathcal{D}(t) = -\log |\langle A \otimes B | e^{iHt} | C \otimes D \otimes E \rangle|^2. \quad (68)$$

The difference is that the wavefunction after a time t $|\psi(t)\rangle = e^{iHt} |A \otimes B\rangle$ is not compared with the initial state, but with another tensor product of three ground states $|C\rangle$, $|D\rangle$, and $|E\rangle$; see figure 16. For simplicity we only consider the case $L_A = L_B = L/2$ and $L_C = L_E$ here, so the only remaining free length in the problem is the middle one, L_D . Now what should be the behaviour of such a quantity? Obviously the quench at $t = 0$ is the same, so there are again quasi-particles emitted at the interface between subsystems A and B . They propagate at speed v_F , but from the point of view of the final state $|C \otimes D \otimes E\rangle$, they are at the beginning in the same subsystem, namely D . This situation is particularly interesting, because it means that the detector $\mathcal{D}(t)$ should start with a plateau, up to a time $t = L_D/2$, when the quasi-particles emitted to the left and to the right simultaneously get out of D . In this sense, the final state is able to ‘detect’ the quasi-particles. One other advantage is that $\mathcal{D}(t)$ can also be computed in CFT, using the same techniques as for the Loschmidt echo. The technical details are presented in appendix B. We present here only the results, focusing on two geometries:

- The ‘symmetric detector’ $L_D = L/2$ (and therefore $L_C = L_E = L/4$). In this case the enhanced symmetry even allows a full explicit solution (we set $v_F = 1$):

$$\mathcal{D}(t) = \frac{c}{4} \left[\frac{1}{2} \log |2 \cos 2\pi t/L| + 2 \log |1 - e^{i\pi t/L} \sqrt{2 \cos 2\pi t/L}| \right], \quad 0 \leq t \leq L/2. \quad (69)$$

This happens to be the only geometry in which the plateau can be obtained in explicit form. $\mathcal{D}$ also satisfies $\mathcal{D}(L - t) = \mathcal{D}(t)$, $\mathcal{D}(t + L) = \mathcal{D}(t)$ and is quadratic at small times $\mathcal{D}(t) \propto t^2$, like the Loschmidt echo at long times for the semi-infinite geometry.

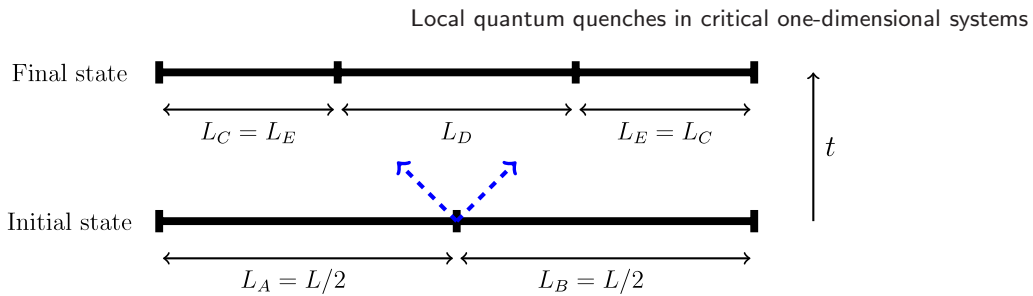


Figure 16. The system is initially prepared in the ground state $|A \otimes B\rangle$ of $H_A + H_B$, then at time $t > 0$ it evolves with the total Hamiltonian $H = H_A + H_B + H_{AB}^I$. Finally it is compared with the ground state $|C \otimes D \otimes E\rangle$ of $H_C + H_D + H_E$. Blue dashed arrows are a graphical representation of the quasi-particles emitted after the quench.

- The ‘infinite detector’ $L_D = \ell \ll L$. The solution is this time not fully explicit, but $\mathcal{D}(t)$ can nevertheless be expressed using the Lambert W function, the solution in the complex plane of the implicit equation $we^w = z$:

$$\mathcal{D}(t) = \frac{c}{8} \log |a(t)[a(t) - 1]|, \quad a(t) = W(e^{i\pi 2t/\ell - 1}) + 1. \quad (70)$$

As for the Loschmidt echo in the semi-infinite geometry, several interesting features can be extracted from this implicit solution. At small times, the behaviour of $\mathcal{D}(t)$ is $\propto t^2$, and the plateau lasts up to $t = \ell/2$, consistently with the quasi-particle interpretation. After this, the quasi-particles (and $\mathcal{D}(t)$) no longer feel the subtleties of the detector geometry, and we get⁵ for $t/\ell \gg 1$

$$\mathcal{D}(t) \sim \frac{c}{4} \log t. \quad (71)$$

We recover the result for the infinite geometry.

We also performed numerical tests of the formulae (69) and (70) for the XX chain and for very large system sizes. The numerical results in figure 17 are in excellent agreement with our analytical calculations.

5. Conclusion

In this paper, we study the time evolution of a one-dimensional quantum critical system after a local quench. This ‘cut and glue’ quench is particular, in the sense that it corresponds to a single conformal boundary condition in the scaling limit. This is clearly restrictive, and the problem of quenches corresponding to different conformal boundary conditions (and more generically to the possible RG flows between them) deserves some further investigation. For such a quench, we have argued that the evolution of the system is periodic, with period $2L/v_F$ if L is the size of the system and v_F is the Fermi velocity. This is true only in the continuum limit, but we observe that it is a very good approximation for large finite size systems, which typically exhibit a number oscillations just after the

⁵ The solution $a(t) = -\alpha(t) + i\beta(t)$ admits the following asymptotic expansion for $t \gg \ell$: $\alpha(t) \sim \log(\pi t/\ell)$ and $\beta(t) \sim \pi t/\ell$.

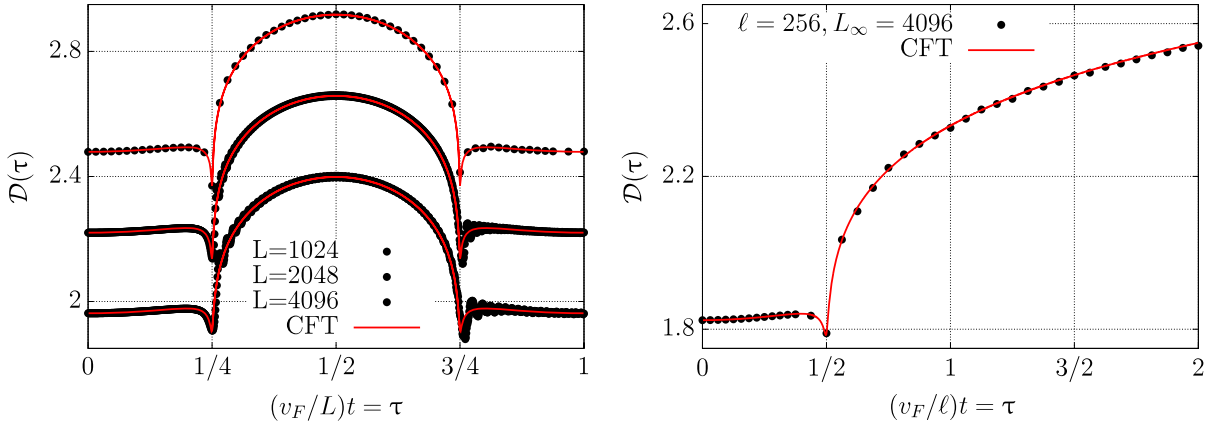


Figure 17. Left panel: the symmetric detector. Black dots are the numerical points for system sizes $L = 1024, 2048, 4096$, whereas red curves are the CFT prediction of equation (69). Right panel: the infinite detector for $\ell = 256$ and $L = L_\infty = 4096 \gg \ell$. Black dots are the numerical points, whereas the red curve is the prediction of equation (70).

quench. For very long times however ($t \gg L/v_F$), the finite size effects spoil the periodicity of the system and the CFT description is no longer accurate.

The restriction to this particular type of quench also allows us to get simple universal results which complete the ones obtained over the past few years by Calabrese and Cardy [1, 2] and Eisler and Peschel [3]. Moreover, we aimed to give some further evidence that quantities defined as simple *overlaps* can mimic the behaviour of the EE [19]. Our motivation comes partly from the fact that such overlaps should be, in principle, much easier to measure in real experiments than the EE or Rényi entropies. Indeed, such overlaps are nothing but the *probabilities* of observing the system in its ground state after a quench $H \rightarrow H'$. Although Cardy [18] recently proposed a type of local quench that would lead to the measurement of the Rényi entropies, it seems to us that the ‘cut and glue’ quench is still more likely to lead to a realistic implementation. In this paper we thus focus on overlaps, and more precisely on the (logarithmic) Loschmidt echo (which is a time-dependent version of the LBF introduced in [19]), and compare its behaviour with that of the EE. From a CFT perspective, both quantities can be computed through analytic continuation $\tau \rightarrow v_F t + i\epsilon$, where ϵ is a UV cut-off. However, for general geometries, it is not possible to perform this analytic continuation to compute the EE (because of the absence of an analytic expression for the one-point function in generic cases). In contrast, we find that for the LLE, a semi-analytic treatment involving a numerical solution gives very accurate results.

We provide numerical checks of our analytic calculations in free fermion systems. We observe light-cone effects, both for the EE and for the LLE. These effects, however, are not quite the same for the two quantities. For a ‘cut and glue’ quench $H_A + H_B \rightarrow H = H_A + H_B + H_{AB}^I$ ($L_A < L_B$), within the first oscillation of the system $0 < t < 2L/v_F$, one can distinguish two regions. The ‘CFT region’ corresponds to $t < 2L_A/v_F$ or $t > 2L_B/v_F$, where we observe that both the EE and the LLE are very well approximated by the CFT calculation. Then we have the ‘decay region’ or ‘plateau region’ ($2L_A/v_F < t < 2L_B/v_F$),

where the discrepancy between the behaviours of the EE and the LLE is more important. The EE decays slowly, as observed first by Eisler and Peschel [3] for a semi-infinite system; they interpreted this decay as an effect due to slow particles. The LLE does not exhibit such a decay, but rather stays almost constant, leading to pictures with flat plateaus. For large systems these plateaus are very well approximated by the CFT result, which predicts a behaviour that is symmetric under $t \mapsto 2L/v_F - t$. The EE is more sensitive to non-universal effects than the LLE for this ‘cut and glue’ quench. We observe, however, that the Loschmidt echo depends on the filling fraction of the fermion systems which we investigate in the $c = 1$ case. The CFT results that we have obtained in this paper for the LLE turn out to be correct only at half-filling, and these must be modified for other filling fractions, as discussed in section 4.1.1 (the same phenomenon appeared already for the LBF).

Finally, it would be interesting to have checks of all the CFT results—which have accumulated over the past few years—coming from other fields and using different techniques such as integrable systems ones [58]–[60] or numerical calculations for interacting systems. Another important direction is to study how these CFT results can be related to quenches of more general types, where the parameters in the Hamiltonian are not turned on/off instantaneously, but rather continuously on a short timescale. It is known that the behaviour of the system can be affected in different ways at short time (see for example [23]). CFT techniques lead to results that are valid only on longer timescales. How to relate these different regimes is an interesting open question. More generally, it is not clear to us what are the most relevant physical aspects which are missed in these CFT models, and how one could make the latter more realistic. This seems to be of crucial importance if one believes that such results are to be compared with ones from an actual experiment.

Acknowledgments

We wish to thank Jesper Jacobsen for early collaboration on this topic. We also thank Roberto Bondesan, Grégoire Misguich, Hubert Saleur and Francis Song for several insightful discussions. We thank Pasquale Calabrese and Vincent Pasquier for very useful suggestions, for carefully reading this paper, and for their constant encouragement to publish these results. JD acknowledges support from Yale University through a Yale Postdoctoral Prize Fellowship.

Appendix A. The Loschmidt echo and free fermions

A.1. Diagonalization

The general method for computing the EE has been known since Peschel [61]. For local quenches of the type that we are interested in, we refer the reader to [3, 41], where the procedure is explained in detail. Calculating the EE usually amounts to diagonalizing a $2L_A \times 2L_A$ matrix.

We give here some details about the numerical computation of the Loschmidt echo in free fermionic systems. We consider the XY chain in a transverse field

$$H_{AUB} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{L-1} \left(\frac{1+r}{2} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \frac{1-r}{2} \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \right) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z. \quad (\text{A.1})$$

A Jordan–Wigner transformation

$$\sigma_j^x + i\sigma_j^y = 2c_j^\dagger \exp\left(\sum_{\ell=1}^{j-1} c_\ell^\dagger c_\ell\right) \quad (\text{A.2})$$

$$\sigma_j^z = 2c_j^\dagger c_j - 1 \quad (\text{A.3})$$

then allows us to express the Hamiltonian as a quadratic form in the fermionic operators:

$$H_{A \cup B} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{L-1} \left[\left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) + r \left(c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_{j+1} c_j \right) \right] - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \left(2c_j^\dagger c_j - 1 \right) \quad (\text{A.4})$$

which can be diagonalized using a Bogoliubov transformation:

$$f_m^\dagger = \sum_{j=1}^L u_{jm} c_j^\dagger + v_{jm} c_j, \quad f_m = (f_m^\dagger)^\dagger. \quad (\text{A.5})$$

The Hamiltonian is then rewritten as

$$H_{A \cup B} = E_0 + \sum_m \epsilon_m f_m^\dagger f_m, \quad (\text{A.6})$$

where we can choose all the one-particle eigenenergies to be positive, $\epsilon_m > 0 \forall m$. E_0 is therefore the ground state energy. Denoting by $|0\rangle$ the fermion vacuum ($c_j|0\rangle = 0$), the ground state of the total chain can then be expressed as

$$|A \cup B\rangle = f_1 f_2 \dots f_L |0\rangle. \quad (\text{A.7})$$

One can also do the same for $H_{A \otimes B}$. Denoting by $\{d_m, d_m^\dagger\}$ the set of fermions which diagonalize the Hamiltonian,

$$d_m^\dagger = x_{jm} c_j^\dagger + y_{jm} c_j, \quad (\text{A.8})$$

the ground state is

$$|A \otimes B\rangle = d_1 d_2 \dots d_L |0\rangle. \quad (\text{A.9})$$

A.2. The Loschmidt echo and bipartite fidelity

Recall that the Loschmidt echo is given by

$$\mathcal{L}(t) = |\langle A \otimes B | \exp(itH_{A \cup B}) | A \otimes B \rangle|^2. \quad (\text{A.10})$$

To compute it, it suffices to notice that the state

$$|\Omega\rangle = d_1 \dots d_L |A \cup B\rangle \quad (\text{A.11})$$

is an eigenstate of $H_{A \otimes B}$ with the minimum eigenenergy E_0 . Since the ground state of such a Hamiltonian is unique (the Perron–Frobenius theorem), $|\Omega\rangle$ is actually proportional to $|A \otimes B\rangle$. We therefore have

$$\mathcal{L}(t) = \frac{\left| \langle A \cup B | d_1^\dagger \dots d_L^\dagger e^{itH_{A \cup B}} d_1 \dots d_L | A \cup B \rangle \right|^2}{\left| \langle A \cup B | d_1^\dagger \dots d_L^\dagger d_1 \dots d_L | A \cup B \rangle \right|^2}. \quad (\text{A.12})$$

The denominator is nothing but $|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^4$, the (squared) bipartite fidelity [19], and ensures $\mathcal{L}(t=0) = 1$. The numerator $\mathcal{N}(t)$ can be expressed using the fermion operators

$$\mathcal{N}(t) = |\langle d_1^\dagger \dots d_L^\dagger d_1(t) \dots d_L(t) \rangle|^2 \quad (\text{A.13})$$

where $d_m(t) = e^{itH_{A \cup B}} d_m e^{-itH_{A \cup B}}$ and we have used the fact that $e^{itH_{A \cup B}} |A \cup B\rangle$ contributes just to a phase. This correlator may be reduced to a Pfaffian using Wick's theorem. Using the relation $\text{Pf}^2 = \det$, we have

$$\mathcal{N}(t) = \left| \det \begin{pmatrix} M & N^{(t)} \\ -N^{(t)} & -M \end{pmatrix} \right|, \quad (\text{A.14})$$

where M is antisymmetric, while $N^{(t)}$ is symmetric. The matrix elements are given by

$$M_{j\ell} = \langle d_j^\dagger d_\ell^\dagger \rangle = -\langle d_j d_\ell \rangle = -\langle d_j(t) d_\ell(t) \rangle \quad (\text{A.15})$$

$$N_{j\ell}^{(t)} = \langle d_j^\dagger d_\ell(t) \rangle. \quad (\text{A.16})$$

In the determinant, adding the second column to the first and then the first row to the second we obtain

$$\mathcal{N}(t) = \left| \det \begin{pmatrix} N^{(t)} + M & N^{(t)} \\ 0 & N^{(t)} - M \end{pmatrix} \right| = |\det(N^{(t)} + M)|^2. \quad (\text{A.17})$$

A.3. Bipartite fidelity

The bipartite fidelity [19] is the (squared) overlap $|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2$, and is a direct by-product of the preceding calculation. It can therefore be expressed as an $L \times L$ determinant:

$$|\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 = \left| \det_{j,\ell} \left(\langle d_j^\dagger (d_\ell^\dagger + d_\ell) \rangle \right) \right|. \quad (\text{A.18})$$

This result was actually already used in [19].

Appendix B. Details of the detector geometries

B.1. The 'symmetric detector'

This turns out to be the simplest detector geometry. The conformal transformation which maps the upper half-plane onto a strip with three slits of figure B.1 is

$$w(z) = \frac{L}{4\pi} [\log(1 - z^2) - 2\log(1 - a^2 z^2)]. \quad (\text{B.1})$$

This mapping has singularities at $z = \pm 1, \pm a$ and extrema at $z = 0, \pm \sqrt{2 - 1/a^2}$. The distance τ between the two slits is

$$\tau(a) = \frac{L}{4\pi} \log(4a^2(a^2 - 1)). \quad (\text{B.2})$$

The crucial point is that this bi-square relation can easily be inverted. We then use an infinitesimal transformation $w \mapsto w + \delta\tau$ to the right of path Γ , $w \mapsto w$ to the left.

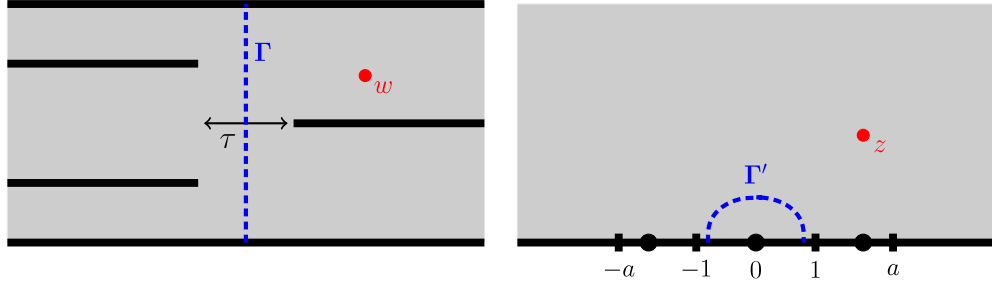


Figure B.1. The ‘detector’ geometry (left) and upper half-plane $\mathbb{H}$ (right). The conformal mapping from the latter to the former is given by equation (B.1).

Defining as before $f(z) = S(w, z)(dw/dz)^{-1}$, the variation of the free energy is

$$\frac{\delta \mathcal{D}}{\delta \tau} = \frac{c}{6\pi} \int_{\Gamma'} f(z) dz \quad (\text{B.3})$$

where Γ' is the image of Γ under the inverse map $w \mapsto z$ (see figure B.1). The curve Γ' can be closed onto a contour using its mirror image along the real axis, and the calculation boils down to a residue:

$$\frac{\delta \mathcal{D}}{\delta \tau} = \frac{c}{6} \text{Res}[f(z); z = 0], \quad (\text{B.4})$$

so

$$\mathcal{D}(a) = \frac{c}{8} \log \left| \frac{(a^2 - 1)(2a^2 - 1)}{a^2} \right|. \quad (\text{B.5})$$

Inverting equation (B.2) with $\tau = it$ we finally get

$$\mathcal{D}(t) = \frac{c}{4} \left[\frac{1}{2} \log |2 \cos 2\pi t/L| + 2 \log |1 - e^{i\pi t/L} \sqrt{2 \cos 2\pi t/L}| \right], \quad 0 \leq t \leq L/2 \quad (\text{B.6})$$

and $\mathcal{D}(L - t) = \mathcal{D}(t + L) = \mathcal{D}(t)$. In this equation the square root has to be understood as $\sqrt{\alpha} = i\sqrt{-\alpha}$ for real negative α .

B.2. The ‘infinite detector’

Here the required conformal transformation reads

$$w(z) = \frac{\ell}{2\pi} \left[\frac{a-1}{1-z^2} - \log(z-1) - \log(z+1) \right], \quad (\text{B.7})$$

and has singularities at $z = \pm 1$ and extrema at $z = 0, \pm\sqrt{a}$. The distance between the two slits is

$$\tau(a) = \frac{\ell}{2\pi} [a + \log(a-1)]. \quad (\text{B.8})$$

The detector in imaginary time is the solution of the equation

$$\frac{\delta \mathcal{D}}{\delta \tau} = \frac{c}{6} \text{Res}[f(z); z = 0], \quad (\text{B.9})$$

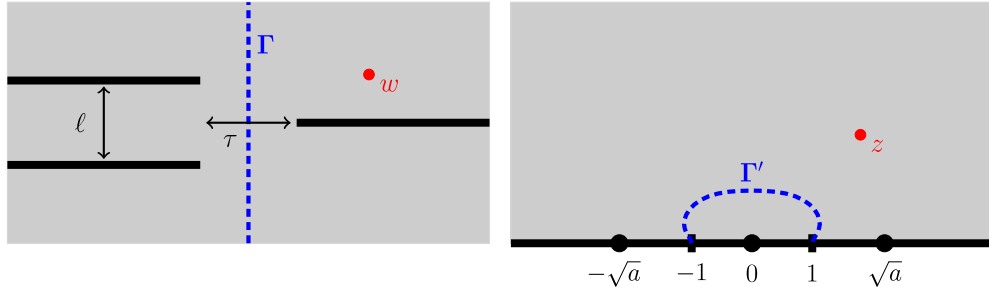


Figure B.2. The ‘infinite detector’ geometry (left) and the upper half-plane $\mathbb{H}$ (right). The conformal mapping from the latter to the former is given by equation (B.7).

which can easily be integrated:

$$\mathcal{D}(a) = \frac{c}{8} \log |a(a-1)|. \quad (\text{B.10})$$

Unlike in the previous case, equation (B.8) cannot be explicitly inverted. The solution can nevertheless be expressed as

$$a(t) = 1 + W(e^{i\pi 2t/\ell-1}) \quad (\text{B.11})$$

where W is the (multivalued) Lambert W function, the solution of the implicit equation $we^w = z$. This is especially useful when trying to evaluate the detector, because W is part of the toolbox of usual symbolic computer programs.

Appendix C. Intriguing trajectories in the complex plane

In all cases that we encountered in this paper, the Loschmidt echo (or the detector) could be expressed as

$$-\log \mathcal{L}(t) = -\log \mathcal{L}[a(t)], \quad (\text{C.1})$$

where except in favourable cases, $a(t)$ is the solution of some implicit equation in the complex plane. The goal of this section is to make this solution more intuitive, by simply showing this parametric function in the complex plane, especially at times corresponding to a plateau.

We focus on three geometries: the asymmetric Loschmidt echo for $x = \ell/L = 1/3$, the ‘symmetric detector’, and finally the ‘infinite detector’. The results are summarized in figure C.1, where $a(t)$ is shown for these three geometries. For the Loschmidt echo we also show the curve solution of $\mathcal{L}(a) = \mathcal{L}[a(t=L)]$, namely the set of a which would give the same values as the observed one in the middle of the plateau at $t = L$. This is the red curve in the left panel of figure C.1. Since the plateau region is close to perfect, one expects the solution $a(t)$ to be very close to this curve at times $2L_A \leq t \leq 2L_B$, and this is indeed what happens. We also performed the same analysis for the detector, now showing the curve solution of $\mathcal{D}(a) = \mathcal{D}[a(t=0)]$, since the plateau begins at time $t = 0$.

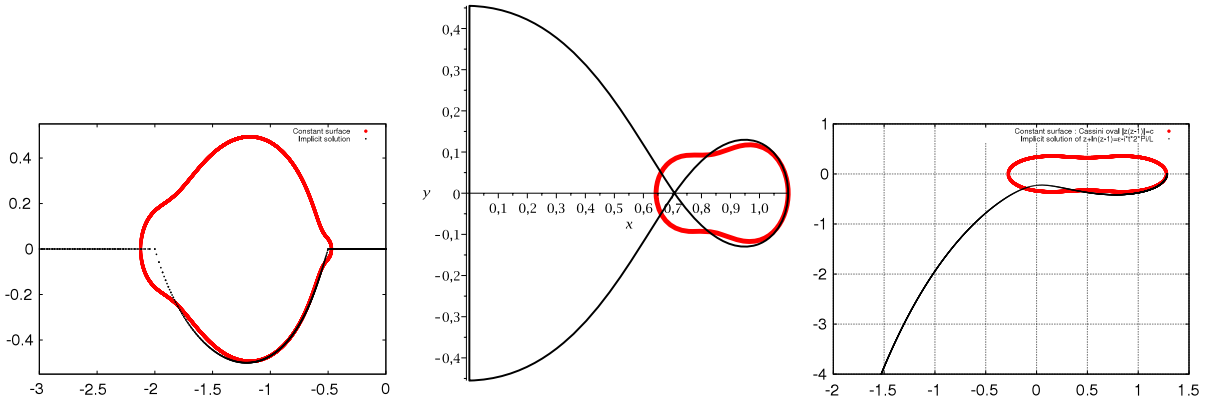


Figure C.1. Left panel: the Loschmidt echo for $x = \ell/L = 1/3$. Middle panel: the ‘symmetric detector’. Right panel: the ‘infinite detector’. The black curve is $a(t)$. The fat red curve is the iso-Loschmidt echo $\mathcal{L}(a) = \mathcal{L}[a(t = L)]$ for the left panel, and the iso-detector $\mathcal{D}(a) = \mathcal{D}[a(t = 0)]$ for the other two panels. The plateau correspond to times when the black curve $a(t)$ almost follows the red one.

in this case. We also observe the same phenomenon. As an aside, we note that the red ‘iso-detector’ curve is a well-known Cassini oval.

References

- [1] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement entropy and conformal field theory*, 2004 *J. Stat. Mech.* [P06002](#)
- [2] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement and correlation functions following a local quench: a conformal field theory approach*, 2007 *J. Stat. Mech.* [P10004](#)
- [3] Eisler V and Peschel I, *Evolution of entanglement after a local quench*, 2007 *J. Stat. Mech.* [P06005](#)
- [4] Amico L, Fazio R, Osterloh A and Vedral V, *Entanglement in many-body systems*, 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 517
- [5] White S, *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*, 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10345
- [6] Schollwöck U, *The density-matrix renormalization group*, 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 259
- [7] Verstraete F and Cirac I, *Renormalization algorithms for quantum many body systems in two and higher dimensions*, 2004 *Phys. Rev. A* **70** 060302(R)
- [8] Vidal G, *Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated*, 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 110501
- [9] Kitaev A and Preskill J, *Topological entanglement entropy*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 110404
- [10] Levin M and Wen X-G, *Detecting topological order in a ground state wavefunction*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 110405
- [11] Li H and Haldane F D M, *Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: identification of topological order in non-abelian fractional quantum hall effect states*, 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 010504
- [12] Eisler J, Cramer M and Plenio M B, *Area laws for the entanglement entropy—a review*, 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 277
- [13] Calabrese P, Cardy J and Doyon B (ed), *Entanglement entropy in extended systems*, 2009 *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 500301
- [14] Klich I and Levitov L, *Quantum noise as an entanglement meter*, 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 100502
- [15] Song H F, Rachel S and Le Hur K, *General relation between entanglement and fluctuations in one dimension*, 2010 *Phys. Rev. B* **82** 012405
- [16] Song H F, Flindt C, Rachel S, Klich I and Le Hur K, *Entanglement from charge statistics: exact relations for many-body systems*, 2010 *Phys. Rev. B* **83** 161408(R)
- [17] Hsu B, Grosfeld E and Fradkin E, *Quantum noise and entanglement generated by a local quench*, 2009 *Phys. Rev. B* **80** 235412
- [18] Cardy J, *Measuring entanglement using quantum quenches*, 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 150404

- [19] Dubail J and Stéphan J-M, *Universal behavior of a bipartite fidelity at quantum criticality*, 2011 *J. Stat. Mech.* [L03002](#)
- [20] Polkovnikov A, *Universal adiabatic dynamics in the vicinity of a quantum critical point*, 2005 *Phys. Rev. B* [72 161201\(R\)](#)
- [21] Calabrese P and Cardy J, *Time dependence of correlation functions following a quantum quench*, 2006 *Phys. Rev. Lett.* [96 136801](#)
- [22] Gritsev V, Demler E, Lukin M and Polkovnikov A, *Spectroscopy of collective excitations in interacting low-dimensional many-body systems using quench dynamics*, 2007 *Phys. Rev. Lett.* [99 200404](#)
- [23] De Grandi C, Gritsev V and Polkovnikov A, *Quench dynamics near a quantum critical point*, 2010 *Phys. Rev. B* [81 012303](#)
- [24] De Grandi C, Gritsev V and Polkovnikov A, *Quench dynamics near a quantum critical point: application to the sine-Gordon model*, 2010 *Phys. Rev. B* [81 224301](#)
- [25] Polkovnikov A, Sengupta K, Silva A and Vengalatorre M, *Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems*, 2010 *arXiv:1007.5331*
- [26] Calabrese P and Cardy J, *Quantum quenches in extended systems*, 2007 *J. Stat. Mech.* [P06008](#)
- [27] Sotiriadis S and Cardy J, *Inhomogeneous quantum quenches*, 2008 *J. Stat. Mech.* [P11003](#)
- [28] Rossini D, Silva A, Mussardo G and Santoro G, *Effective thermal dynamics following a quantum quench in a spin chain*, 2009 *Phys. Rev. Lett.* [102 127204](#)
- [29] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T and Bloch I, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, 2002 *Nature* [415 39](#)
- [30] Bloch I, Dalibard J and Zwerger W, *Many-body physics with ultracold gases*, 2008 *Rev. Mod. Phys.* [80 885](#)
- [31] Srednicki M, *Chaos and quantum thermalization*, 1994 *Phys. Rev. E* [50 888](#)
- [32] Rigol M, Dunjko V and Olshanii M, *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*, 2008 *Nature* [452 854](#)
- [33] Kollath C, Läuchli A M and Altman E, *Quench dynamics and nonequilibrium phase diagram of the Bose-Hubbard model*, 2007 *Phys. Rev. Lett.* [98 180601](#)
- [34] Campos Venuti L and Zanardi P, *Unitary equilibrations: probability distribution of the Loschmidt echo*, 2010 *Phys. Rev. A* [81 022113](#)
- [35] Calabrese P, Essler F H L and Fagotti M, *Quantum quench in the transverse-field Ising chain*, 2011 *Phys. Rev. Lett.* [106 227203](#)
- [36] Holzhey C, Larsen F and Wilczek F, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, 1994 *Nucl. Phys. B* [424 443](#)
- [37] Vidal G, Latorre J, Rico E and Kitaev A, *Entanglement in quantum critical phenomena*, 2003 *Phys. Rev. Lett.* [90 227902](#)
- [38] Korepin V, *Universality of entropy scaling in one-dimensional gapless models*, 2004 *Phys. Rev. Lett.* [92 096402](#)
- [39] Iglói F, Szatmári Z and Lin Y-C, *Entanglement entropy with localized and extended interface defects*, 2009 *Phys. Rev. B* [80 024405](#)
- [40] Divakaran U, Iglói F and Rieger H, *Non-equilibrium quantum dynamics after local quenches*, 2011 *arXiv:1105.5317v1*
- [41] Eisler V, Karevski D, Platini T and Peschel I, *Entanglement evolution after connecting finite to infinite quantum chains*, 2008 *J. Stat. Mech.* [P01023](#)
- [42] di Francesco P, Mathieu P and Senechal D, 1997 *Conformal Field Theory* (Berlin: Springer)
- [43] Mussardo G, 2010 *Statistical Field Theory* (Oxford: Oxford University Press)
- [44] Blöte H W J, Cardy J and Nightingale M P, *Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality*, 1986 *Phys. Rev. Lett.* [56 742](#)
- [45] Affleck I, *Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly*, 1986 *Phys. Rev. Lett.* [56 746](#)
- [46] Calabrese P, Campostrini M, Essler F and Nienhuis B, *Parity effects in the scaling of block entanglement in gapless spin chains*, 2010 *Phys. Rev. Lett.* [104 095701](#)
- [47] Cardy J and Calabrese P, *Unusual corrections to scaling in entanglement entropy*, 2010 *J. Stat. Mech.* [P04023](#)
- [48] Fagotti M and Calabrese P, *Universal parity effects in the entanglement entropy of XX chains with open boundary conditions*, 2011 *J. Stat. Mech.* [P01017](#)
- [49] Cardy J, *Effect of boundary conditions on the operator content of two-dimensional conformally invariant theories*, 1986 *Nucl. Phys. B* [275 200](#)
- [50] Cardy J and Peschel I, *Finite-size dependence of the free energy in two-dimensional critical systems*, 1988 *Nucl. Phys. B* [300 377](#)

- [51] Zagoskin A M and Affleck I, *Fermi edge singularities: bound states and finite-size effects*, 1997 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 5743
- [52] Woynarovich F, Eckle H-P and Truong T, *Non-analytic finite-size corrections in the one-dimensional Bose gas and Heisenberg chain*, 1989 *J. Phys. A: Math. Gen.* **22** 4027
- [53] Eckle H-P and Hamer C, *Non-analytic finite-size corrections for the Heisenberg chain in a magnetic field with free and twisted boundary conditions*, 1991 *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** 191
- [54] Lieb E and Robinson D, *The finite group velocity of quantum spin systems*, 1972 *Commun. Math. Phys.* **28** 251
- [55] Häppölä J, Halász G B and Hamma A, *Revivals of a closed quantum system and Lieb–Robinson speed*, 2010 arXiv:[1011.0380](#)
- [56] Mathey I and Polkovnikov A, *Light-cone dynamics and reverse Kibble–Zurek mechanism in two-dimensional superfluids following a quantum quench*, 2010 *Phys. Rev. A* **81** 033605
- [57] Fagotti M and Calabrese P, *Evolution of entanglement entropy following a quantum quench: analytic results for the XY chain in a transverse magnetic field*, 2008 *Phys. Rev. A* **78** 010306
- [58] Faribault A, Calabrese P and Caux J-S, *Quantum quenches from integrability: the fermionic pairing model*, 2009 *J. Stat. Mech.* [P03018](#)
- [59] Faribault A, Calabrese P and Caux J-S, *Bethe Ansatz approach to quench dynamics in the Richardson model*, 2009 *J. Math. Phys.* **50** 095212
- [60] Mossel J, Palacios G and Caux J-S, *Geometric quenches in quantum integrable systems*, 2010 *J. Stat. Mech.* [L09001](#)
- [61] Peschel I, *On the reduced density matrix for a chain of free electrons*, 2004 *J. Stat. Mech.* [P06004](#)

Rényi entanglement entropies in quantum dimer models : from criticality to topological order

Jean-Marie Stéphan, Grégoire Misguich and Vincent Pasquier

Institut de Physique Théorique, CEA, IPhT, CNRS, URA 2306, F-91191
Gif-sur-Yvette, France.

E-mail: jean-marie.stephan@cea.fr, gregoire.misguich@cea.fr,
vincent.pasquier@cea.fr

Abstract. Thanks to Pfaffian techniques, we study the Rényi entanglement entropies and the entanglement spectrum of large subsystems for two-dimensional Rokhsar-Kivelson wave functions constructed from a dimer model on the triangular lattice. By including a fugacity t on some suitable bonds, one interpolates between the triangular lattice ($t = 1$) and the square lattice ($t = 0$). The wave function is known to be a massive $\mathbb{Z}_2$ topological liquid for $t > 0$ whereas it is a gapless critical state at $t = 0$. We mainly consider two geometries for the subsystem: that of a semi-infinite cylinder, and the disk-like setup proposed by Kitaev and Preskill [Phys. Rev. Lett. 96, 110404 (2006)]. In the cylinder case, the entropies contain an extensive term – proportional to the length of the boundary – and a universal sub-leading constant $s_n(t)$. Fitting these cylinder data (up to a perimeter of $L = 32$ sites) provides s_n with a very high numerical accuracy (10^{-9} at $t = 1$ and 10^{-6} at $t = 0.5$). In the topological $\mathbb{Z}_2$ liquid phase we find $s_n(t > 0) = -\ln 2$, independent of the fugacity t and the Rényi parameter n . At $t = 0$ we recover a previously known result, $s_n(t = 0) = -\frac{1}{2} \ln(n)/(n - 1)$ for $n < 1$ and $s_n(t = 0) = -\ln(2)/(n - 1)$ for $n > 1$. In the disk-like geometry – designed to get rid of the boundary contributions – we find an entropy $s_n^{\text{KP}}(t > 0) = -\ln 2$ in the whole massive phase whatever $n > 0$, in agreement with the result of Flammia *et al.* [Phys. Rev. Lett. 103, 261601 (2009)]. Some results for the gapless limit $R_n^{\text{KP}}(t \rightarrow 0)$ are discussed.

Contents

1	Introduction	2
2	Entanglement entropy as a Shannon entropy	4
2.1	Rokhsar-Kivelson wave functions	4
2.2	Rényi entanglement entropy	5
2.3	Schmidt decomposition	5
3	Classical probabilities	7
3.1	Pfaffian	7
3.2	Kasteleyn theory	7
3.3	Classical probabilities	8
3.4	Perturbation theory for determinants in an infinite system	8
4	Results for the infinite cylinder	10
4.1	Topological entanglement entropy and Rényi index	10
4.2	Thermodynamical entropy	12
4.3	Scaling when $t \rightarrow 0$ and $L \rightarrow \infty$ with fixed $L \cdot t$	12
4.4	Entropy of a zig-zag line	13
4.5	Infinite Rényi and bipartite fidelity	16
4.6	Entanglement gap and entanglement spectrum	17
5	Long strip geometry	20
6	Kitaev-Preskill construction	21
7	Summary and conclusions	24
Appendix A Green function elements for an infinite cylinder		26
Appendix A.1	Diagonalization of the Kasteleyn matrix	26
Appendix A.2	Green function elements	27
Appendix B Closed-form formula for $S_{n=\infty}$ in the cylinder geometry		28
Appendix B.1	Dimer coverings on a finite cylinder	28
Appendix B.2	Exact formula for S_∞	30
Appendix B.3	Asymptotic expansion	30

1. Introduction

It is now widely recognized that the entanglement entropy is a useful quantity to probe many-body quantum states. It can be used to detect critical states in one-dimensional chains, through the celebrated logarithmic divergence [8, 9, 10, 11]. In two dimensions it can be used to characterize (massive) topologically ordered states. In particular, it

allows to distinguish a topological wave function from a more conventional disordered and featureless state. In a gapped phase the entanglement entropy of a large subsystem contains a contribution proportional to the length (in two dimensions) of its boundary plus a subleading term S_{topo} which contains some information about the nature of the phase. In a state with topological order, this subleading term is related to the total quantum dimension, that is to the content in elementary excitation [29, 30]. This idea has been successfully applied to some fractional quantum hall states [14, 15, 16]. Extracting the subleading term in lattice models is not a trivial task [29, 30] but it was first shown to be feasible using quantum dimer wave functions on the triangular lattice [24]. Since the work of Moessner and Sondhi [36] this type of states have been intensively studied since they offer some rather simple realization of topologically ordered states with non trivial finite-size effects and finite correlation length (contrary to toric-code like models [45, 38]).

In this paper we also consider some dimer wave functions – named after Rokhsar and Kivelson (RK) [37] – which are linear superposition of fully packed dimer coverings on the triangular lattice. By including a fugacity on some suitable bonds, one continuously interpolates between the triangular lattice ($t = 1$) and the square lattice ($t = 0$). In the triangular case the wave function is known to be a massive $\mathbb{Z}_2$ topological liquid [36, 7, 54] whereas it is a gapless critical state at $t = 0$ [37]. Exploiting previous results [24, 17] on the reduced density matrix (RDM) of RK states, we can obtain not only the entanglement entropy but also the full entanglement spectrum on large systems. Using extensively the Pfaffian formulation of the classical dimer partition function [1], as well as some perturbation theory for determinant [5, 7] we perform calculations *in the thermodynamic limit* while keeping the boundary length finite.

In the cylinder geometry we can treat the infinite height limit and perimeters up to $L = 32$ (38 at $t = 0$). In the disk-like geometry proposed by Kitaev and Preskill [29], we perform exact calculation for disks of radii up to $\rho \simeq 4.5$ lattice spacings embedded in a *infinite* system, therefore extending significantly the previous entanglement calculations on triangular dimer wave functions [24]. This technique allows to confirm the value $S_{\text{topo}} = -\ln(2)$ with high precision in the whole massive phase (not only at the triangular point $t = 1$). This value turns out not to depend on the Rényi parameter, in agreement with the argument by Flammia *et al.* [13]. We also discuss the structure of the *entanglement spectrum*, showing that it contains a non-degenerate “ground-state” and a gap. In Sec. 4.6, a micro-canonical point of view is used to relate the density of states of the entanglement spectrum and the Rényi entanglement entropies.

When $t = 0$ the dimers are restricted to the bonds of a square lattice. Although non-generic,[‡] such critical RK wave-functions associated to some conformally invariant critical points are useful since they offer one of the very few situations where one can study the entanglement in a critical wave-functions in more than one dimension [19, 20, 17, 25, 22]. Another point of view is that, for long cylinder geometries, the

[‡] They correspond to fine tuned multi-critical points [47].

entanglement in these two-dimensional systems is related to the Shannon entropies in – now generic – quantum critical chains [17, 41, 48, 49]. The sub-leading constant in the cylinder geometry depends on the compactification radius [20, 17, 25, 22] and shows a singularity at some critical value of the Rényi parameter [49]. The result in a Kitaev-Preskill geometry is less clear and we discuss our numerical results at the end of Sec. 6.

2. Entanglement entropy as a Shannon entropy

After a brief introduction to dimer RK wave-functions [37], we review how one can construct the RDM and Schmidt decomposition for these states.

2.1. Rokhsar-Kivelson wave functions

We start from a classical two-dimensional hard-core dimer model on a triangular lattice, with fugacity t on “diagonal” links (Fig. 1). This fugacity allows to interpolate between the square lattice ($t = 0$) and the isotropic triangular lattice ($t = 1$).

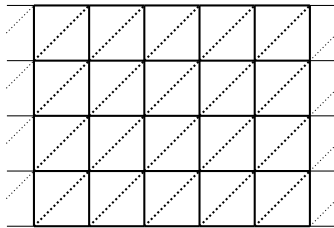


Figure 1. Triangular lattice with cylindrical boundary conditions ($L_x = 6$, $L_y = 5$). Each “diagonal link” (dotted lines) has fugacity t , the others have fugacity 1.

The classical partition function of this system reads

$$\mathcal{Z} = \sum_c e^{-E(c)} = \sum_c t^{\# \text{ diagonal dimers}}, \quad (1)$$

where the sum runs over all dimer coverings c . When $t = 0$ (square lattice), the model is known to be critical [52], its long range behavior is described by a compact free field [51, 32]. Otherwise it has a finite correlation length [36, 7, 54]. An Hilbert space is then constructed by associating a basis state $|c\rangle$ to each classical dimer configuration c . Different classical configurations correspond to orthogonal states. The RK wave function is the normalized linear combination of all basis states with an amplitude equal to the square root of the classical weight :

$$|RK\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}}} \sum_c e^{-E(c)/2} |c\rangle. \quad (2)$$

Following Henley [53] one can construct some local Hamiltonians for which Eq. 2 is an exact ground state, but the precise form of these Hamiltonians will not be used in the following.

2.2. Rényi entanglement entropy

We divide the system into two parts A and B . Each subsystem is a set of bonds, and its degrees of freedom are the corresponding dimer occupancies. The RDM of A is obtained by tracing over the degrees of freedom in B :

$$\rho_A = \text{Tr}_B |RK\rangle\langle RK| \quad (3)$$

Then, the Rényi entanglement entropy is defined as

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln \text{Tr} \rho_A^n, \quad (4)$$

where n is not necessarily an integer. Two limits are of interest. For $n \rightarrow 1$, S_n reduces to the Von Neumann entanglement entropy :

$$S_1 = S^{\text{vN}} = -\text{Tr} \rho_A \ln \rho_A \quad (5)$$

For $n \rightarrow \infty$, only the largest eigenvalue $p_{\max}$ of the RDM matters :

$$S_\infty = -\ln p_{\max}. \quad (6)$$

This quantity is also called single copy entanglement. To compute all the Rényi entropies, we need all the eigenvalues of the RDM. In the following, we shall see that calculating each eigenvalue amounts to solving a combinatorial problem. The procedure has been discussed in details elsewhere [24, 17] and is recalled below for completeness.

2.3. Schmidt decomposition

We consider the geometry of an infinite cylinder cut into two parts, as in the left of Fig. 2. The reasoning is the same for the other geometries we considered. The sites which touch a bond in A and a bond in B (red circles in Fig. 2) are called boundary sites. We assign a spin σ_j to each boundary site : $\sigma_j = \uparrow$ if the site is occupied by a dimer in A , $\sigma_j = \downarrow$ if it is occupied by a dimer in B . We denote by

$$|i\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{L_x}\rangle \quad (7)$$

the whole spin configuration at the boundary.

Now, let $\mathcal{E}_i^A$ (resp. $\mathcal{E}_i^B$) be the set of dimer configurations in A (resp. B) compatible with $|i\rangle$ at the boundary. Thanks to the hardcore constraint, they share no common element :

$$\mathcal{E}_i^A \cap \mathcal{E}_{i'}^B = \emptyset, \quad i \neq i' \quad (8)$$

Each configuration c can be written as

$$c = a \cup b, \quad a \in \mathcal{E}_i^A, \quad b \in \mathcal{E}_i^B \quad (9)$$

and the energy decomposed as

$$E(c) = E_A(a) + E_B(b) \quad (10)$$

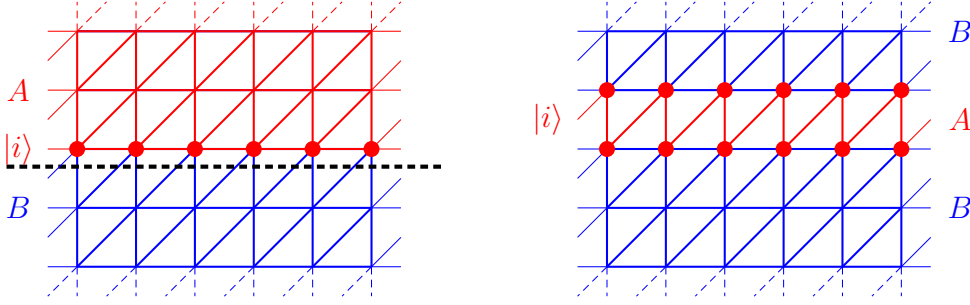


Figure 2. (Color online) Partition of the lattice in two subsystems A (red bonds) and B (blue bonds). Left: the subsystems A and B are semi-infinite cylinders. Boundary sites are marked by filled red circles. Each boundary site can either be occupied by a dimer in A (spin $\uparrow$), or a dimer in B (spin $\downarrow$).

This allows to write the RK state as :

$$|RK\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}}} \sum_i \left[\sum_{a \in \mathcal{E}_i^A} e^{-E_A(a)/2} |a\rangle \right] \times \left[\sum_{b \in \mathcal{E}_i^B} e^{-E_B(b)/2} |b\rangle \right] \quad (11)$$

Defining a new normalized set of RK states in A and B

$$|RK_i^A\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^A}} \sum_{a \in \mathcal{E}_i^A} e^{-\frac{1}{2}E_A(a)} |a\rangle, \quad (12)$$

$$|RK_i^B\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{Z}_i^B}} \sum_{b \in \mathcal{E}_i^B} e^{-\frac{1}{2}E_B(b)} |b\rangle, \quad (13)$$

$$\text{with } \mathcal{Z}_i^\Omega = \sum_{\omega \in \mathcal{E}_i^\Omega} e^{-E_\Omega(\omega)} \quad (\Omega = A, B), \quad (14)$$

Eq. (2) becomes

$$|RK\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |RK_i^A\rangle |RK_i^B\rangle, \quad (15)$$

with

$$p_i = \frac{\mathcal{Z}_i^A \mathcal{Z}_i^B}{\mathcal{Z}}. \quad (16)$$

Eq. 15 is actually the Schmidt decomposition of the RK state (the orthogonality of the Schmidt vectors is guarantied by Eq. 8), and the $\{p_i\}$ are the eigenvalues of the RDM:

$$\rho_A = \sum_i p_i |RK_i^A\rangle \langle RK_i^A|, \quad (17)$$

This way, one can obtain the Rényi entropy :

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln \left(\sum_i p_i^n \right). \quad (18)$$

The entanglement entropy calculation has been reduced to finding some probabilities in the classical dimer problem. In the next section we will show that, using standard Pfaffian techniques, one can obtain exact formulae for the p_i .

3. Classical probabilities

3.1. Pfaffian

The Pfaffian of a $(2n \times 2n)$ antisymmetric matrix M is defined as

$$\text{Pf } M = \sum_{\pi \in S_{2n}}' \epsilon(\pi) M_{\pi_1 \pi_2} M_{\pi_3 \pi_4} \dots M_{\pi_{2n-1} \pi_{2n}}, \quad (19)$$

where $\epsilon(\pi)$ denotes the signature of a permutation π . The sum runs over all permutations of $\{1, 2, \dots, 2n\}$ satisfying the constraints

$$\begin{aligned} \pi_{2i-1} < \pi_{2i} & \quad , \quad 1 < i < n \\ \pi_{2i-1} < \pi_{2i+1} & \quad , \quad 1 < i < n-1 \end{aligned} \quad (20)$$

A very important relation is

$$(\text{Pf } M)^2 = \det M, \quad (21)$$

It is especially useful because it allows to compute the Pfaffian numerically in a time proportional to n^3 using standard determinant routines (and sometimes analytically).

3.2. Kasteleyn theory

The problem of enumerating dimer configurations on a planar lattice is a classic combinatorial problem, which was solved independently by Kasteleyn [1] and Temperley and Fisher [4]. We consider the case $t = 1$ for simplicity but the generalization to any t is straightforward. For any planar graph, the partition function (number of dimer coverings) is given by

$$\mathcal{Z} = |\text{Pf } \mathcal{K}|, \quad (22)$$

where $\mathcal{K}$ is an antisymmetric matrix constructed as follows. Putting arrows on all the links, a matrix element of $\mathcal{K}$ is

$$\mathcal{K}_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{if the arrow points from } i \text{ to } j \\ -1 & \text{if the arrow points from } j \text{ to } i \\ 0 & \text{if } i \text{ and } j \text{ are not nearest neighbors} \end{cases} \quad (23)$$

The Kasteleyn matrix must also satisfy the *clockwise-odd rule*: the product of the arrows orientations (± 1) around any elementary plaquette (running clockwise) has to be -1 . Kasteleyn showed that i) such a matrix $\mathcal{K}$ exists for any planar graph and ii) it insures that all terms in the sum have the same sign (the signature of the permutation always compensate that of the product of matrix elements). It is immediate to check that ii) implies Eq 22.

A Kasteleyn matrix obeying Eq. 22 can also be found for cylindrical boundary conditions. An example for the triangular lattice with cylindrical boundary conditions is shown in Fig. 3.8

§ In the case of toroidal boundary condition the situation is slightly more complicated, and the number of dimer covering is given by a linear combination of four Pfaffians, see Ref. [3] for more details.

In the following we will demonstrate how each probability p_i can be computed as a determinant, taking the example of the cylinder geometry.

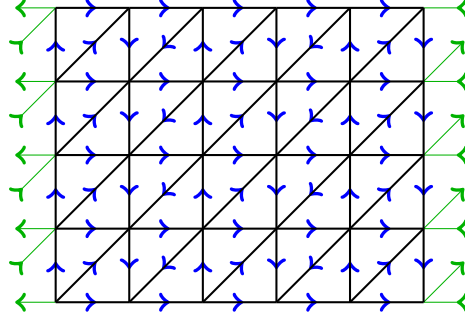


Figure 3. Kasteleyn orientation of the $(L_x = 6, L_y = 5)$ lattice (a weight t is given to “diagonal” links). Blue arrows: orientation of the bonds. Green : bonds present because of periodic boundary conditions along the x -axis (see Ref. [3]). Their orientations are reversed compared to their “bulk” counterparts.

3.3. Classical probabilities

To find the probabilities of Eq. 16, we need to compute $\mathcal{Z}_i^A \mathcal{Z}_i^B$, which is the partition function restricted to dimer configurations compatible with the boundary spin configuration $|i\rangle = |\sigma_1, \dots, \sigma_{L_x}\rangle$. It can be evaluated as the Pfaffian of a modified Kasteleyn matrix

$$\mathcal{Z}_i^A \mathcal{Z}_i^B = \text{Pf } \mathcal{K}^{(i)} \quad (24)$$

where $\mathcal{K}^{(i)}$ is deduced from $\mathcal{K}$ by removing the appropriate links in a simple way. If $\sigma_j = \uparrow$, a dimer emanating from the boundary site j has to be in A , and we remove links in B emanating from site j . If $\sigma_j = \downarrow$ we remove links in A emanating from site j . See Fig. 4 for two examples, one with the boundary configuration $|i\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ and one with $|i\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$. The computation of any such probability apparently requires the ratio of two $L_x L_y \times L_x L_y$ determinants. However, using a known trick [5], the computation can be greatly simplified.

3.4. Perturbation theory for determinants in an infinite system

Following Ref. [5], p_i^2 may be written as

$$p_i^2 = \det(1 + \mathcal{K}^{-1} \mathcal{E}^{(i)}) \quad , \quad \mathcal{E}^{(i)} = \mathcal{K}^{(i)} - \mathcal{K} \quad (25)$$

The important point is that the matrix element $\mathcal{E}_{\mathbf{r}\mathbf{r}}^{(i)}$ is non zero only if the link $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{r}'$ has been removed. Then, a matrix element of $\mathcal{K}^{-1} \mathcal{E}^{(i)}$ is

$$(\mathcal{K}^{-1} \mathcal{E}^{(i)})_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \sum_{\mathbf{s}} \mathcal{K}_{\mathbf{r}\mathbf{s}}^{-1} \mathcal{E}_{\mathbf{s}\mathbf{r}'}^{(i)}. \quad (26)$$

It is non-zero only if $\mathbf{r}'$ is a site belonging to a removed link. We name these sites “vicinity sites”, and they of course depend on the boundary configuration $|i\rangle$. A boundary site is

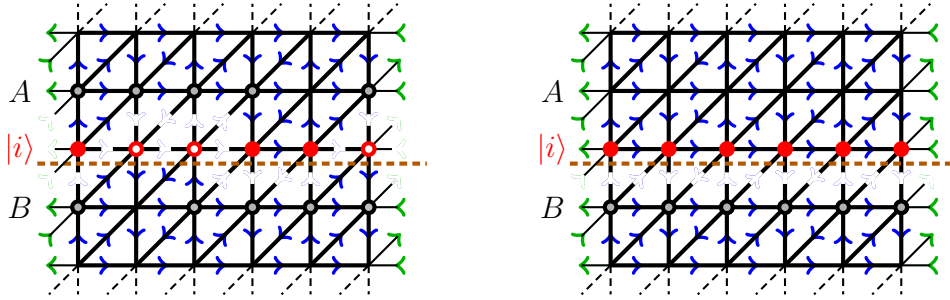


Figure 4. Two examples with $|i\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ on the left, and $|i\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ on the right. Filled red circle: boundary site occupied by a dimer in A (spin $\uparrow$). Empty red circle: boundary site occupied by a dimer in B (spin $\downarrow$). To ensure that a boundary site be occupied by a dimer in A (resp. B), all edges in B (resp. A) coming from this site have to be removed. Notice that after the removal, A and B are disconnected. black circles filled in grey are sites which are connected to a boundary site through a link that has been removed. As explained in the text, the size of the determinant is given by the number of circles. p_i is therefore a 16×16 determinant for the configuration on the left and a 12×12 determinant for the configuration on the right.

automatically a vicinity site, but the converse is not true however. If we denote by E_i the set of vicinity sites and by n_i their number, $\mathcal{K}^{-1}\mathcal{E}^{(i)}$ is a $L_x L_y \times L_x L_y$ matrix, but only n_i columns are non identically zero. Then, using the antisymmetry of the determinant, any cell with indices $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$ not both in E_i can be set to zero by appropriate linear combinations of rows and columns. Therefore, the determinant may be computed as its restriction to the sites in E_i .

$$p_i^2 = \det \left((1 + \mathcal{K}^{-1}\mathcal{E}^{(i)})|_{E_i} \right) \quad (27)$$

This so called “perturbation theory for determinants” has been previously used in Ref. [5] to compute exactly the monomer-monomer correlation on the square lattice in the thermodynamic limit ($L, L_y \rightarrow \infty$), and further extended in Ref. [7] to the triangular lattice. For computational purpose this is a huge simplification, because the size of the determinant has been reduced from $L_x L_y$ to $n_i \sim \mathcal{O}(L_x)$, and the total system we are interested in can be infinite ($L_y \rightarrow \infty$). Contrary also to the transfer matrix approach [17], this method allows us to treat any shape of boundary. This will be particularly useful while studying the geometry proposed by Kitaev and Preskill [29].

For this to work we also need to compute exactly certain matrix elements of the inverse Kasteleyn matrix $\mathcal{K}^{-1}$. This can be done using standard Fourier and integral techniques, see [Appendix A](#).

Let us now specify the case of the (infinitely long) cylinder geometry cut into two parts. An example of spin configuration is shown in Fig. 4, where boundary sites are represented by red circles (filled or empty depending on the spin). Other vicinity sites are circles filled in grey. It is easy to check that $2L_x \leq n_i \leq 3L_x$ for all boundary configurations. Since there are a priori 2^{L_x} boundary configurations and each probability is of complexity $\sim n_i^3$, the Rényi entropy can be evaluated in a time $\sim L_x^3 \times 2^{L_x}$. This

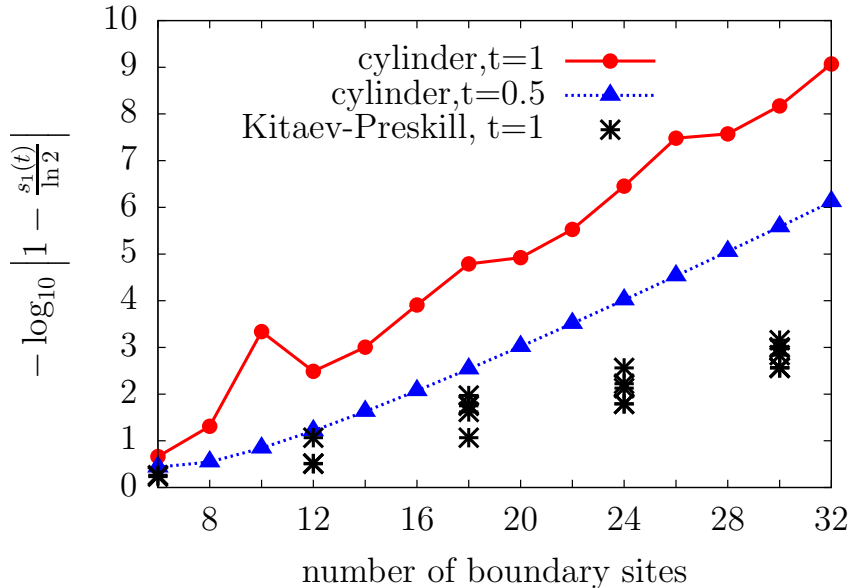


Figure 5. Number of correct digits in the numerical estimate of the topological constant, as a function of the number of boundary sites. For the cylinder geometry we show the data for $t = 1$ (red circles) and $t = 0.5$ (blue triangles). The number of boundary sites is just L in this case, and the estimate is obtained by a fit to $aL + s_1$ for two even consecutive values of L . The convergence to the correct value is exponentially fast, with an effective correlation length close to the dimer-dimer correlation length (which can have an imaginary part[7, 54], hence the oscillations we observe). For comparison we also show the data in the Kitaev-Preskill geometry, slightly anticipating on Sec. 6.

allow us to go to relatively large system sizes of order $L_x \sim 30$.

4. Results for the infinite cylinder

When the height L_y is infinite, the entropies S_n only depend on the perimeter $L_x = L$. As usual, the leading term is non universal and scales with L , and we are interested in the first subleading contribution s_n :

$$S_n(L) \simeq \alpha_n L + s_n + o(1) \quad (28)$$

4.1. Topological entanglement entropy and Rényi index

For gapped topological wave functions, the subleading constant s_1 in the Von Neumann entropy has been shown to be related to the content of the phase in terms of fractionalized particles, and to the total quantum dimension D in particular [29, 30]: $s_1 = -\ln(D)$. In the original works the subleading constant s_1 was extracted by combining the entropies of different subsystems in a planar geometry. We show here that the subleading term can be extracted in a – somewhat simpler – cylinder geometry (see also [16]).

For $t > 0$ the present dimer wave-functions realize the simplest topological phase, the so-called $\mathbb{Z}_2$ liquid with quantum dimension $D = 2$. One therefore expects to have $s_1 = -\ln 2$ in the whole topological phase. So far, this has only been checked numerically at $t = 1$ [24]. In addition, Ref. [13] argues that this topological entanglement entropy is independent of the Rényi index n . We present here some results for infinitely high cylinders for various values of t and n , which support this result. The convergence to the topological entropy is exponentially fast, as can be seen in Fig. 5. For generic values of t and n , this allows us to get this constant with a very high accuracy: for example at $t = 1$ our best estimate is $|s_1(t = 1) - \ln 2| \simeq 10^{-9}$. In general finite-size effects get larger when increasing n at fixed t , and it is more advisable to numerically study low- n Rényi entropies. However, as is shown in Appendix B.2, the calculation for $n \rightarrow \infty$ simplifies greatly, and the result $s_\infty(t > 0) = -\ln 2$ can even be obtained rigorously. We further discuss this result in Sec. 4.5. At fixed n the convergence is also less clear

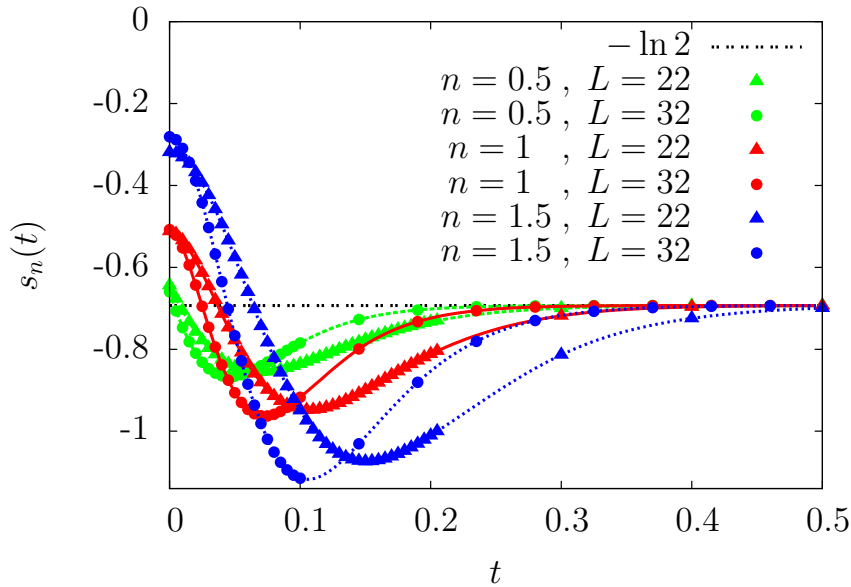


Figure 6. Sub-leading constants $s_n(t)$ for 3 different values of the Rényi parameter ($n = 0.5, 1, 1.5$). For each t and n , $s_n(t)$ is extracted from $S_n(L)$ using two consecutive even values of L (up to $L = 32$). In the thermodynamic limit the results are expected to converge to $s_n(t) = -\ln 2$ for all $n > 0$ and $t > 0$.

when t is small since the correlation length $\xi(t)$ diverges when approaching $t = 0$ and the finite-size effects become very important when $L \gtrsim \xi(t)$. Still, the curve $s_n(t > 0)$ approaches $-\ln 2$ when $L \rightarrow \infty$. The data plotted in Fig. 6 are indeed compatible with $s_n(t) = -\ln 2$ for all $n = 0.5, 1, 2$ and $t > 0$. The scaling close to $t = 0$ will be discussed later in Sec. 4.3.

4.2. Thermodynamical entropy

The behavior for large values of the Rényi index n is displayed in Fig. 8 (triangular dots). Although it is roughly constant and close to $-\ln(2)$, due to the finite-size of the system there are some visible deviations for $n \gtrsim 3$. This is even more visible if we consider a slightly different entropy, S_n^T , defined as:

$$S_n^T = (1 - \partial_n) \ln(Z_n) \quad (29)$$

$$Z_n = \sum_i p_i^n \quad (30)$$

which can also be written as the Shannon entropy associated to the normalized probabilities $\tilde{p}_i$:

$$S_n^T = - \sum_i \tilde{p}_i \ln(\tilde{p}_i) \quad \text{with} \quad \tilde{p}_i = \frac{p_i^n}{Z_n}. \quad (31)$$

Both entropies match at $n = 1$ ($S_{n=1}^T = S_{n=1}$) and are simply related otherwise: $S_n^T = (1 - n\partial_n)((1 - n)S_n)$. The “thermodynamic” entropy S^T has also a leading term $\mathcal{O}(L)$ and a sub-leading term, s_n^T . The extensive (and non-universal) part is plotted in Fig. 7 as a function of the “temperature” $1/n$. To stress the similarity with usual statistical mechanics, we also plotted the associated “specific heat” defined as a derivative of S^T : $C_v = -n \frac{dS^T}{dn}$.

The sub-leading term s_n^T is plotted in Fig. 8 (crosses). It is very close to $-\ln(2)$ at small n , but goes to $s^T = 0$ when $n \rightarrow \infty$. This is indeed expected since the thermodynamic entropy $S_{n=\infty}^T$ – which corresponds to zero “temperature” – is equal to the log of the degeneracy of the configuration with the highest probability, which is non-degenerate in our case. However, the crossover from $-\ln(2)$ to 0 takes place at values of n which are larger and larger when $L \rightarrow \infty$. This can be checked in the inset of Fig. 8, where the numerical data appear to be correctly fitted by

$$s_{n \gg \ln(L)}^T \sim L^2 \exp(-n\Delta) \quad (32)$$

$$s_{n \ll \ln(L)}^T \sim -\ln(2) \quad (33)$$

where $\Delta \simeq 1.32$ is the entanglement gap at $t = 1$. We finally note that the calculation of $p_{\max}$ given in Sec. [Appendix B.2](#) proves rigorously that $\lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} s_n = -\ln(2)$ and $\lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} s_n^T = 0$.

4.3. Scaling when $t \rightarrow 0$ and $L \rightarrow \infty$ with fixed $L \cdot t$

The critical point $t = 0$ has already been studied [[17](#), [49](#)] and is known to give:

$$s_n(0) = \begin{cases} \ln R - \frac{\ln n}{2(n-1)} & , \quad 0 < n \leq 1 \\ \frac{n}{n-1} \ln R & , \quad n > 1 \end{cases} \quad (34)$$

$$s_n^T(0) = \begin{cases} \ln(\sqrt{n}R) - \frac{1}{2} & , \quad 0 < n \leq 1 \\ 0, & n > 1 \end{cases} \quad (35)$$

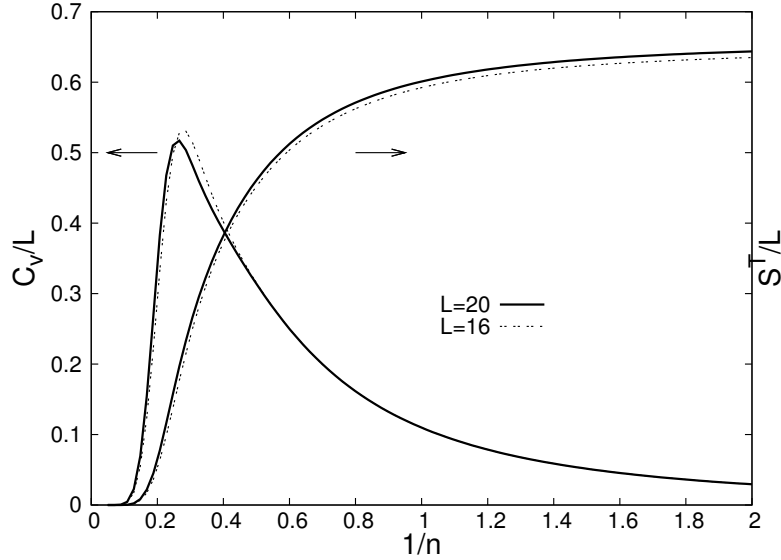


Figure 7. Thermodynamic entropy per site S_n^T/L (monotonously increasing, right axis) and its associated “specific heat” (peaked at $n \simeq 0.25$, left axis) $C_v = -ndS^T/dn$. Fugacity $t = 1$.

where the compactification radius is $R = 1$ (free fermions) for the present dimer wave-functions, but could be tuned by adding some dimer-dimer interactions [32].

The correlation length $\xi(t)$ diverges as $\xi(t) \sim t^{-1}$ when $t \ll 1$ [7]. In Fig. 9 we plot the subleading constant $s_n(t, L)$ as a function of $L \cdot t \simeq L/\xi(t)$. It appears that, for a given value of n , the data curves corresponding to different values of t and L approximately collapse onto each other. This shows that, when the system size L is much bigger than the correlation length $\xi(t) \sim t^{-1}$, we find the correct topological entanglement entropy $s_n = -\ln(2)$. On the other hand, when L is of the same order of magnitude than $\xi(t)$ (and much larger than the lattice spacing) s_n turns out to be some non-trivial function of n and $L \cdot t$. When $L \cdot t \rightarrow 0$ the system effectively behaves as a critical system of dimers on a square lattice and s_n converges to Eq. 34, as expected.

4.4. Entropy of a zig-zag line

As explained in Sec. 2.3, the eigenvalues of the RDM of a half infinite cylinder are the classical probabilities of the “spin” configurations $|i\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\rangle$. But one may also consider a zig-zag line and the probabilities p_α of the dimer configurations on that lines. The “spins” are now replaced by the dimer occupancies (say 0 or 1) of the zig-zag bonds. These probabilities can be computed using exactly the same perturbed-Pfaffian method as before. However, in terms of entanglement, the entropy we compute is that of a the “zig-zag” chain shown in the right of Fig. 10. Although the probabilities are

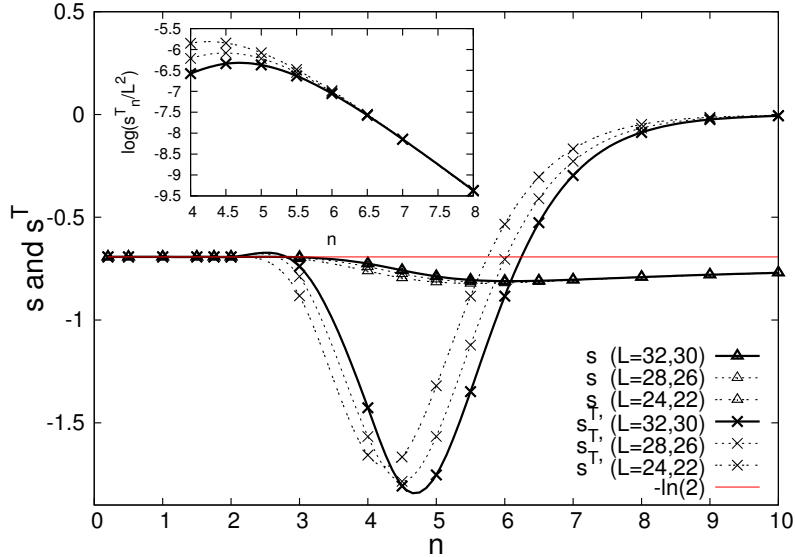


Figure 8. Large n behavior of the subleading constant $s_n(t=1)$ of the Rényi entropy, and $s_n^T(t=1)$, the subleading constant of the thermodynamical entropy. They both give $-\ln(2)$ for small n , but differ for large n . This is a finite-size-effect: as shown in the inset, $s^T \sim L^2 \exp(-\Delta n)$ for large n . We thus have $s \simeq s^T \simeq -\ln(2)$ up to $n \sim \ln(L)$.

computed in a very similar way, this calculation does not describe the entanglement of a two-dimensional subsystem, but that of a one-dimensional line winding around the cylinder.

The associated entropies, already considered in Ref.[24], have a leading term proportional to L and a subleading contribution of order $\mathcal{O}(L^0)$. The results, plotted in Fig. 10, show that the subleading constant s_1 has a dependence on t and system size L which is very similar to that of the half-cylinder entropy. It is possible that, as a function of $L \cdot t$, the zig-zag line and half-infinite cylinder converge to the same curves for sufficiently large L . In any case, the zig-zag results clearly converges to $-\ln(2)$ in the thermodynamic limit for $t > 0$.

One may ask if the zig-zag entropy would also give access to the quantum dimension for a *general* topologically ordered wave-function (not of RK type, and even not based on dimers). We believe that it is *not* the case. The present dimer RK states enjoy a special property: once the dimer occupancies are fixed along the zig-zag chain, the upper and lower half-cylinders are completely decoupled. For this reason, the entropy of the zig-zag chain is very close to that of a half cylinder. This would not hold for more generic states and a *thick* strip (sufficiently large compared to the correlation length) would be probably required to access the quantum dimension in general.

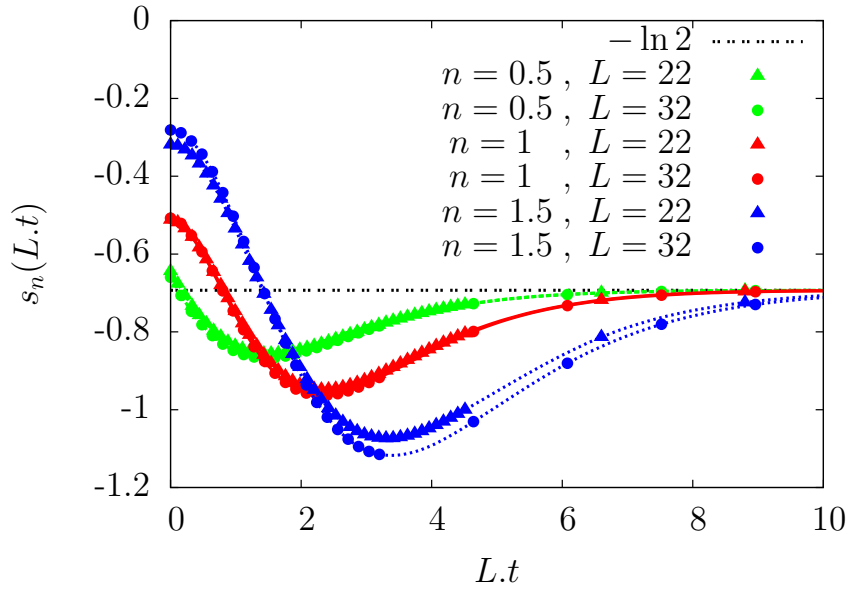


Figure 9. Sub-leading constants s_n , as a function of $t \times L$. For each values of n , the data corresponding to different values of t and L appear to be well described by a function of $t \times L$ only.

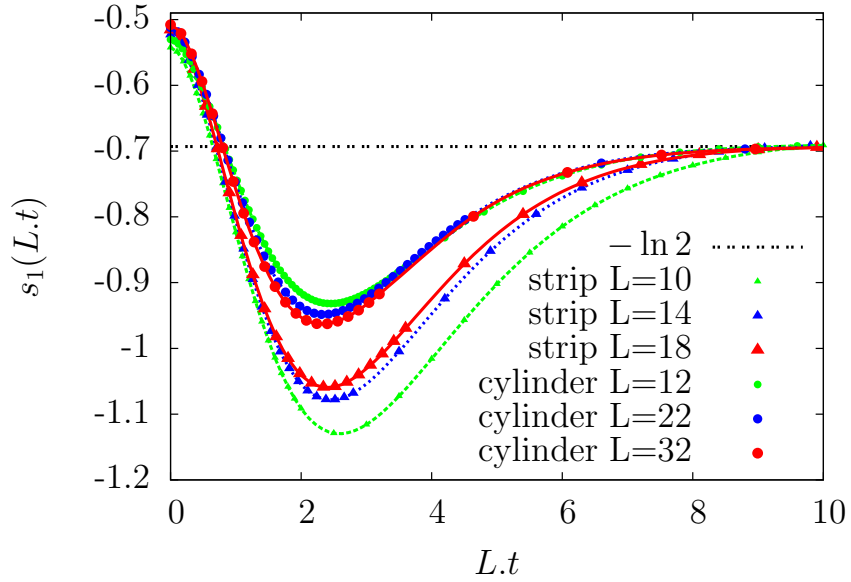


Figure 10. Sub-leading constants for the entanglement entropy calculated numerically in two geometries : half-infinite cylinder and zig-zag strip (see text).

4.5. Infinite Rényi and bipartite fidelity

As already emphasized, the infinite- n Rényi limit selects the largest eigenvalue of the RDM, which is the probability of the most likely configuration in the dimer language:

$$S_\infty = -\ln p_{\max} \quad (36)$$

For the cylinder geometry the corresponding boundary configuration $|i_{\max}\rangle$ is particularly simple (see Fig. 4 for a graphical representation):

$$|i_{\max}\rangle = |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle, \quad (37)$$

and $p_{\max}$ can be expressed as a ratio of simple partition functions:

$$p_{\max} = \lim_{L_y \rightarrow \infty} \frac{[Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y/2)]^2}{Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y)}, \quad (38)$$

where $Z_{\text{cyl}}(L, h)$ is the partition function for dimers on a finite cylinder of length L and height h . As detailed in [Appendix B](#), we then find the following expression for S_∞

$$S_\infty = - \sum_{k=\frac{(2m-1)\pi}{L}}^{1 \leq m \leq L/2} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k - t \cos k}{\sqrt{t^2 + \sin^2 k + \sin^4 k}} \right), \quad (39)$$

from which one can extract the sub-leading constant

$$s_\infty(t) = \begin{cases} 0 & , \quad t = 0 \\ -\ln 2 & , \quad t > 0. \end{cases} \quad (40)$$

This result has already been mentioned in [Sec. 4.1](#). The entropy S_∞ can also be considered from a different point of view. $|RK\rangle$ is the ground state of the Rokhsar-Kivelson Hamiltonian, and lives on a cylinder of length L and height h . This Hamiltonian may be written as

$$H = H_{A \cup B} = H_A + H_B + H_{A,B}^{(\text{int})}, \quad (41)$$

where H_A (resp. H_B) is the Rokhsar-Kivelson Hamiltonian restricted to sites in A (resp. B). We have $[H_A, H_B] = 0$ and $H_{A,B}^{(\text{int})}$ contains all the interactions between A and B . If we denote by $|A\rangle$ (resp. $|B\rangle$) the ground-state of H_A (resp. H_B), $|A \otimes B\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle$ the ground-state of $H_A + H_B$ and by $|A \cup B\rangle = |RK\rangle$ the ground state of $H_{A \cup B}$, then $p_{\max}$ can be reformulated as

$$p_{\max} = |\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \quad (42)$$

Taking minus the logarithm we get

$$S_\infty = -\ln |\langle A \cup B | A \otimes B \rangle|^2 \quad (43)$$

The r.h.s of [Eq. 43](#) has been studied in [Ref. \[39\]](#) under the name logarithmic bipartite fidelity (LBF). The (infinite) Rényi entanglement entropy and the LBF are a priori not related, but we find that they are simply equal for this particular RK wave-function. In other words, performing a Schmidt decomposition on the total wave function $|A \cup B\rangle$, the Schmidt state with the highest Schmidt value is nothing but the ground state of

$H_A + H_B$, the RK Hamiltonian where all interactions between A and B were switched off.

However, this relation does not hold exactly in general. For instance, in the Kitaev-Preskill or Levin-Wen geometry the boundaries are not straight and in that case the boundary dimer configuration $|i_{\max}\rangle$ is not as simple as for the cylinder. Still, as pointed out in [39], the equivalence between the LBF and S_∞ can hold for some more complex topological states such as the string nets states constructed by Levin and Wen [30]. We expect that for a generic (*i.e.* non RK) gapped state, the sub-leading term in the LBF and S_∞ should be the same in the thermodynamic limit (although, due to some mismatch at short distances, the extensive terms will differ). The argument is as follows: starting from a string net state where the correspondence works, we adiabatically modify the wave function toward the state we are interested in (without closing the gap). Doing so it is natural to expect that only the short-distance properties of the entanglement will be modified (hence the $\sim L$ term) but not the sub-leading constant s_∞ which, by construction, is free from the contribution of local correlations.

4.6. Entanglement gap and entanglement spectrum

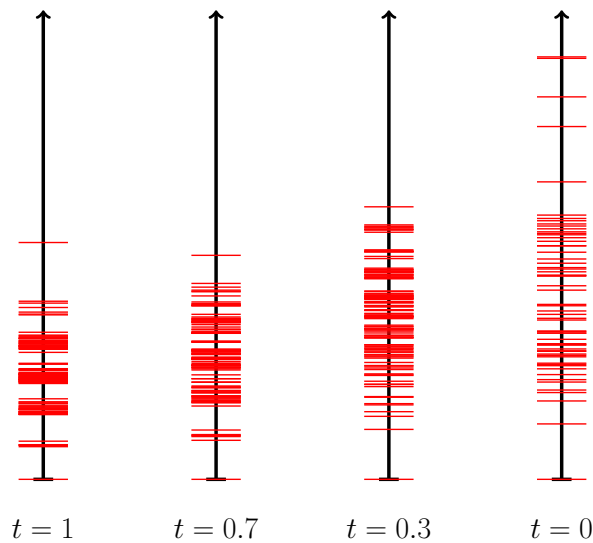


Figure 11. Entanglement spectrum for $L = 12$ and for $t = 1, 0.7, 0.3, 0$ from left to right.

The *spectrum* of the RDM contains some rich information about the system. Looking at such spectra has been particularly fruitful in the context of the quantum Hall effect (QHE), where the entanglement spectrum was shown [55] to reflect some properties of the chiral gapless excitations which can propagate along an edge [57]. With RK wave functions the RDM eigenvalues are simple classical probabilities and we thus have a relatively easy access to the entanglement spectra of large systems.

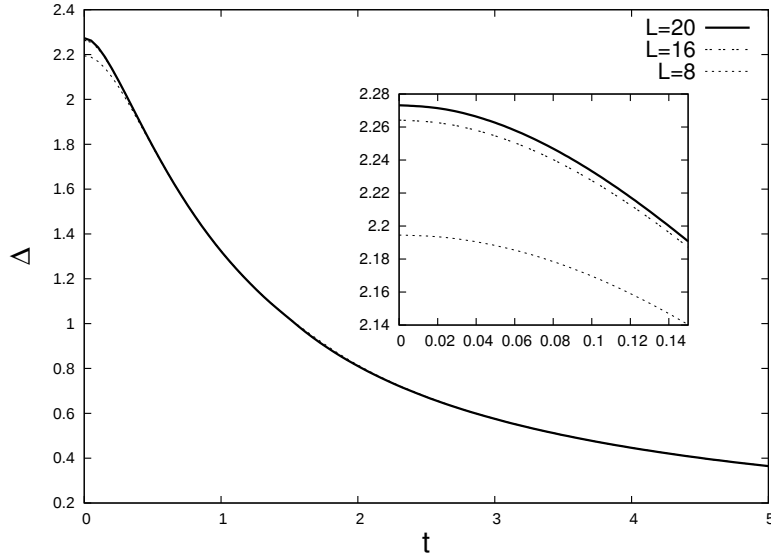


Figure 12. Entanglement gap as a function of t . It is maximum at $t = 0$ (square lattice) and decreases slowly to zero when $t \rightarrow \infty$. Except very close to $t = 0$ (inset) the curves for $L = 16$ and 20 are practically indistinguishable at the scale of the figure, signaling negligible finite-size-effects.

Such spectra shown in Figs. 11-12, where the probabilities p_i have been converted to “energies”: $E_i = -\ln(p_i/p_{\max})$. The first observation is that these spectra have a unique ground-state and a gap $\Delta = E_1$ to the first “excitation”. This is true not only in the $\mathbb{Z}_2$ liquid ($t > 0$) but also for the critical RK wave function at $t = 0$. So, contrary to the QHE where a well defined set of low energy levels are separated from the rest [55, 56], there is no apparent low-energy structure in the spectrum but a single “ground state”. One could have naively expected the entanglement gap to close when reaching the critical point at $t = 0$, but this is not the case. As can be seen in Fig. 12, the entanglement gap remains finite all the way from $t = 0$ to $t = 1$ (it vanishes only at $t = \infty$). We have for instance $\Delta = 1.32314$ at $t = 1$ (exponentially fast convergence as a function of L) and $\Delta = 2\ln(\pi) \simeq 2.29$ at $t = 0$.|| A possible interpretation is the following: the entanglement spectrum is indeed related to the spectrum of the excitations that would propagate along an edge. However, in the dimer systems we consider, there are no gapless edge excitations, even though the bulk may be gapless for

|| This analytical result for Δ in the thermodynamic limit of the square lattice can be obtained by noticing that the configuration with the highest probability is $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ while the next configuration has two consecutive flipped spins $|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\cdots\rangle$. One can check that, for $t = 0$, the ratio $p_1/p_{\max}$ of these two probabilities is nothing but the square of the probability for a bond located at the edge of a semi infinite square lattice to be occupied by a dimer. The latter probability has been computed in Ref. [52] and is equal to $1/\pi$, which gives $\Delta = -\ln(p_1/p_{\max}) = 2\ln(\pi)$.

$t = 0$.

In the thermodynamic limit, it is possible to adopt a microcanonical point of view where the entropy $S(e)$ is simply related to the density of states:

$$S(e) = \ln(\rho(e)) \quad (44)$$

with

$$\rho(e) = \sum_i \delta(e - E_i/L). \quad (45)$$

Knowing the entropy $S(e)$ from the spectrum, the energy $e(n)$ can be obtained as a function of the Rényi index n by inverting

$$\frac{dS}{de} = n(e). \quad (46)$$

The entropy S_n is then obtained as

$$S_n = \ln(\rho(e(n))). \quad (47)$$

We conclude that, for sufficiently large L the entropy only depends of the density of states at some high energy $E = L \cdot e(n)$ in the spectrum.

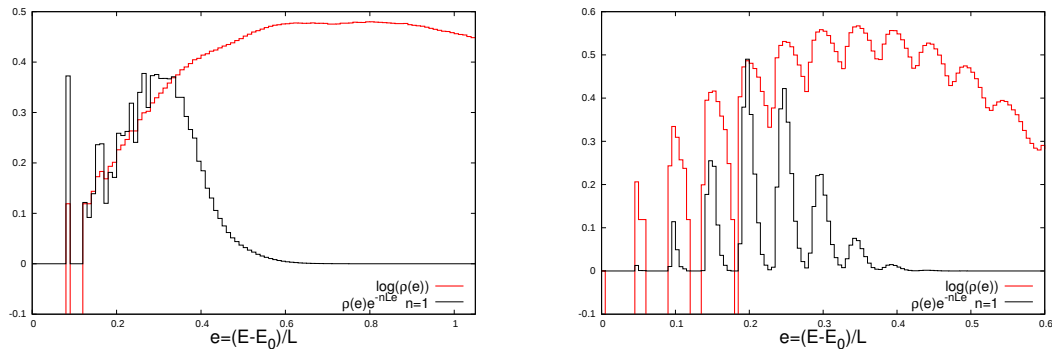


Figure 13. Logarithm of the density of states ρ associated to the entanglement spectrum of a half-infinite cylinder, as a function of the “energy” per site $e = (E - E_0)/L$ (arbitrary units). Top: $t = 0$ (square lattice), bottom: $t = 1$ (triangular lattice). To display the energy range which contribute to the Von Neumann entropy S_1 , the probability distribution $p(e) \sim \rho(e) \exp(-neL)$ is also plotted for $n = 1$. System size: $L = 28$.

The microcanonical entropy per site $S(e)/L$ is displayed in Fig. 13 for the triangular and square lattice (half-infinite cylinders with $L = 28$). Some (finite-size) oscillations are visible in the triangular case, and can be interpreted as the successive energy “bands” corresponding to $0, 2, 4, \dots$ spin flips in the boundary state. These oscillations will be smeared out in larger systems however.

5. Long strip geometry

The triangular lattice can also be constructed with open boundary conditions in the x direction. The geometry is no longer that of a cylinder but a long strip. In such a situation the leading term in the entropy is still proportional to the width of the strip $L_x = L$, but the sharp corners also contribute to the sub-leading constant and it is not possible to extract the topological entropy for $t > 0$. The critical case is more interesting, because the first subleading correction is now a logarithm of the width. The later was originally predicted to be $-\ln(L)/4$ by Fradkin and More [19] (an application of the Cardy-Peschel formula[28] which describes the universal logarithmic contribution of sharp corners to the free energy in a CFT). These terms have recently been observed numerically in the closely related Shannon entropy of open critical spin chains [48, 49]. In Fig. 14 we show the coefficient of the $\ln(L)$ term as a function of the Rényi index n for

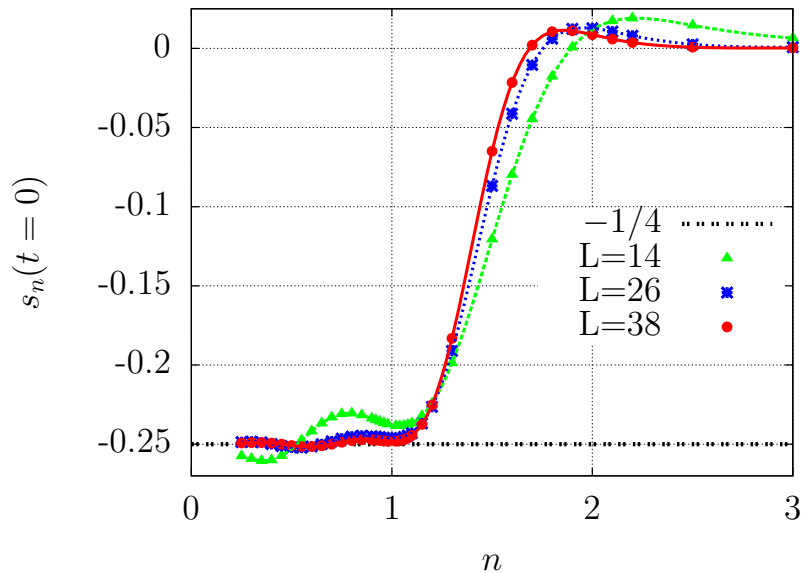


Figure 14. Coefficient of the logarithmic term in the Rényi entropy for the strip geometry, as a function of the Rényi parameter n . This term is extracted from a fit $S_n = aL + b\ln L + c + d/L$ on the systems sizes $L-6, L-4, L-2, L$. Three values $L = 14, 26, 38$ are shown. The data is consistent with the CFT results. For $n \leq n_c = 1$, the logarithmic contribution is approximately ~ -0.25 (see [17]). For $n > n_c$ it is close to zero as discussed in Ref. [49].

the square lattice dimer wave function with open boundary conditions. The prediction of Fradkin and More, $-\frac{1}{4}$, is verified up to $n \simeq 1$. For larger values of n the logarithmic term vanishes. This is a manifestation of the boundary phase transition discussed in Ref. [49]. Indeed, above n_c the compactness of the height field can no longer be ignored since a vertex operator $\cos(dh/r)$ (with d an integer) becomes relevant at the boundary. The value of d can be obtained by looking at the microscopic configuration $|i_{\max}\rangle$ with maximal probability. Contrary to the case of the XXZ chain, this configuration is non-

degenerate: $d = 1$ in the notation of Ref. [49]. Since the Luttinger parameter R is equal to 1 for the dimer problem (free fermions), the analysis of Ref. [49] immediately gives $n_c = d^2/R = 1$, in agreement with the present numerics. Above n_c the universal contribution to the entropy is that of a single “flat” height configuration. As in the XXZ chain, this flat configuration does not correspond to a simple Dirichlet boundary condition around A in the continuum limit. Indeed, the (coarse grained) height is shifted by an amount $\delta = \frac{1}{2}\pi r$ with respect to the vertical boundaries of the lattice (see Fig. 15). As in the XXZ chain situation, this height shift produces a logarithmic term which exactly compensate the logarithmic terms coming from the Cardy-Peschel angles, hence the absence of logarithm in the Rényi entropy when $n \geq n_c = 1$.

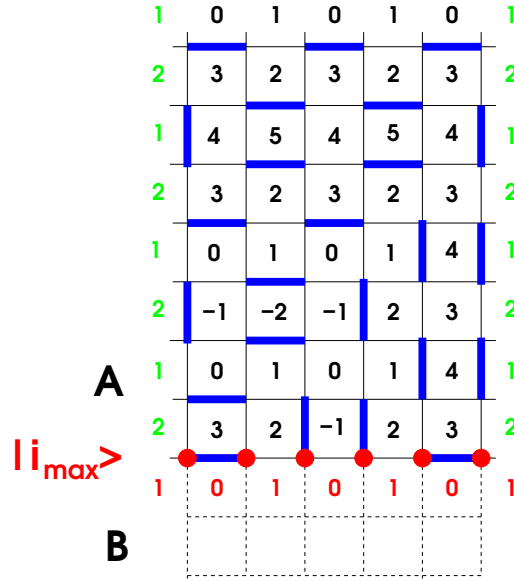


Figure 15. Configuration $|i_{\max}\rangle$ with the maximal probability on the square lattice and a compatible dimer covering of the rectangular region A . The microscopic heights are indicated in units of $\frac{1}{2}\pi r$. When turning clockwise around a site of the even (resp. odd) sublattice the height changes by $+1$ (resp. -1) when crossing an empty bond, and changes by -3 (resp $+3$) when crossing a dimer. The lower horizontal boundary of A has a coarse-grained height which is “flat”, with an average height equal to $\frac{1}{2}(0 + 1) = \frac{1}{2}$ (red). The vertical boundaries have a coarse-grained height equal to $\frac{1}{2}(1 + 2) = \frac{3}{2}$ (green). In the continuum limit there is an height shift $\delta = \pm \frac{1}{2}\pi r$ at each corner of A .

6. Kitaev-Preskill construction

As discussed in Sec. 4 the cylinder geometry allows to extract the subleading entropy term in a rather straightforward way, by a simple fit of $S_n(L)$ on (at least) two system sizes. However, the original proposals [30, 29] were to extract the topological entanglement entropy from a single and large planar system. There, the subsystems on which the entanglement entropy are computed cannot have a straight boundary and

necessarily have corners, etc. These corners (as well as the curvature) also contribute to the entanglement entropy by a (non-universal) amount of order one and therefore need to be subtracted. The subtraction scheme proposed by Kitaev and Preskill [29] is based on the following combination of entropies (see Fig. 16).

$$S_n^{\text{topo}} = S_n^{(ABC)} - S_n^{(AB)} - S_n^{(BC)} - S_n^{(AC)} + S_n^{(A)} + S_n^{(B)} + S_n^{(C)} \quad (48)$$

The first numerical implementation of this subtraction ideas was done in a the RK dimer wave function at $t = 1$ and $n = 1$ [19]. Some other recent works investigated the $n = 2$ case using quantum Monte Carlo on a Bose-Hubbard model[31] and variational quantum Monte Carlo on projected spin liquid wave-functions [58]. Here we extend the results of Ref. [19] on dimer RK wave functions for several values of t , n , and with finite areas A , B and C embedded in a *infinite* plane. The results are shown in Fig. 17. Provided t is not too small (*i.e.* the dimer-dimer correlation length is not too large), the Kitaev-Preskill construction gives an entropy constant equal to $-\ln(2)$ with high precision, as expected. Still, for the same numerical effort (boundary length), the convergence turns out to be slower than with the cylinder geometry (see Fig. 5).

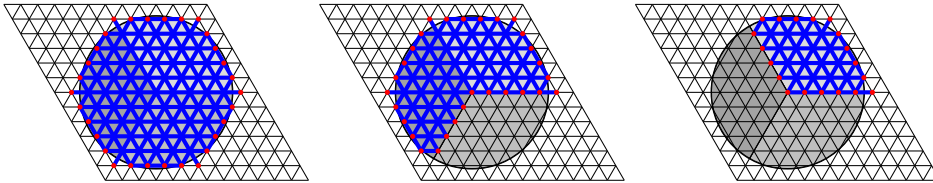


Figure 16. Geometries required for the computation of $S_n^{(ABC)}$, $S_n^{(AB)}$ and $S_n^{(A)}$ at Radius $\rho = 4.5$. They have $N_b = 30, 29$ and 19 boundary sites (in red) respectively.

The Eq. 48 was originally designed to probe *massive* wave-function, but it is also natural to consider the limit $t \rightarrow 0$ where the wave function becomes critical (and restricting to $n < n_c$ for simplicity).

Each term in Eq. 48 corresponds to a subsystem $\Omega = ABC, AB, \dots$ which is topologically equivalent to a disk, but possibly with some sharp corners. For each such subsystem, we wish to use a formula derived in Ref. [49]:

$$S_n(\Omega) = \frac{1}{1-n} \left[\ln \left(\frac{\mathcal{Z}_{n\kappa}}{\mathcal{Z}_{n\kappa}^D} \right) - n \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_{\kappa}}{\mathcal{Z}_{\kappa}^D} \right) \right], \quad (49)$$

where $\mathcal{Z}$ is a free-field partition function on the whole system, and $\mathcal{Z}^D$ is the partition function with Dirichlet boundary condition imposed at the boundary of Ω (thus disconnecting Ω and $\bar{\Omega}$). κ is the bare stiffness and the first term should be evaluated with a modified stiffness $\kappa' = n\kappa$. ¶

By construction, the non-universal contributions proportional to the boundary length will drop out of the KP combination. Next, we consider the logarithmically

¶ This formula was originally derived in the case in the case where Ω is a half infinite cylinder, but the argument in fact applies to the present geometries as well.

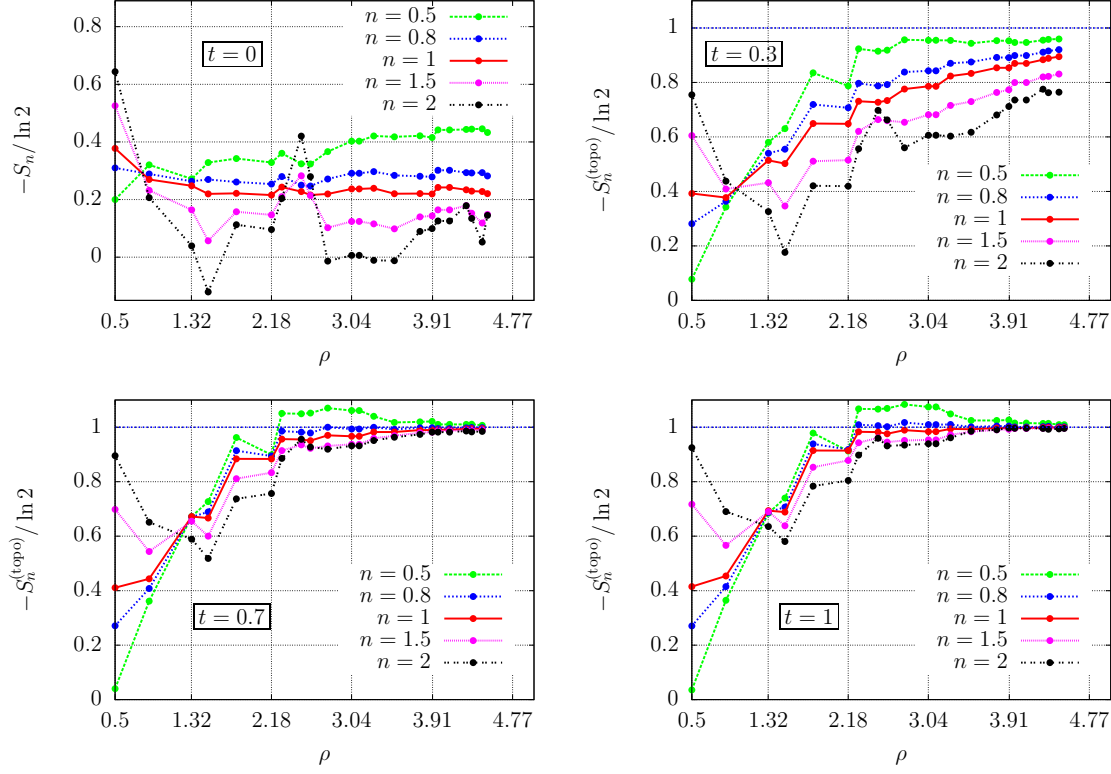


Figure 17. Top left : critical case $t = 0$. Top right : $t = 0.3$. Bottom left $t = 0.7$. Bottom right $t = 1$. In each case, $-S_n^{\text{topo}}/\ln 2$ is shown, for $n = 0.5, 0.8, 1, 1.5, 2$ as a function of the radius ρ .

divergent terms which come from the sharp corner contributions to the free energies. Each corner with interior angle α gives a contribution $F(\alpha) = \frac{1}{24}(\frac{\alpha}{\pi} - \frac{\pi}{\alpha}) \ln(L/l_0)$ to the free energy, where L is the typical scale of the boundary and l_0 some microscopic cut off [28]. To apply the Eq. 49 what needs to be computed is the free energy difference between that of the whole system, and that where Ω and $\bar{\Omega}$ have been disconnected (Dirichlet boundary condition). So, in the disconnected term, a sharp corner of angle α in Ω will also contribute as a sharp corner of angle $2\pi - \alpha$ (in $\bar{\Omega}$). The contribution to S_n is thus $\delta S_n = F(\alpha) + F(2\pi - \alpha) = \frac{1}{24}(2 - \frac{\pi}{\alpha} - \frac{\pi}{2\pi - \alpha}) \ln((L/l_0))$, which is by construction symmetric under the exchange $\alpha \leftrightarrow 2\pi - \alpha$. Then it is easy to check that in the spatial decomposition implied by 48, each angle appearing in some $+S_\Omega$ will cancel out with another one (with the same angle or its complement) in $-S_{\bar{\Omega}}$.

However, as already mentioned in Ref. [31], this is only true for the leading (logarithmically divergent) part, because there is no simple reason why the microscopic length scales l_0 should all be the same. We thus expect some constant (non-divergent) and non-universal contribution to the entropy when $t = 0$.

Refs. [19, 20] mentioned that the entanglement entropy of a disk Ω of radius R embedded in a larger disk $\bar{\Omega}$ of radius L could have a (very slowly) diverging term $\sim \ln(\ln(L/R))$ for a critical RK wave function. However, in the lattice (dimer) version

of the RK state we consider, it is easy to show that the entropy must be finite when $L \rightarrow \infty$ while keeping R fixed. The argument is as follows: the (Von Neumann) entropy S_1 of a subsystem can be expressed using the probabilities p_i of its boundary configurations:

$$S_1 = - \sum_{i=1}^N p_i \ln(p_i) \quad (50)$$

where N is the number of possible microscopic configurations at the boundary of Ω . If the boundary has a finite length $\sim R$, N must be finite with $\ln N \sim R$. As a consequence, since the entropy is bounded by $\ln N$, we have $S_1 \lesssim R$. In other words, the entanglement entropy cannot exceed the boundary law for RK states. This bound does not involve the size of the outer system $\bar{\Omega}$, and none of the entropies appearing in Eq. 48 can diverge when taking the outer system to its thermodynamic limit. Why the argument of Ref. [19] does not apply to this quantity in lattice RK states is however unclear to us. But in any case $S_{\text{topo}}(R)$ cannot diverge when taking $L \rightarrow \infty$ at fixed R , whatever the lattice RK state provided it has a finite number of states per site. This is indeed confirmed by our numerical estimations of $S_{\text{topo}}(R)$ which are performed directly in the thermodynamic limit $L = \infty$ and which gives finite values for finite values R . Although the system sizes (R) are too small to observe the true large- R behavior for $t = 0$ (square lattice), the argument above concerning the corner contribution indicate that it is very likely a non-universal number.

7. Summary and conclusions

Thanks to some extensive use of the Pfaffian solution of the classical (2d) dimer model, we have performed exact calculations of the entanglement entropy and entanglement spectra of some dimer RK states on large subsystems. Using the cylinder and the Kitaev-Preskill geometries we recovered the topological entanglement entropy of the $\mathbb{Z}_2$ phase, $-\ln(2)$, with high accuracy. As expected, this value not only holds for the triangular lattice RK wave-function, but is in fact independent of the fugacity $t > 0$. We also analyzed the scaling close to the critical point at $t = 0$, as well as the behavior for large values of the Rényi index n . In particular, we proved for $n \rightarrow \infty$ that the sub-leading entropy constant is $-\ln(2)$. Thanks to its translation-invariant boundary, the cylinder geometry gives smaller finite-size effects and therefore a much more precise estimation of the topological entanglement entropy than the KP setup (for a given length of the subsystem boundary). For this reason, it may be preferred in future numerical studies (exact diagonalization or quantum Monte Carlo) looking for topological ground states in realistic lattice models.

The entanglement spectra were also computed in the cylinder geometry, and the presence of a unique ground-state and a finite gap (whatever the fugacity) showed that for these states, contrary to naive expectations, the topological (or critical) nature of the phase is not apparent in the low-energy part of the entanglement spectrum. Simpler $\mathbb{Z}_2$

wave functions such as that of the Toric Code[12] (or that of Ref. [38]) do not allow to learn much about the structure of the entanglement spectrum. Indeed, in those states with vanishing correlation length all the non-zero eigenvalues of the reduced density matrix are exactly degenerate (no n dependence of the Rényi entropy). From this point of view, the dimer states we consider offer an interesting compromise between the possibility to do exact calculations on large systems and a non-trivial entanglement spectrum. Extending these calculations to other states with richer topological structure, like string-nets wave functions [46], could be a promising direction of research.

Appendix A. Green function elements for an infinite cylinder

Appendix A.1. Diagonalization of the Kasteleyn matrix

We wish to diagonalize the Kasteleyn matrix by Fourier transform for $L_y \rightarrow \infty$. To do so we must distinguish between two sublattices (see Fig. 3):

$$\mathcal{L}_0 = \{(2x\mathbf{u}_x + y\mathbf{u}_y) \mid 0 \leq x < L_x/2, 0 \leq y < L_y\} \quad (\text{A.1})$$

$$\mathcal{L}_1 = \{(2x+1)\mathbf{u}_x + y\mathbf{u}_y \mid 0 \leq x < L_x/2, 0 \leq y < L_y\} \quad (\text{A.2})$$

We denote by $N = L_x L_y$ the number of sites. Then we define a new basis

$$|\mathbf{k}, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{\mathbf{r}_0 \in \mathcal{L}_0} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0} |\mathbf{r}_0\rangle \quad (\text{A.3})$$

$$|\mathbf{k}, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{\mathbf{r}_1 \in \mathcal{L}_1} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} |\mathbf{r}_1\rangle \quad (\text{A.4})$$

The Kasteleyn matrix satisfies antiperiodic boundary conditions in the x -direction, and since $L_y \rightarrow \infty$, we can also assume antiperiodic boundary conditions in the y -direction. The appropriate wave-vectors are the $\mathbf{k} = k_x \mathbf{u}_x + k_y \mathbf{u}_y$ with

$$k_x \in K_x = \left\{ \frac{(2j+1)\pi}{L_x} \mid j = 0, \dots, L_x/2 - 1 \right\} \quad (\text{A.5})$$

$$k_y \in K_y = \left\{ \frac{(2j+1)\pi}{L_y} \mid j = 0, \dots, L_y - 1 \right\} \quad (\text{A.6})$$

In the new basis, the Kasteleyn matrix takes the following simple form

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 2i \sin k_y & 2i \sin k_x + 2t \cos(k_x + k_y) \\ 2i \sin k_x - 2t \cos(k_x + k_y) & -2i \sin k_y \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

and can easily be inverted

$$\mathcal{K}_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\det[\mathcal{K}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})]} \begin{pmatrix} -2i \sin k_y & -2i \sin k_x - 2t \cos(k_x + k_y) \\ -2i \sin k_x + 2t \cos(k_x + k_y) & 2i \sin k_y \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

with

$$\det[\mathcal{K}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})] = 4 \sin^2 k_x + 4 \sin^2 k_y + 4t^2 \cos^2(k_x + k_y). \quad (\text{A.9})$$

For two sites $\mathbf{r} = x\mathbf{u}_x + y\mathbf{u}_y$ and $\mathbf{r}' = x'\mathbf{u}_x + y'\mathbf{u}_y$ respectively in sublattices α and β , the Green function element is

$$\mathcal{K}_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{-1} = \frac{1}{\pi L_x} \sum_{k_x} e^{-ik_x(x'-x)} \int_0^{2\pi} dk_y \mathcal{K}_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{k}) e^{-ik_y(y'-y)} \quad (\text{A.10})$$

In this equation, the integral on dk_y can in principle be done explicitly for any $y' - y$, as will be shown in the next subsection. To compute the entanglement entropy in the cylinder geometry $|y' - y|$ doesn't however need to be greater than 2, whereas it can attain 3 in the strip geometry.

Appendix A.2. Green function elements

The computation of Green functions element requires the evaluation of integrals of the form

$$C_p(k_x) = \int_0^{2\pi} \frac{\cos(p k_y)}{4 \sin^2 k_x + 4 \sin^2 k_y + 4t^2 \cos^2(k_x + k_y)} dk_y \quad (\text{A.11})$$

$$S_p(k_x) = \int_0^{2\pi} \frac{\sin(p k_y)}{4 \sin^2 k_x + 4 \sin^2 k_y + 4t^2 \cos^2(k_x + k_y)} dk_y, \quad (\text{A.12})$$

with p an even integer (otherwise the integrals are simply zero by symmetry). Both integrands are π -periodic and following Bioche's rules we can make the change in variables $u = \tan k_y$. We get

$$C_p(k_x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{T_p[(1+u^2)^{-1/2}] du}{u^2[1 + (1+t^2) \sin^2 k_x] - ut^2 \sin(2k_x) + \sin^2 k_x + t^2 \cos^2 k_x} \quad (\text{A.13})$$

$$S_p(k_x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{u(1+u^2)^{-1/2} U_{p-1}[(1+u^2)^{-1/2}] du}{u^2[1 + (1+t^2) \sin^2 k_x] - ut^2 \sin(2k_x) + \sin^2 k_x + t^2 \cos^2 k_x} \quad (\text{A.14})$$

where $T_p(x)$ and $U_{p-1}(x)$ are the Chebyshev polynomials of the first and second kind respectively:

$$T_p(\cos \theta) = \cos p\theta \quad (\text{A.15})$$

$$U_{p-1}(\cos \theta) = \frac{\sin p\theta}{\sin \theta} \quad (\text{A.16})$$

For p even $T_p(-x) = T_p(x)$ and $U_{p-1}(-x) = -U_{p-1}(x)$. Therefore, both integrands in Eq. A.13 and A.14 are *rational* functions of u , as should be. C_p and S_p can then be calculated by residue. Closing the contour by a big circle in the upper-half plane, two poles will contribute to the integral. The first pole is at

$$u = \frac{t^2 \sin k_x \cos k_x + i \sqrt{t^2 + \sin^2 k_x + \sin^4 k_x}}{1 + (1+t^2) \sin^2 k_x} \quad (\text{A.17})$$

and is of order 1. The second one at $u = i$ is there if $p \neq 0$ and is of order $p/2$. Although the residue calculation for any even p is in principle straightforward, the procedure becomes more and more cumbersome when p gets bigger. Only for $p = 0$ do we get a simple (known[7]) result:

$$C_0(k_x) = \frac{\pi/2}{\sqrt{t^2 + \sin^2 k_x + \sin^4 k_x}} \quad (\text{A.18})$$

From these we can get access to all the Green functions elements. The simplest are along the same horizontal line, and only require the knowledge of C_0 :

$$\mathcal{K}_{2\ell \mathbf{u}_x}^{-1} = 0 \quad (\text{A.19})$$

$$\mathcal{K}_{(2\ell+1)\mathbf{u}_x}^{-1} = \frac{1}{L_x} \sum_{k_x} \frac{\sin k_x \sin(2\ell+1)k_x}{\sqrt{t^2 + \sin^2 k_x + \sin^4 k_x}} \quad (\text{A.20})$$

For the cylinder geometry, the knowledge of C_0 , C_2 and S_2 is sufficient. For the strip geometry, also C_4 and S_4 are needed. To compute the entanglement entropy in the Kitaev-Preskill geometry, it is easier to evaluate the double integral ($L_x \rightarrow \infty$) in Eq. A.10 numerically.

Appendix B. Closed-form formula for $S_{n=\infty}$ in the cylinder geometry

As explained in the text, the maximum probability corresponds to a simple configuration with all boundary spins up. Then, a natural way to proceed would be to use Eq. 27 and try to evaluate the resulting determinant. This method is most certainly viable, but we will follow another path. In the dimer language, the probability we are looking for is given by

$$p_{\max} = \lim_{L_y \rightarrow \infty} \frac{[Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y/2)]^2}{Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y)}, \quad (\text{B.1})$$

where $Z_{\text{cyl}}(L_x, h)$ counts the number of dimer coverings on a finite cylinder of circumference L_x and height h . Despite the loss of translational invariance in the y -direction, Z_{cyl} can still be evaluated in closed form, as is shown in Appendix B.1. From this $p_{\max}$ can easily be calculated, see Appendix B.2

Appendix B.1. Dimer coverings on a finite cylinder

Let Z_{cyl} be the partition we are looking for. Using (skew) translational invariance along the x -axis, one gets (recall $K_x = \{(2m-1)\pi/L_x, 1 \leq m \leq L_x/2\}$):

$$Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y)^2 = \prod_{k_x \in K_x} \det \left[\mathcal{K}_{1 \leq i, j \leq 2L_y}^{(x)} \right] \quad (\text{B.2})$$

In other word, the Kasteleyn matrix is block-diagonal with $L_x/2$ blocks of size $2L_y$. Setting $t_x = te^{ix}$ and $s_x = 2i \sin x$,

$$\mathcal{K}^{(x)} = \begin{pmatrix} 0 & s_x & 1 & t_x & 0 & & & & \\ s_x & 0 & -t_x & -1 & 0 & & & & \\ -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & 1 & t_x & & & \\ -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & -t_x & -1 & & & \\ 0 & 0 & -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & 1 & t_x & \\ 0 & 0 & -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & -t_x & -1 & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & 1 & t_x \\ & & & & & & -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & -t_x & -1 \\ & & & & & & & & -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x \\ & & & & & & & & -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Although it is not easy to diagonalize $\mathcal{K}^{(x)}$, its determinant can be exactly evaluated using the perturbation trick. To do so, we introduce

$$\mathcal{K}_0^{(x)} = \begin{pmatrix} 0 & s_x & 1 & t_x & 0 & & & & -1 & -\bar{t}_x \\ s_x & 0 & -t_x & -1 & 0 & & & & \bar{t}_x & 1 \\ -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & 1 & t_x & & & & \\ -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & -t_x & -1 & & & & \\ 0 & 0 & -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & 1 & t_x & & \\ 0 & 0 & -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & -t_x & -1 & & \\ & & & & & & & & -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & 1 & t_x \\ & & & & & & & & -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & -t_x & -1 \\ -1 & -t_x & & & & & & & -1 & \bar{t}_x & 0 & s_x & & \\ t_x & 1 & & & & & & & -\bar{t}_x & 1 & s_x & 0 & & \end{pmatrix} \quad (\text{B.4})$$

This amounts to putting antiperiodic boundary condition along the y -axis for the total Kasteleyn matrix. $\mathcal{K}_0^{(x)}$ is block skew circulant, and it can be diagonalized in Fourier space. In particular its determinant can be easily evaluated :

$$\det \mathcal{K}_0^{(x)} = \prod_{k_y \in K_y} \Delta(k_x, k_y) \quad (\text{B.5})$$

$$\Delta(k_x, k_y) = 4 \sin^2 k_x + 4 \sin^2 k_y + 4t^2 \cos^2(k_x + k_y), \quad (\text{B.6})$$

where $K_y = \{(2m-1)\pi/L_y, 1 \leq m \leq L_y\}$. This allows to express $\det \mathcal{K}^{(x)}$ as

$$\frac{\det \mathcal{K}^{(x)}}{\det \mathcal{K}_0^{(x)}} = \det \left(1 + [\mathcal{K}_0^{(x)}]^{-1} [\mathcal{K}^{(x)} - \mathcal{K}_0^{(x)}] \right) = \det M_4^{(x)} \quad (\text{B.7})$$

$\mathcal{K}^{(x)} - \mathcal{K}_0^{(x)}$ is a matrix with only 8 non-zero elements, and using elementary row-column manipulations, the determinant can be reduced to a 4×4 :

$$M_4^{(x)} = \begin{pmatrix} z & -a & w & -ib \\ -a & z & ib & -w \\ -\bar{w} & ib & \bar{z} & a \\ -ib & \bar{w} & a & \bar{z} \end{pmatrix} \quad (z, w, a, b) \in \mathbb{C} \times \mathbb{C} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \quad (\text{B.8})$$

After some algebra, we get the following formulae for the coefficients :

$$z = \frac{1}{2} + \frac{2}{L_y} \sum_{k_y} \frac{\sin^2 k_x + i [\sin(2k_y) - t^2 \sin(2k_x + 2k_y)]}{\Delta(k_x, k_y)} \quad (\text{B.9})$$

$$a = \frac{2t}{L_y} \sum_{k_y} \frac{\cos k_x}{\Delta(k_x, k_y)} \quad (\text{B.10})$$

$$w = \frac{2it}{L_y} \sum_{k_y} \frac{\sin k_x e^{-ik_x}}{\Delta(k_x, k_y)} \quad (\text{B.11})$$

$$b = \frac{2}{L_y} \sum_{k_y} \frac{\sin k_x}{\Delta(k_x, k_y)} \quad (\text{B.12})$$

The number of dimer coverings on the triangular lattice with cylindrical boundary conditions is then given by:

$$Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y) = \prod_{k_x} \left\{ \det \left(M_4^{(x)} \right) \times \prod_{k_y} \Delta(k_x, k_y) \right\}^{1/2} \quad (\text{B.13})$$

Evaluating the determinant, we finally get the following closed formula for the partition function

$$Z_{\text{cyl}}(L_x, L_y) = \prod_{k_x} \left\{ A(k_x) \times \prod_{k_y} [\Delta(k_x, k_y)]^{1/2} \right\}, \quad (\text{B.14})$$

with

$$\begin{aligned} A(k_x) &= (t^2 + \sin^2 k_x + \sin^4 k_x) d(k_x)^2 + (\sin^2 k_x - t \cos k_x) d(k_x) + 1/4 + \varepsilon(k_x)^2 \\ d(k_x) &= \frac{2}{L_y} \sum_{k_y} \frac{1}{\Delta(k_x, k_y)} \\ \varepsilon(k_x) &= \frac{2}{L_y} \sum_{k_y} \frac{\sin(2k_y) - t^2 \sin(2k_x + 2k_y)}{\Delta(k_x, k_y)}. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Appendix B.2. Exact formula for $S_{n=\infty}$

The maximum probability is in the thermodynamic limit given by

$$p_{\text{max}} = \lim_{L_y \rightarrow \infty} \frac{[Z_{\text{cyl}}(L_y/2, L_x)]^2}{Z_{\text{cyl}}(L_y, L_x)} \quad (\text{B.16})$$

$$= \prod_{k_x} \left(\lim_{L_y \rightarrow \infty} A(k_x) \right) \quad (\text{B.17})$$

Eq. B.17 follows from Eq. B.16 using Euler-Maclaurin's formula on the ratio of terms involving $\Delta(k_x, k_y)$, coming from Eq. B.13. Using Eq. A.18, we also have

$$\lim_{L_y \rightarrow \infty} d(k_x) = \frac{1}{2\sqrt{t^2 + \sin^2 k_x + \sin^4 k_x}}, \quad (\text{B.18})$$

while $\lim_{L_y \rightarrow \infty} \varepsilon(k_x) = 0$ because the integrand has a symmetry center solution of $\sin(2k_y) = t^2 \sin(2k_x + 2k_y)$. In the end we obtain

$$S_{\infty} = -\ln p_{\text{max}} = - \sum_{k_x = \frac{(2m-1)\pi}{L}}^{1 \leq m \leq L/2} \ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k_x - t \cos k_x}{\sqrt{t^2 + \sin^2 k_x + \sin^4 k_x}} \right) \quad (\text{B.19})$$

Appendix B.3. Asymptotic expansion

At $t = 0$, the subleading constant in the $L \rightarrow \infty$ asymptotic expansion just follows from the Euler-Maclaurin formula. We find

$$s_{\infty}(t = 0) = 0. \quad (\text{B.20})$$

Some additional care must be taken in the case $t > 0$. The function

$$f(k) = -\ln \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k - t \cos k}{\sqrt{t^2 + \sin^2 k + \sin^4 k}} \right) \quad (\text{B.21})$$

actually diverges as $f(k) \sim -2 \ln k$ – independent on t – when $k \rightarrow 0$. The asymptotics can be obtained by applying the Euler-Maclaurin formula on $\sum_k [f(k) + 2 \ln k]$ while applying Stirling’s formula on the remaining “linearized” term $-\sum_k 2 \ln k$. Doing so we finally obtain the topological term

$$s_\infty(t > 0) = -\ln 2. \quad (\text{B.22})$$

Only the linearized term actually contributes to the constant. Indeed, it is universal and shouldn’t be affected by the short-distance (*i.e* high momentum k) details of the model.

References

- [1] Kasteleyn P W, *The statistics of dimers on a lattice, Part I*, 1961, Physica **27**, 1209
- [2] Kasteleyn P W, *Dimer statistics and phase transitions*, 1963, J. Math. Phys **4**, 287
- [3] McCoy B M and Wu T T, *The Two-Dimensional Ising Model* 1973 Harvard University Press, Cambridge, MA
- [4] Fisher M E, *Statistical mechanics of dimers on a plane lattice*, 1961 Phys. Rev **124** 1664
- [5] Fisher M E and Stephenson J, *Statistical mechanics of dimers on a plane lattice. II. Dimer correlations and Monomers*, 1963 Phys. Rev **132** 1411
- [6] Kenyon K, *Local statistics of lattice dimers*, 1997 Annales de l’Institut Henri Poincaré **33**, 591
- [7] Fendley P, Moessner R and Sondhi S L, *Classical dimers on the triangular lattice*, 2002 Phys. Rev. B **66** 214513 .
- [8] C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, 1994 Nucl. Phys. B **424** 443
- [9] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, 2003 Phys. Rev. Lett **90** 227902
- [10] V. E. Korepin, *Universality of Entropy Scaling in One Dimensional Gapless Models*, 2004 Phys. Rev. Lett **92** 096402
- [11] Calabrese P and Cardy J, *Entanglement entropy and quantum field theory*, 2004, J. Stat. Mech. **P06002**
- [12] Kitaev A, *Fault-tolerant quantum computation by anyons*, 2003 Ann. Phys. **303** 2.
- [13] Flammia S T, Hamma A, Hughes T L, and Wen X-G, *Topological Entanglement Rényi Entropy and Reduced Density Matrix Structure*, 2009 Phys. Rev. Lett **103** 261601
- [14] Haque M, Zozulya O and Schoutens K, *Entanglement Entropy in Fermionic Laughlin States*, 2007 Phys. Rev. Lett **98** 060401 ; Zozulya O, Haque M, Schoutens K and Rezayi E H, *Bipartite entanglement entropy in fractional quantum Hall states*, 2007 Phys. Rev. B **76** 125310
- [15] Friedman B A and Levine G C, *Topological entropy of realistic quantum Hall wave functions*, 2008 Phys. Rev. B **78** 035320
- [16] Läuchli A M, Bergholtz E J, Suorsa J, and Haque M, *Disentangling Entanglement Spectra of Fractional Quantum Hall States on Torus Geometries*, 2010 Phys. Rev. Lett **104** 156404
- [17] Stéphan J-M, Furukawa S, Misguich G and Pasquier V, *Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions*, 2009 Phys. Rev. B **80** 184421 .
- [18] Henley C L, *Relaxation time for a dimer covering with height representation*, 1997, J. Stat. Phys **483**
- [19] Fradkin E and Moore J E, *Entanglement Entropy of 2D Conformal Quantum Critical Points: Hearing the Shape of a Quantum Drum*, 2006 Phys. Rev. Lett **97** 050404

- [20] Hsu B, Mulligan M, Fradkin E and Kim E-A, *Universal entanglement entropy in two-dimensional conformal quantum critical points*, 2009 Phys. Rev. B **79** [115421](#)
- [21] Hsu B and Fradkin E, *Universal Behavior of Entanglement in 2D Quantum Critical Dimer Models*, 2010 [arXiv:1006.1361v1](#)
- [22] Hsu B and Fradkin E, *Universal behavior of entanglement in 2D quantum critical dimer models*, 2010, J. Stat. Mech [P09004](#)
- [23] Ardonne E, Fendley P and Fradkin E, *Topological order and conformal quantum critical points*, 2004 Ann. Phys., NY **310** [493](#)
- [24] Furukawa S and Misguich G, *Topological entanglement entropy in the quantum dimer model on the triangular lattice*, 2007 Phys. Rev. B **75** [214407](#)
- [25] Oshikawa M, *Boundary Conformal Field Theory and Entanglement Entropy in Two-Dimensional Quantum Lifshitz Critical Point*, 2010 [arXiv:1007.3739](#)
- [26] Affleck I and Ludwig A W W, *Universal noninteger “ground-state degeneracy” in critical quantum systems*, 1991 Phys. Rev. Lett **67** [161](#)
- [27] Fendley P, Saleur H, Warner N, *Exact solution of a massless scalar field with a relevant boundary interaction*, 1994 Nucl. Phys. B **430** [577](#)
- [28] Cardy J L and Peschel I, *Finite-size dependence of the free energy in two-dimensional critical systems*, 1988 Nucl. Phys. B **300** [377](#)
- [29] Kitaev A and Preskill J, *Topological Entanglement Entropy*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** [110404](#)
- [30] Levin M and Wen X-G, *Detecting Topological Order in a Ground State Wave Function*, 2006 Phys. Rev. Lett **96** [110405](#)
- [31] S. V. Isakov, M. B. Hastings, R. G. Melko, *Topological Entanglement Entropy of a Bose-Hubbard Spin Liquid*, 2011 [arXiv:1102.1721](#)
- [32] Alet F, Jacobsen J L, Misguich G, Pasquier V, Mila F and Troyer M, *Interacting Classical Dimers on the Square Lattice*, 2005 Phys. Rev. Lett **94** [235702](#)
- [33] S. Papanikolaou, E. Luijten and E. Fradkin, *Quantum criticality, lines of fixed points, and phase separation in doped two-dimensional quantum dimer models*, 2007 Phys. Rev. B **76** [134514](#)
- [34] Perseguers S, Master Thesis, unpublished (2006).
- [35] Metlitski M A, Fuertes C A and Sachdev S, *Entanglement entropy in the $O(N)$ model*, 2009 Phys. Rev. B **80** [115122](#)
- [36] R. Moessner and S. Sondhi, *Resonating Valence Bond Phase in the Triangular Lattice Quantum Dimer Model*, 2001 Phys. Rev. Lett **86** [1881](#)
- [37] Rokhsar D S and Kivelson S A, *Superconductivity and the Quantum Hard-Core Dimer Gas*, 1988 Phys. Rev. Lett **61** [2376](#)
- [38] Misguich G, Serban D, and Pasquier V, *Quantum Dimer Model on the Kagome Lattice: Solvable Dimer-Liquid and Ising Gauge Theory*, 2002 Phys. Rev. Lett **89** [137202](#)
- [39] Dubail J and Stéphan J-M, *Universal behavior of a bipartite fidelity*, 2011, J. Stat. Mech. [L03002](#).
- [40] Fradkin E, *Scaling of entanglement entropy at 2D quantum Lifshitz fixed points and topological fluids*, 2009 J. Phys. A: Math. Theor. **42** [504011](#)
- [41] Stéphan J-M, Misguich G, and Pasquier V, *Rényi entropy of a line in two-dimensional Ising models*, 2010 Phys. Rev. B **82** [125455](#)
- [42] S. Coleman, *Quantum sine-Gordon equation as the massive Thirring model*, 1975 Phys. Rev. D **11** [2088](#)
- [43] Alet F, Ikhlef Y, Jacobsen J-L, Misguich G and Pasquier V, *Classical dimers with aligning interactions on the square lattice*, 2006 Phys. Rev. E **74** [041124](#), 2006 pre **74** [041124](#)
- [44] Behrend R E, Pearce P A, Petkova V B and Zuber J-B, *On the classification of bulk and boundary conformal field theories*, 1998 Phys. Lett. B **444** [163](#).
- [45] Kitaev A Y, *Fault-tolerant quantum computation by anyons* , 2003 Ann. Phys. (N.Y.) **303** [2](#).
- [46] Levin M and Wen X G, *String-net condensation: a physical mechanism for topological phase*, 2005 Phys. Rev. B **71** [045110](#) .
- [47] Vishwanath A, Balents L, and Senthil T, *Quantum criticality and deconfinement in phase*

- transitions between valence bond solids*, 2004 Phys. Rev. B **69** [224416](#) .
- [48] Zaletel M P, Bardarson J H , Moore J E, *Logarithmic terms in entanglement entropies of 2D quantum critical points and Shannon entropies of spin chains*, 2011 Phys. Rev. Lett **107** [020402](#) .
- [49] Stéphan J-M, Misguich G and Pasquier V, 2011, [arXiv:1104.2544](#) .
- [50] Moessner R and Raman K. S. in “Introduction to frustrated magnetism”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2011 (also on 2008, [arXiv:0809.3051](#)).
- [51] Eduardo Fradkin, David A. Huse, R. Moessner, V. Oganesyan, S. L. Sondhi, *On bipartite Rokhsar-Kivelson points and Cantor deconfinement*, 2004 Phys. Rev. B **69** [224415](#) .
- [52] Fisher M E and Stephenson J, *Statistical Mechanics of Dimers on a Plane Lattice. II. Dimer Correlations and Monomers*, 1963 Phys. Rev **132** [1411](#) .
- [53] Henley C L *From classical to quantum dynamics at Rokhsar-Kivelson points*, 2004 J. Phys.: Condens. Matter **16** [S891](#).
- [54] Ioselevich A, Ivanov D A, and Feigel'man M V, *Ground-state properties of the Rokhsar-Kivelson dimer model on the triangular lattice*, 2002 Phys. Rev. B **66** [174405](#) .
- [55] Hui Li and Haldane F. D. M., *Entanglement Spectrum as a Generalization of Entanglement Entropy: Identification of Topological Order in Non-Abelian Fractional Quantum Hall Effect States*, 2008 Phys. Rev. Lett **101** [010504](#) .
- [56] R. Thomale, A. Sterdyniak, N. Regnault, and B. Andrei Bernevig, *Entanglement Gap and a New Principle of Adiabatic Continuity*, 2010 Phys. Rev. Lett **104** [180502](#) .
- [57] Wen X.-G., *Chiral Luttinger liquid and the edge excitations in the fractional quantum Hall states*, 1990 Phys. Rev. B **41** [12838](#) .
- [58] Zhang Y, Grover T and Vishwanath A., *Topological Entanglement Entropy of Gapped Quantum Spin Liquids*, 2011 [arXiv:1106.0015](#)