

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: FT28

Integrabilidad, caos y entrelazamiento en sistemas cuánticos

Integrability, chaos and entanglement in quantum systems

Supervisor/es: Federico Finkel Morgenstern y Artemio González López

Lucía Sobral Torres

Grado en Física

Curso académico 2024-2025

Convocatoria Junio

Calificación: 10.0 (Matrícula de Honor)

Escalamiento de la entropía de entrelazamiento de cadenas de spines: aplicación de la conjetura de Fisher-Hartwig.

Resumen:

Consideramos una cadena 1-dimensional de partículas de spin $1/2$ sometidas a un campo magnético (modelo XX). Este modelo se puede diagonalizar exactamente, y observamos que se produce una transición de fase al aumentar el campo. Centrándonos en una subcadena de tamaño L , buscamos calcular la entropía de entrelazamiento del estado fundamental en la fase crítica. La conjetura de Fisher-Hartwig nos permite encontrar analíticamente una expresión asintótica de la misma, y concluir que crece logarítmicamente con L , como es característico de una teoría CFT (1+1)-dimensional.

Abstract:

We consider a 1-dimensional spin chain subject to a magnetic field (XX model). We prove that its Hamiltonian can be diagonalized exactly, and we see that it undergoes a phase transition when the field intensity takes suitable values. We focus on a subchain of length L , and compute its entanglement entropy relative to the ground state at the critical phase. The Fisher-Hartwig conjecture allows us to find analytically an asymptotic expression when $L \rightarrow \infty$. We show that the entanglement entropy grows logarithmically with L , as is characteristic of a (1+1)-dimensional CFT theory.

Índice

1. Introducción	3
1.1. Entropía de entrelazamiento	3
1.2. El modelo	4
2. Diagonalización del Hamiltoniano	6
3. Espectro y estado fundamental	8
4. Límite termodinámico y entropía de entrelazamiento	9
4.1. Matriz de correlación	10
4.2. Conexión con la entropía de entrelazamiento	11
5. Expresión asintótica de la entropía	13
5.1. Límite de campo crítico: $Lp \ll 1$	13
5.2. Límite de cadena larga: $Lp \gg 1$	14
6. Conclusión	15
A. Cálculo de la integral. Conjetura de Fisher-Hartwig	16
A.1. Expresión de las integrales I_1, \tilde{I}_2 . Cálculo de I_1	17
A.2. Cálculo de \tilde{C}	18

1. Introducción

1.1. Entropía de entrelazamiento

El entrelazamiento es uno de los fenómenos más conocidos y característicos de la mecánica cuántica. La entropía de entrelazamiento es un método de cuantificar el grado en que las dos partes de un sistema cuántico compuesto están entrelazados.

Sean A, B sistemas cuánticos y $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ sus respectivos espacios de Hilbert. El sistema compuesto AB está representado por el producto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Un *estado puro* es un elemento $|\psi\rangle$ de este espacio. Dentro de los estados puros podemos distinguir *estados producto* que pueden escribirse como el producto tensorial de un estado puro del sistema A con uno del B : $|\varphi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$. Los *estados entrelazados* son los que no pueden expresarse de esta manera.

Hay situaciones en las que no se tiene toda la información sobre en qué estado está el sistema, es el caso de los *estados mezcla*. Consisten en una mezcla estadística de estados puros $|\psi_i\rangle$ con pesos p_i . La matriz densidad $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ es una construcción que nos permite describir tanto estados puros como mezcla. El valor esperado de un observable M sobre un sistema descrito por ρ es $\text{tr}(\rho M)$.

Existe una manera de asignar un estado al subsistema A partiendo de una matriz densidad ρ en el sistema compuesto AB : la matriz densidad reducida. Esta se calcula tomando la traza parcial sobre el subsistema B . La definición $\rho_A = \text{tr}_B \rho$ es una manera razonable de realizar la asignación, pues satisface la propiedad de que el valor esperado de un observable M en A calculado con la matriz densidad reducida, coincide con el del observable $M \otimes \mathbb{1}_B$ calculado con la original matriz: $\text{tr}_A(M\rho_A) = \text{tr}(M \otimes \mathbb{1}_B \cdot \rho)$ [8].

Para ilustrar el concepto de entrelazamiento es común recurrir al ejemplo de los estados de Bell. Sean $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ espacios bidimensionales con base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ y consideramos

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B - |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B)$$

Este es un estado puro aunque entrelazado (no puede escribirse como un producto), su matriz densidad $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ cumple la caracterización de pureza $\text{tr}(\rho^2) = 1$. Observando el estado $|\psi\rangle$, vemos que las únicas mediciones posibles son $|0\rangle$ en A y $|1\rangle$ en B o viceversa. Es decir, están perfectamente anticorrelacionadas. Un observador en A que obtenga $|1\rangle_A$ sabrá que el sistema B se encuentra en $|0\rangle_B$, sin importar, por ejemplo, la distancia a la que se encuentren.

Para describir la situación de un observador en el sistema A sería interesante el cálculo de su matriz densidad reducida, que resulta

$$\rho_A = \frac{1}{2} (|0\rangle_A \langle 0|_A + |1\rangle_A \langle 1|_A)$$

Dado que $\text{tr}(\rho_A^2) < 1$, sabemos que **no** corresponde a ningún estado puro de A . El subsistema tiene un 50% de probabilidad de estar en cualquiera de los dos estados. Esto no quiere decir que estén en superposición, sino que hay una incertidumbre estadística.

Este ejemplo muestra una de las consecuencias del entrelazamiento: la pérdida de información una vez que uno se restringe a un subsistema. Aunque se parta de un estado puro, es imposible conocer por completo el estado de un subsistema.

Por otro lado, cualquier estado producto $|\varphi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$ tendrá como matriz densidad reducida $\rho_A = |\varphi\rangle_A \langle\varphi|_A$, que sí es pura. En general, un estado puro ρ será entrelazado si y sólo si sus estados reducidos son mixtos.

Para cuantificar el grado de entrelazamiento se introduce el concepto de entropía, un funcional que asigna a cada matriz densidad un valor real no negativo. Existen diversas definiciones (p. ej. la entropía de Rényi), aunque por simplicidad en este trabajo nos restringimos a la entropía de Von Neumann $S = -\text{tr}(\rho \ln \rho)$. Escrita en función de los autovalores $\{p_i\}_i$ de la matriz densidad, resulta: $S = -\sum_i p_i \ln p_i$. Esto es la entropía de Shannon de los autovalores de ρ , que recordemos pueden interpretarse como probabilidades de ciertos estados puros. Así pues, esta entropía asigna un valor cero a los estados puros, y uno positivo a los mixtos, haciéndose máxima (en dimensión finita) para mezclas con distribución de probabilidad uniforme, en las que nuestro conocimiento del estado del sistema es mínimo.

El grado de entrelazamiento de un sistema compuesto AB se cuantifica precisamente con la entropía de la matriz densidad de cualquiera de los subsistemas $S(\rho_B) = S(\rho_A) = -\text{tr}(\rho_A \ln \rho_A)$ ¹. En el contexto del ejemplo anterior, ρ_A es un estado mezcla y tiene entropía positiva. Así se refleja que los subsistemas están entrelazados.

1.2. El modelo

En este trabajo estudiaremos el modelo XX, que, junto con otros modelos de espines, tiene la particularidad de que puede ser resuelto de forma exacta. Representa una cadena de N partículas de spin $\frac{1}{2}$, que interactúan con las partículas adyacentes y con un campo magnético externo $\lambda > 0$ en la dirección del eje Z . En unidades naturales ($\hbar = c = 1$) el hamiltoniano se escribe

$$H_{XX} = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{N-1} (\sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y) + \frac{1}{2} \lambda \sum_{l=0}^{N-1} \sigma_l^z \quad (1)$$

¹La igualdad entre $S(\rho_A)$ y $S(\rho_B)$ se demuestra utilizando la descomposición de Schmidt [8].

Donde σ^μ ($\mu = x, y, z$) son las matrices de Pauli y cada σ_l^μ actúa sobre el sitio l . Se toma la condición de frontera periódica $\sigma_N^\mu = \sigma_0^\mu$ (subíndices módulo N). Es decir, particularizado a una cadena cerrada.

Según veremos en el transcurso del trabajo, este modelo presenta una transición de fase. Para ciertos valores del campo magnético, el estado fundamental se sitúa en una fase crítica (*gapless*) y a partir de un punto se vuelve ferromagnético. La propiedad de *gapless* significa que la diferencia de energía entre el estado fundamental y los primeros niveles excitados tiende a cero en el límite termodinámico.

En unidades naturales la energía tiene dimensiones de longitud a la inversa. La ausencia de este *gap* de energía en el espectro implica que no hay una escala natural en el sistema, y por tanto hay invariancia bajo cambios de escala. En el límite termodinámico, el hamiltoniano de la cadena tiende al hamiltoniano de una teoría cuántica de campos (QFT) en 1+1 dimensiones, también invariante bajo cambios de escala. Bajo condiciones muy generales, la invariancia bajo cambios de escala de una QFT implica su invariancia para todo el grupo conforme. Por tanto, la QFT asociada a un sistema *gapless* es normalmente invariante bajo transformaciones conformes, es decir es una CFT (Conformal Field Theory).

La entropía de entrelazamiento de CFTs de 1+1 dimensiones puede calcularse analíticamente. Como se detalla en [4], en el estado fundamental, y considerando condiciones de contorno periódicas, se cumple

$$S_L \sim \frac{c}{3} \ln L ,$$

donde c es la carga central que depende de la teoría y L la longitud del subsistema considerado [5, 3]. Este comportamiento asintótico debería ser también así para el modelo discreto modelizado por la CFT, la cadena XX de Heisenberg.

El objetivo de este trabajo es calcular la entropía de entrelazamiento en el estado fundamental de una subcadena de tamaño L , y comprobar que el crecimiento asintótico se ajusta al de una CFT para el caso de una carga $c = 1$. Por tanto, estudiar el modelo discreto nos proporciona información sobre la CFT asociada.

Los detalles relacionados con la Teoría de Campos Conformes están fuera del alcance de este trabajo. En la bibliografía [4, 6, 7] se trata esto en profundidad, pero es de interés mencionarlo, pues es el contexto en que se enmarca el cálculo que vamos a realizar.

Concluimos la introducción con un resumen de la estructura de esta memoria. En la Sección 2 se diagonalizará de forma exacta el hamiltoniano H_{XX} . En la Sec. 3 se analizará su espectro y su estado fundamental $|\text{GS}\rangle$, que dependerá del valor del campo magnético λ . Al comienzo de la Sec. 4 tomaremos el límite termodinámico, y calcularemos la entropía de entrelazamiento a partir de la matriz densidad reducida $\rho_L = \text{tr}_{N-L}(|\text{GS}\rangle \langle \text{GS}|)$. En principio, haría falta diagonalizar esta matriz de tamaño 2^L para poder evaluar sus autovalores en la fórmula de la entropía; no obstante, mediante un argumento detallado en [7], podremos reducir el cálculo de S_L a diagonalizar la matriz de correlación, de tamaño L .

Con esto ya reduciríamos considerablemente el coste computacional para obtener S_L . El siguiente paso sería diagonalizar de forma exacta la matriz de correlación. Al no ser esto posible, computaremos una fórmula asintótica para S_L . En la Sec. 5 obtendremos la entropía para diferentes límites: cuando el sistema se aproxima a la transición de fase, y cuando $L \rightarrow \infty$. Para este último emplearemos la conjetura de Fisher-Hartwig, cuya aplicación se desarrolla en el Apéndice.

2. Diagonalización del Hamiltoniano

El proceso de diagonalización se dará en dos pasos. El primero es aplicar la transformación de Jordan-Wigner para reescribir H_{XX} como una forma cuadrática de operadores fermiónicos. Luego se aplicará una transformada de Fourier que diagonalizará el hamiltoniano.

Para la transformación de Jordan-Wigner introducimos los siguientes operadores:

$$a_j := \left(\prod_{m=0}^{j-1} \sigma_m^z \right) \frac{\sigma_j^x - i\sigma_j^y}{2} = s_j \sigma_j^- \quad (2)$$

Proposición 2.1. *Los operadores a_j satisfacen las reglas de anticonmutación canónicas*

$$\{a_l^\dagger, a_m\} = \delta_{lm} \quad \{a_l, a_m\} = 0 \quad (3)$$

Demostración. Se deducen de las relaciones de anticonmutación $\{\sigma^\pm, \sigma^z\} = (\sigma^\pm)^2 = 0$ y $\{\sigma^+, \sigma^-\} = \mathbb{1}$. Además, las matrices σ_j^α y σ_k^β conmutan cuando actúan sobre partículas diferentes ($j \neq k$), y por tanto los operadores a_j^\dagger se escriben $a_j^\dagger = (\sigma_j^-)^\dagger s_j^\dagger = s_j \sigma_j^+$. Nótese que $s_l = \prod_{m=0}^{l-1} \sigma_m^z$ conmuta con $a_l, a_l^\dagger, \sigma_l^z, \sigma_l^\pm$. A modo de ejemplo, si $m < l$,

$$\{a_m^\dagger, a_l\} = s_m \sigma_m^+ s_l \sigma_l^- - s_l \sigma_l^- s_m \sigma_m^+ = s_m^2 \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^{l-1} \sigma_j^z \right) \{\sigma_m^+, \sigma_m^z\} \sigma_l^- = 0$$

Y para $m = l$ obtenemos $\{a_m^\dagger, a_m\} = s_m^2 \{\sigma_m^+, \sigma_m^-\} = \mathbb{1}$. □

Esta transformación tiene una interpretación sencilla para el caso de una partícula ($N = 1$): entender la partícula de spin $\frac{1}{2}$ como un fermión escalar.

Una base del espacio de Hilbert es $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Naturalmente podríamos identificar el estado de spin hacia abajo $|\downarrow\rangle$ con el estado de vacío $|0\rangle$ y el de spin hacia arriba $|\uparrow\rangle$ con el de un fermión $|1\rangle$. En este contexto, tomaríamos como operador a que aniquila el vacío a σ^- y tenemos que $a^\dagger |0\rangle = \sigma^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle = |1\rangle$. Los operadores σ^\pm satisfacen trivialmente las relaciones de anticonmutación canónicas.

Quisiéramos extender esto para interpretar una cadena de $N > 1$ espines como un sistema de N fermiones. Una manera naïve sería tomar $a_j = \sigma_j^-$, pero si hiciéramos eso nos encontraríamos con que los $\{a_j\}_j$ satisfacen relaciones de *conmutación*, en lugar de la anticonmutación deseada. Es por esto que, ingeniosamente, se introduce el producto de σ_m^z , para introducir el signo que falta y poder realmente hablar de operadores fermiónicos.

Proposición 2.2. *Bajo la transformación de Jordan-Wigner, el hamiltoniano (1) se convierte en el hamiltoniano fermiónico*

$$H_{XX} = - \sum_{l=0}^{N-2} (a_l^\dagger a_{l+1} + a_{l+1}^\dagger a_l) + (-1)^{N_f + N} (a_{N-1}^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_{N-1}) + \lambda \sum_{l=0}^{N-1} a_l^\dagger a_l \quad (4)$$

donde N_f es el número total de fermiones.

Demostración. Se puede invertir $\sigma_l^x = s_l (a_l + a_l^\dagger)$ y $\sigma_l^y = i s_k (a_k - a_k^\dagger)$. Si $0 \leq l < N - 1$ se tiene

$$\begin{aligned} \sigma_l^x \sigma_{l+1}^x + \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y &= s_l^2 \left((a_l \sigma_l^z + a_l^\dagger \sigma_l^z)(a_{l+1} + a_{l+1}^\dagger) - (a_l \sigma_l^z - a_l^\dagger \sigma_l^z)(a_{l+1} - a_{l+1}^\dagger) \right) \\ &= -2(a_l^\dagger a_{l+1} + a_{l+1}^\dagger a_l) \end{aligned}$$

Donde se ha usado $a_l \sigma_l^z = a_l$ y $s_l^2 = 1$. No obstante para $l = N - 1$

$$\begin{aligned} \sigma_{N-1}^x \sigma_0^x + \sigma_{N-1}^y \sigma_0^y &= s_{N-1} \left((a_{N-1} + a_{N-1}^\dagger)(a_0 + a_0^\dagger) - (a_{N-1} - a_{N-1}^\dagger)(a_0 - a_0^\dagger) \right) \\ &= 2 \left(\prod_{m=0}^{N-1} \sigma_m^z \right) (a_{N-1}^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_{N-1}) \end{aligned}$$

Ahora, consideramos el operador número $N_l = a_l^\dagger a_l = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_l^z)$, que como es fermiónico toma valores 0 y 1, así que $\sigma_l^z = 2N_l - \mathbb{1} = (-1)^{N_l+1}$ aporta solamente un signo.

$$\sigma_{N-1}^x \sigma_0^x + \sigma_{N-1}^y \sigma_0^y = 2(-1)^{\sum_l (N_l+1)} (a_{N-1}^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_{N-1}) = 2(-1)^{N_f+N} (a_{N-1}^\dagger a_0 + a_0^\dagger a_{N-1})$$

Por último

$$\frac{1}{2} \lambda \sum_{l=0}^{N-1} \sigma_l^z = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^{N-1} (2a_l^\dagger a_l - \mathbb{1}) = \lambda \sum_{l=0}^{N-1} a_l^\dagger a_l - \frac{\lambda N}{2} \mathbb{1}$$

□

El término de frontera introduce una complicación a la hora de llevar a cabo la transformada de Fourier, y esta debe llevarse a cabo con cuidado. Introducimos

$$\Omega_\epsilon = \{k = \frac{\pi}{N}(2l + \epsilon) \mid l = 0, \dots, N-1\} \quad \epsilon \in \{0, 1\} \quad (5)$$

Y definimos la transformada

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} a_n e^{-ikn} \quad k \in \Omega_\epsilon \quad (6)$$

Como la transformada de Fourier es unitaria, estos b_k siguen satisfaciendo las relaciones fermiónicas de anticonmutación.

Proposición 2.3. *Bajo la transformación de Fourier (6) el hamiltoniano (4) se expresa como*

$$H_{XX} = \sum_{k \in \Omega_\epsilon} (\lambda - 2 \cos k) b_k^\dagger b_k + \frac{1 + (-1)^{N+N_f+\epsilon}}{N} \sum_{k, k' \in \Omega_\epsilon} (e^{ik} + e^{-ik'}) b_k^\dagger b_{k'} \quad (7)$$

Demostración. Se basa en las identidades $\sum_{k \in \Omega_\epsilon} e^{ikp} = N \delta_{0p}$, $e^{iN(k'-k)} = 1$ y $e^{iNk} = (-1)^\epsilon$ con $p = -N+1, \dots, N-1$, y $k, k' \in \Omega_\epsilon$. Podemos invertir la transformada tal que

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \Omega_\epsilon} e^{ink} b_k \quad n = 0, \dots, N-1$$

Resultando

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{N-2} (a_l^\dagger a_{l+1} + a_{l+1}^\dagger a_l) &= \sum_{k \in \Omega_\epsilon} 2 \cos(k) b_k^\dagger b_k - \frac{1}{N} \sum_{k, k' \in \Omega_\epsilon} (e^{ik} + e^{-ik'}) b_k^\dagger b_{k'} \\ &\quad \lambda \sum_{l=0}^{N-1} a_l^\dagger a_l = \lambda \sum_{k \in \Omega_\epsilon} b_k^\dagger b_k \\ a_0^\dagger a_{N-1} + a_{N-1}^\dagger a_0 &= \frac{(-1)^\epsilon}{N} \sum_{k, k' \in \Omega_\epsilon} (e^{ik} + e^{-ik'}) b_k^\dagger b_{k'} \end{aligned}$$

□

En (7) podemos ver que el hamiltoniano está básicamente diagonalizado salvo por un término que va con $1/N$. Podríamos simplemente despreciarlo tomando el límite termodinámico; no obstante la diagonalización exacta es posible y tiene su interés. Aquí es donde entra la definición de Ω_ϵ . Dependiendo de la paridad de $N+N_f$ podríamos elegir un ϵ tal que el término frontera desaparezca. El procedimiento es el siguiente:

Descomponemos el espacio de Hilbert en una suma directa $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$ donde \mathcal{H}_α es el subespacio propio del operador $(-1)^{N_f}$ con autovalor $(-1)^\alpha$. Es, decir, \mathcal{H}_0 es el subespacio de los estados con un número par de fermiones (espines \uparrow), y \mathcal{H}_1 el de los estados con un número impar. Esta descomposición puede hacerse porque N_f conmuta con el hamiltoniano.

En contexto de suma directa podemos restringir el hamiltoniano $H_\alpha = H|_{\mathcal{H}_\alpha}$, $H = H_0 \oplus H_1$, y realizar transformadas de Fourier independientes y diferentes en cada subespacio. Así pues, si en \mathcal{H}_α seguimos los pasos anteriores tomando $\epsilon(\alpha) = N + \alpha + 1 \pmod 2$ conseguiríamos que en cada subespacio $(-1)^{N+N_f+\epsilon} = -1$ y queda diagonalizado:

$$H_\alpha = \sum_{k \in \Omega_{\epsilon(\alpha)}} (\lambda - 2 \cos k) b_k^\dagger b_k \quad (8)$$

3. Espectro y estado fundamental

Los autoestados del hamiltoniano completo H son estados contenidos en un subespacio \mathcal{H}_α de la forma

$$\{b_{k_1}^\dagger \cdots b_{k_r}^\dagger |0\rangle \mid \pi(r) = \alpha \quad k_i \in \Omega_{\epsilon(\alpha)}\} \quad (9)$$

Donde el elemento $|0\rangle \in \mathcal{H}_0$ es el autovector de la energía cero. Corresponde al estado de vacío con todos los spines \downarrow .

Es decir, un autoestado se construye excitando modos permitidos en ese subespacio. Cada modo k tiene una energía $\Lambda_k = \lambda - 2 \cos k$, así pues la energía de cada estado es $\sum_{i=1}^r (\lambda - 2 \cos k_i)$.

Nótese de la demostración de la proposición 2.3 que, en cada subespacio, el operador número total de fermiones cumple $N_f = \sum_{k \in \Omega_\epsilon} b_k^\dagger b_k$. El número de modos excitados coincide con el número de fermiones. Es por esto que la condición de paridad $\pi(N_f) = \alpha$ se traslada de fermiones a modos tal que $\pi(r) = \alpha$, y en cada subespacio debemos excitar un número de modos con la paridad correspondiente.

Por tanto, el espectro de cada H_α es:

$$\sigma_\alpha = \left\{ \sum_{i=1}^r (\lambda - 2 \cos k_i) \mid k_i \in \Omega_{\epsilon(\alpha)} \quad \pi(r) = \alpha \right\}$$

El espectro del hamiltoniano total es $\sigma(H) = \sigma_0 \cup \sigma_1$. Una observación interesante es que

$$\Omega_{\epsilon=1} = \left\{ \frac{2l\pi}{N} + \frac{\pi}{N} \mid l = 0, \dots, N-1 \right\} = \Omega_{\epsilon=0} + \frac{\pi}{N},$$

que muestra que los dos conjuntos de modos permitidos tienden a igualarse en el límite termodinámico.

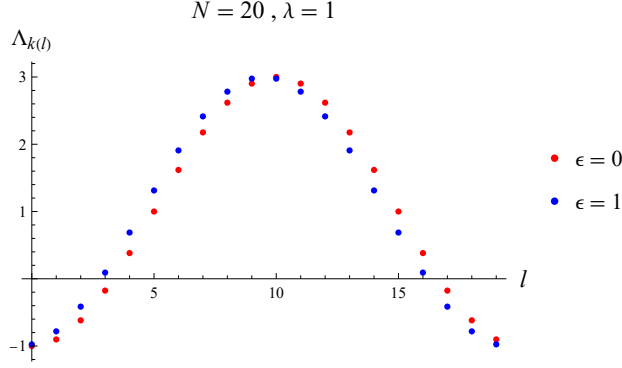


Figura 1: Energías Λ_k en función del número de modo l para los dos subespacios $\epsilon = 0, 1$. Incluso para este N relativamente bajo puede verse cómo ambas curvas tienden a superponerse en una sola.

Para la determinación del estado fundamental distinguimos dos casos, en función de la intensidad del campo magnético:

- $\lambda > 2$: en este caso $\Lambda_k > 0$ para todo k , por lo que el estado de menor energía es el vacío $|\text{GS}\rangle = |0\rangle$.
- $0 \leq \lambda < 2$: aquí algunos Λ_k son negativos, el $|\text{GS}\rangle$ se construye añadiendo los modos con $\Lambda_k < 0$ al vacío. En cada subespacio se obtiene un $|\text{GS}\rangle_\alpha$, el estado fundamental del sistema entero será el que tenga menor energía de los dos.

Así pues, lo que estamos describiendo es una transición de fase. A bajos campos magnéticos, el estado fundamental está compuesto por modos excitados con energía negativa. A partir del campo crítico $\lambda = 2$, ningún modo tiene energía negativa y el estado fundamental pasa a ser ferromagnético $|\text{GS}\rangle = |0\rangle = |\downarrow \cdots \downarrow\rangle$.

4. Límite termodinámico y entropía de entrelazamiento

En lo que sigue sí que se tomará un límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. Esto simplifica mucho la situación: las curvas $\Lambda_k^\alpha - l$ se convierten en una y podemos considerar el hamiltoniano completo

$$H_{XX} = \sum_{k \in \Omega} \Lambda_k b_k^\dagger b_k, \quad (10)$$

donde $\Omega = \Omega_{\epsilon=0} (\cong \Omega_{\epsilon=1}) = \{\frac{2\pi l}{N} \mid l = 0, \dots, N-1\}$. Y autoestados $\{b_{k_1}^\dagger \cdots b_{k_r}^\dagger |0\rangle \mid k_i \in \Omega \quad r \in \mathbb{N}_0\}$ con energías $\sum_{i=1}^r \Lambda_{k_i}$. El estado fundamental se sigue construyendo añadiendo modos con energía negativa (o el mismo vacío si $\lambda > 2$). Sean

$$k_c = p = \arccos \frac{\lambda}{2} \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \quad l_c = \lfloor \frac{N}{2\pi} k_c \rfloor \in \left[0, \frac{N-1}{2}\right], \quad (11)$$

entonces el estado fundamental está dado por $|\text{GS}\rangle = b_{k_1}^\dagger \cdots b_{k_s}^\dagger |0\rangle$ donde

$$\{k_i\}_{i=1}^s = \Omega^- = \{k \in \Omega \mid \Lambda_k < 0\} = \left\{ \frac{2\pi l}{N} \mid 0 \leq l \leq l_c \vee N - l_c \leq l \leq N - 1 \right\}. \quad (12)$$

Podemos ver representados estos modos en la siguiente gráfica:

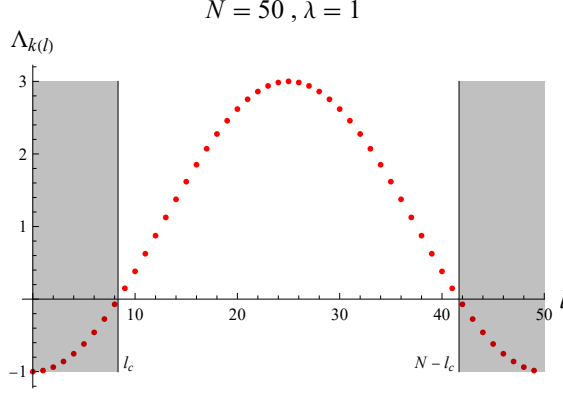


Figura 2: Espectro en el límite termodinámico para $N = 50$ espines y $\lambda = 1$. Sombreadas las regiones de modos con energía negativa (Ω^-).

4.1. Matriz de correlación

Consideramos un bloque de L espines, y escribimos la matriz de correlación para los operadores b_k

$$\langle b_p^\dagger b_q \rangle = \langle \text{GS} | b_p^\dagger b_q | \text{GS} \rangle = \begin{cases} \delta_{pq} & p \in \Omega^- \\ 0 & p \notin \Omega^- \end{cases} \quad (13)$$

Nótese que si $\lambda > 2$, $\Omega^- = \emptyset$ y la matriz $\langle b_p^\dagger b_q \rangle$ es idénticamente cero. Tomamos ahora $0 \leq \lambda < 2$. A partir de (13) puede calcularse la matriz de correlación de los operadores a_n , que es la que nos interesa:

$$\langle a_m^\dagger a_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{p,q \in \Omega} e^{iqn - ipm} \langle b_p^\dagger b_q \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k \in \Omega^-} e^{ik(n-m)} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{l=0, \dots, l_c \\ l=N-l_c, \dots, N-1}} e^{\frac{2\pi l}{N}(n-m)} \quad (14)$$

$$= \frac{2}{N} \sum_{l=0}^{l_c} \cos\left(\frac{2\pi l}{N}(n-m)\right) - \frac{1}{N} \quad (15)$$

Dado que se ha tomado un bloque de $L < N$ espines, la matriz relevante es una submatriz de la matriz de correlación global, es decir, nos restringimos a índices $m, n = 0, \dots, L-1$.

Proposición 4.1. *En el límite termodinámico, la matriz de correlación del bloque de tamaño L está dada por $\langle a_n^\dagger a_n \rangle = k_c/\pi$ en la diagonal, y para $n \neq m$*

$$\langle a_m^\dagger a_n \rangle \cong \frac{\sin(k_c(n-m))}{\pi(n-m)} \quad (16)$$

Demostración. Tomar el límite termodinámico se entiende en este contexto como hacer N tender a infinito mientras L se mantiene fijo, finito. Se desprecian los términos que van con $1/N$, en particular $\frac{2\pi}{N}(n-m)$ es despreciable pero $\frac{2\pi l_c}{N} = k_c = \arccos(\frac{\lambda}{2})$ no lo es. Partimos de la identidad $\sum_{k=1}^n \cos(kx) = \frac{\sin(\frac{nx}{2}) \cos(\frac{(n+1)x}{2})}{\sin(\frac{x}{2})}$. Calculamos:

$$\begin{aligned} \langle a_m^\dagger a_n \rangle &= \frac{1}{N} + \frac{2}{N} \sum_{l=0}^{l_c} \cos\left(\frac{2\pi l}{N}(n-m)\right) = \frac{1}{N} + \frac{2 \sin\left(\frac{k_c(n-m)}{2}\right) \cos\left(\frac{k_c(n-m)}{2} + \frac{\pi(n-m)}{N}\right)}{N \sin\left(\frac{\pi(n-m)}{N}\right)} \\ &\cong \frac{2 \sin\left(\frac{k_c(n-m)}{2}\right) \cos\left(\frac{k_c(n-m)}{2}\right)}{N \frac{\pi(n-m)}{N}} = \frac{\sin(k_c(n-m))}{\pi(n-m)} \end{aligned}$$

Para la diagonal principal, basta evaluar $n-m = 0$ en la expresión (14) y despreciar los términos con $1/N$: $\langle a_n^\dagger a_n \rangle = \frac{2(l_c+1)}{N} - \frac{1}{N} \cong \frac{2l_c}{N} = \frac{k_c}{\pi}$. \square

La matriz A_{mn} es hermítica, y de hecho pertenece a una clase de matrices particular: las matrices de Toeplitz, caracterizadas por poseer una misma entrada en cada diagonal (pues las entradas A_{mn} dependen únicamente de la diferencia $m-n$). Además:

Proposición 4.2. *La matriz de correlación $A = (A_{mn})_{m,n}$ es definida positiva, y tiene sus autovalores en el intervalo $[0, 1]$.*

Demostración. Sean $x_0, \dots, x_{L-1} \in \mathbb{C}$. El producto

$$\sum_{m,n=0}^{L-1} x_m^* A_{mn} x_n = \langle u_x | u_x \rangle \geq 0,$$

donde $|u_x\rangle = \sum_n x_n a_n |GS\rangle$. Sucede que $B = \mathbf{1} - A$ también es definida positiva, de aquí se deduce que los autovalores están entre cero y uno. Para comprobar esto, basta observar que

$$B_{mn} = \langle \delta_{mn} - a_m^\dagger a_n \rangle = \langle \{a_m^\dagger, a_n\} - a_m^\dagger a_n \rangle = \langle a_n a_m^\dagger \rangle.$$

Y la evaluación de un vector x sobre la forma bilineal B vuelve a resultar una norma al cuadrado, esta vez de $|v_x\rangle = \sum_m x_m^* a_m^\dagger |GS\rangle$. \square

4.2. Conexión con la entropía de entrelazamiento

En adelante nos restringimos únicamente al caso $\lambda < 2$, pues la entropía de entrelazamiento del caso $\lambda > 2$ es muy sencilla: el estado fundamental es $|GS\rangle = |0\rangle = |\downarrow \cdots \downarrow\rangle$, un estado producto (ferromagnético). Su entropía es trivialmente cero.

La matriz de correlación puede escribirse en términos de la matriz densidad del bloque ρ_L :

$$A_{mn} = \langle a_m^\dagger a_n \rangle = \text{tr} \left(a_m^\dagger a_n \rho_L \right) \quad (17)$$

Dado que $A = A^\dagger$ existe una transformación unitaria U que la diagonaliza: $G = U^\dagger A U$. Escrito con subíndices:

$$G_{pq} = \sum_{m,n} u_{mp}^* A_{mn} u_{nq} \quad (18)$$

Si definimos el operador $g_q = \sum_n u_{nq} a_n$ (y por tanto $g_p^\dagger = \sum_m u_{mp}^* a_m^\dagger$), la matriz G es precisamente la matriz de correlación de g_p :

$$\langle g_p^\dagger g_q \rangle = \left\langle \left(\sum_m u_{mp}^* a_m^\dagger \right) \left(\sum_n u_{nq} a_n \right) \right\rangle = \sum_{mn} u_{mp}^* A_{mn} u_{nq} = G_{pq} \quad (19)$$

Por ser combinación lineal de los a_n , los g_p son operadores fermiónicos que siguen cumpliendo las reglas de anticonmutación.

Los autovalores de A_{mn} , que son los elementos de la diagonal de G_{pq} son $\nu_m = \langle g_m^\dagger g_m \rangle$. La matriz densidad ρ_L debe cumplir también:

$$G_{mn} = \text{tr} \left(g_m^\dagger g_n \rho_L \right) = \nu_m \delta_{mn} \quad (20)$$

De aquí se deduce que la matriz ρ_L puede descomponerse como

$$\rho_L = \varrho_1 \otimes \cdots \otimes \varrho_L, \quad (21)$$

donde cada ϱ_m es la matriz densidad correspondiente al i -ésimo modo fermiónico excitado por g_m^\dagger . En la base en que $|1\rangle$ es destruido por g_m y $|0\rangle = g_m^\dagger |1\rangle$ podemos calcular

$$g_m |0\rangle = g_m g_m^\dagger |1\rangle = (\{g_m, g_m^\dagger\} - g_m^\dagger g_m) |1\rangle = |1\rangle \quad (22)$$

Y por tanto podemos escribir en forma matricial los operadores g_m, g_m^\dagger en la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$g_m = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad g_m^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

Por otro lado, la forma general de la matriz densidad ϱ_m es

$$\varrho_m = \begin{pmatrix} \alpha_m & \beta_m \\ \beta_m^* & 1 - \alpha_m \end{pmatrix} \quad (24)$$

Podemos deducir el valor de estas entradas. Empezando con la observación de que $\langle g_m \rangle = 0$. Esto se debe a que $\langle g_q \rangle = \sum_n u_{nq} \langle a_n \rangle = \sum_{n,i} u_{nq} \kappa_i \langle b_i \rangle$, y no es difícil ver que, por cómo definimos $|\text{GS}\rangle$, $\langle b_i \rangle = 0$. Podemos calcular:

$$0 = \langle g_m \rangle = \text{tr}(g_m \rho_L) = \text{tr}(g_m \varrho_m) = \text{tr} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \alpha_m & \beta_m \end{pmatrix} = \beta_m \quad (25)$$

Y también:

$$\nu_m = \langle g_m^\dagger g_m \rangle = \text{tr}(g_m^\dagger g_m \rho_L) = \text{tr} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_m & 0 \\ 0 & 1 - \alpha_m \end{pmatrix} \right] = \alpha_m \quad (26)$$

En conclusión, la matriz densidad reducida $\rho_L = \varrho_1 \oplus \dots \oplus \varrho_L$, cuyos autovalores son necesarios para calcular la entropía, cumple que

$$\varrho_m = \begin{pmatrix} \nu_m & 0 \\ 0 & 1 - \nu_m \end{pmatrix}, \quad (27)$$

donde los ν_m son los autovalores de la matriz de correlación A_{mn} . Como la entropía de von Neumann (o, en general, la de Rényi) es aditiva [6, 9], tenemos

$$S_L = \sum_{m=1}^L H(\nu_m), \quad (28)$$

siendo $H(x) = -x \ln(x) - (1-x) \ln(1-x)$.

Hemos reducido el problema de diagonalizar la matriz densidad (de tamaño 2^L) a diagonalizar la matriz de correlación (de tamaño L). Computacionalmente esto supone una enorme mejora, y podríamos sin mucha dificultad obtener numéricamente el valor de S_L para un L dado. Sin embargo, no es tan interesante el valor de la entropía como cuál es su dependencia de la longitud de la cadena. La dependencia explícita de S_L con L supone diagonalizar analíticamente la matriz de correlación. Esto no es posible, así pues surge el interés en obtener una fórmula asintótica para S_L . Aquí es donde entra la conjetura de Fisher-Hartwig, que nos da una aproximación para el determinante de cierto tipo de matrices de Toeplitz del que nuestra matriz de correlación forma parte.

5. Expresión asintótica de la entropía

5.1. Límite de campo crítico: $Lp \ll 1$

Antes de proceder con la fórmula asintótica para L (L crece a campo λ fijo), es interesante estudiar el límite opuesto, $Lk_c = Lp \ll 1$.

Lo cual quiere decir que $p = k_c = \arccos \frac{\lambda}{2} \cong 0$, equivalentemente $\lambda \lesssim 2$. Este límite consiste en fijar L y acercarnos por debajo al campo magnético crítico.

En este contexto de $p \ll 1$:

$$A_{mn} \cong \frac{p}{\pi} \quad (29)$$

La matriz de correlación tiene todas sus entradas iguales, valiendo p/π . Tiene pues un núcleo de dimensión $L-1$, y tan solo un autoespacio adicional de dimensión 1 con autovalor $L \cdot \frac{p}{\pi}$. Por un lado $H(0) = 0$, y para $H(\frac{Lp}{\pi})$ observamos que el cociente $(1-x)\ln(1-x)/x\ln x$ tiende a cero cuando $x \rightarrow 0^+$ y por tanto

$$S_L \cong -\frac{Lp}{\pi} \ln \left(\frac{Lp}{\pi} \right) \quad (30)$$

Se puede comparar esta aproximación con el valor exacto de la entropía calculando numéricamente los autovalores de la matriz de correlación y evaluándolos en (28).

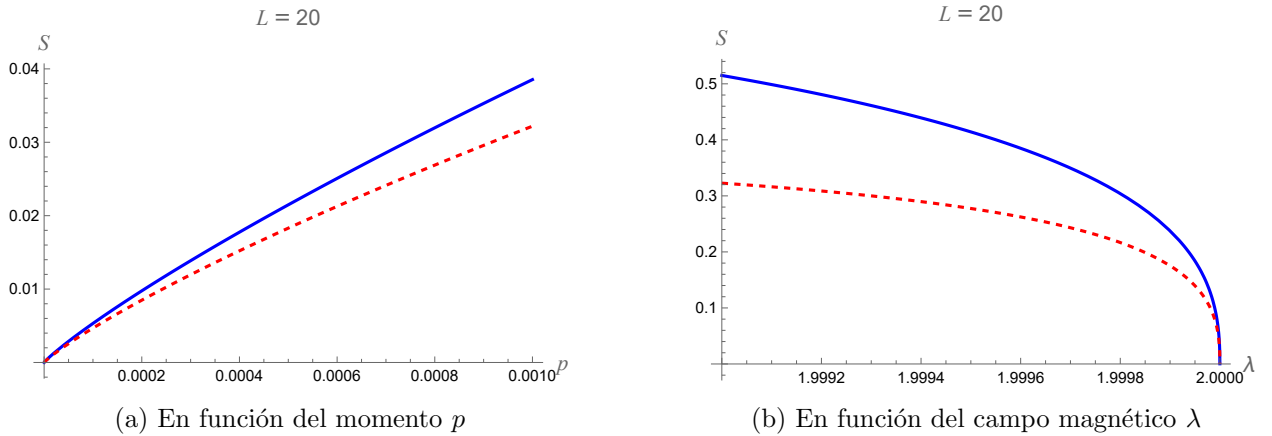


Figura 3: En azul: autovalores exactos; en rojo: aproximación $Lp \ll 1$

Hace falta acercarse muchos órdenes de magnitud al campo magnético crítico $\lambda = 2$ para que sea efectiva. Esto queda ilustrado en la figura 4.

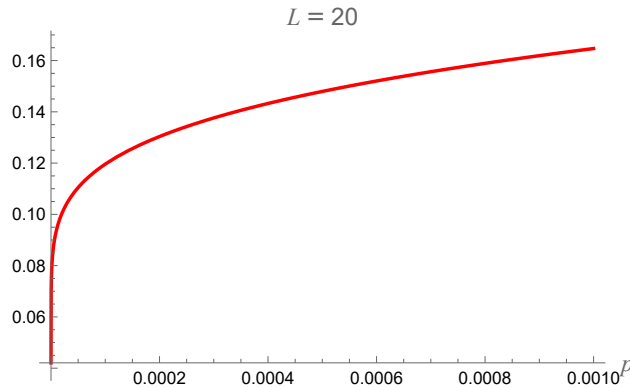


Figura 4: Error relativo de la aproximación (30) en el caso $Lp \ll 1$

5.2. Límite de cadena larga: $Lp \gg 1$

Volviendo al límite $Lp \gg 1$. El procedimiento para obtener la expresión asintótica será expresar la entropía como una integral en el plano complejo, aplicar la conjetura de Fisher-Hartwig al integrando, y finalmente simplificar la integral.

Los autovalores de A están todos entre 0 y 1, así que podríamos considerar un camino C en el plano complejo que los rodee. Por otro lado $\tilde{D}_L(\nu) = \det(\nu \mathbf{1}_L - A)$, el polinomio característico de A , tiene sus ceros en los autovalores ν_m . La función racional $\tilde{D}'_L(z)/\tilde{D}_L(z)$ tiene polos simples precisamente en los $z = \nu_m$ por lo que podríamos aplicar el teorema de Cauchy y escribir:

$$S_L = \sum_{m=1}^L H(\nu_m) = \frac{1}{2\pi i} \int_C H(z) \frac{\tilde{D}'_L(z)}{\tilde{D}_L(z)} dz = \frac{1}{2\pi i} \int_C H(z) d(\log \tilde{D}_L(z)) \quad (31)$$

No obstante, esta aplicación es incorrecta. El motivo es que $H(z)$ sólo es holomorfa en $0 < \text{Re}(z) < 1$, y un camino C que rodee el intervalo $[0, 1]$ necesariamente se sale de ese abierto. Hay que modificar $H(z)$.

Por motivos de conveniencia y simetría, hacemos un cambio de variable desde $\nu_m \in [0, 1]$ a $\mu_m = 2\nu_m - 1 \in [-1, 1]$, que son los autovalores de $2A - \mathbf{1}$. Entonces $S_L = \sum_m s(\mu_m)$ donde $s(\mu) = -\frac{(1+\mu)}{2} \log\left(\frac{1+\mu}{2}\right) - \frac{1-\mu}{2} \log\left(\frac{1-\mu}{2}\right)$ es una función holomorfa en $-1 < \text{Re}(z) < 1$. Ahora, para ampliar el intervalo, consideramos $\varepsilon > 0$ y definimos

$$s^{(\varepsilon)}(z) = -\frac{1}{2}(1+z) \log\left(\frac{1+z+\varepsilon}{2}\right) - \frac{1}{2}(1-z) \log\left(\frac{1-z+\varepsilon}{2}\right), \quad (32)$$

que es holomorfa en $-1-\varepsilon < \text{Re}(z) < 1+\varepsilon$. Podemos ahora construir el camino $C = \gamma_{\varepsilon, \delta}$ como en la figura:

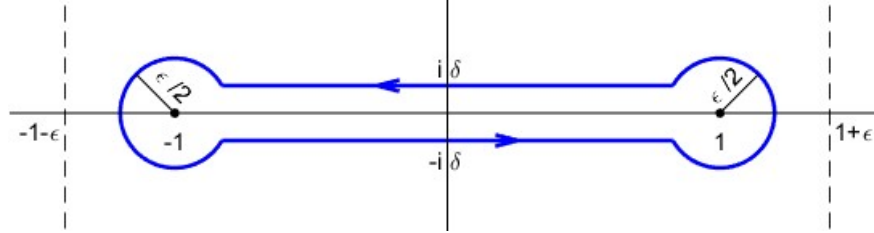


Figura 5: Contorno de integración $\gamma_{\varepsilon, \delta}$

Por lo que ahora sí estamos en condiciones de aplicar el teorema de Cauchy, y como la entropía no depende del camino podemos tomar el límite $\varepsilon, \delta \rightarrow 0^+$:

$$S_L = \lim_{\varepsilon, \delta \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_{\varepsilon, \delta}} s^{(\varepsilon)}(\lambda) \frac{d}{d\lambda} \log D_L(\lambda) d\lambda \quad (33)$$

donde $D_L(\lambda) = \det(\lambda + \mathbf{1} - 2A)$ y tiene sus ceros en μ_m .

Tras laboriosos cálculos detallados en el apéndice y que involucran la aplicación de la conjetura de Fisher-Hartwig para la aproximación asintótica del determinante $D_L(\lambda)$, se llega a la expresión:

$$S_L \cong \frac{1}{3} \log(L) + \frac{1}{3} \log(2 \sin p) + \tilde{C}, \quad (34)$$

donde $\tilde{C} \cong 0,49502$ es una constante numérica que surge de la integral definida

$$\tilde{C} = \int_0^\infty \left(\frac{-e^{-2t}}{3t} + \frac{\cosh t}{\sinh^3 t} - \frac{1}{t \sinh^2 t} \right) dt \quad (35)$$

La conclusión es, por tanto, que la entropía crece con el logaritmo de L , con un prefactor de $\frac{1}{3}$, como se adelantaba en la introducción.

Podemos comparar la fórmula (34) con la entropía numéricamente calculada para distintos valores del campo magnético:

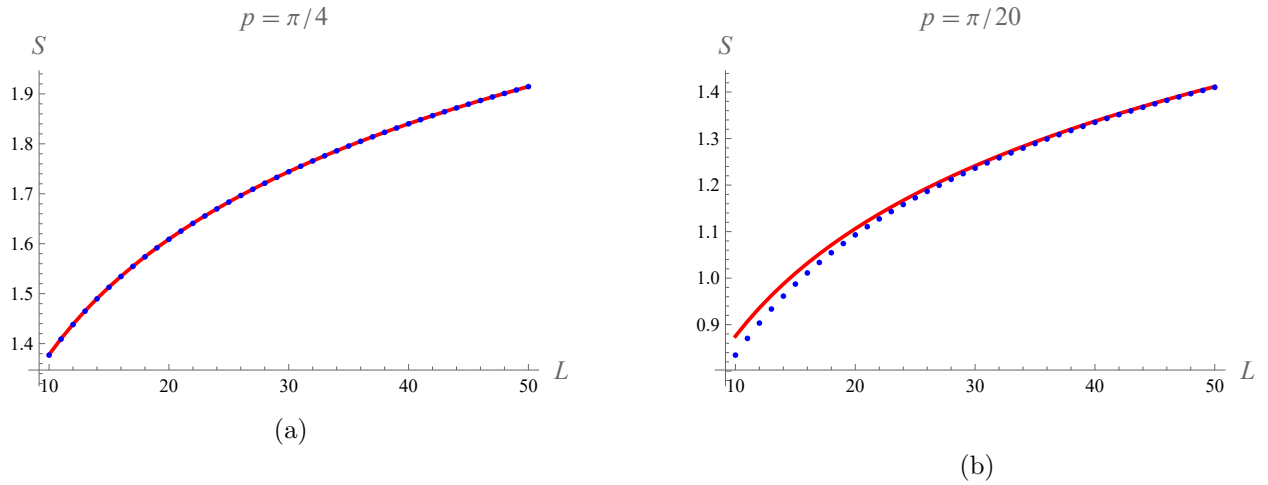
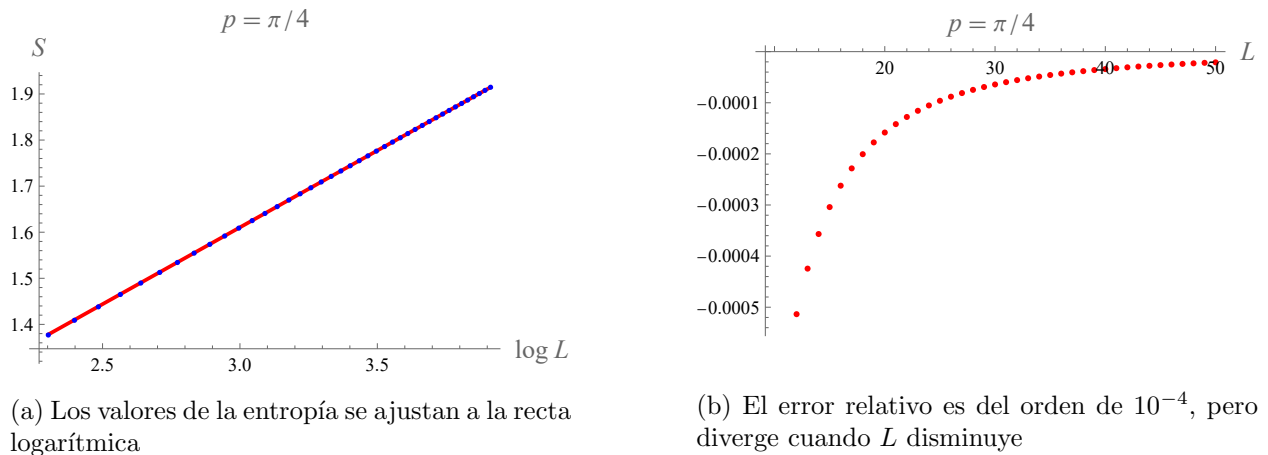


Figura 6: En azul: autovalores exactos; en rojo: aproximación $Lp \gg 1$

La fórmula ajusta sorprendentemente bien los puntos para valores de $Lp > 10$. En la segunda gráfica, que corresponde a un campo relativamente más cercano al crítico, podemos ver cómo empieza a desviarse la curva aproximada de la real, justo cuando bajamos del límite $Lp > 10$. El crecimiento logarítmico de la entropía, así como la divergencia entre las curvas cuando Lp disminuye, quedan representados en las siguientes figuras:



(a) Los valores de la entropía se ajustan a la recta logarítmica

(b) El error relativo es del orden de 10^{-4} , pero diverge cuando L disminuye

Figura 7

6. Conclusión

El entrelazamiento cuántico es uno de los principales fenómenos que distinguen la mecánica cuántica de la clásica. La entropía de entrelazamiento es una medida cuantitativa muy extendida de este efecto. La cadena de espines de Heisenberg de tipo XX es un modelo paradigmático de

sistema que presenta una transición de fase cuántica a temperatura cero.

Cuando el campo es inferior a 2 (en las unidades apropiadas), el estado fundamental está entrelazado, aumentando su entropía logarítmicamente con el tamaño L de la cadena. Para un L fijo, la máxima entropía se obtiene cuando el campo es nulo, y ésta va disminuyendo al aumentar la intensidad λ del campo hasta que, para $\lambda > 2$, se satura y se mantiene en cero. Esto es debido a que para $\lambda = 2$ se produce una transición de fase, ya que el estado fundamental pasa a ser ferromagnético (es decir, un estado producto de espines $|\downarrow\rangle$).

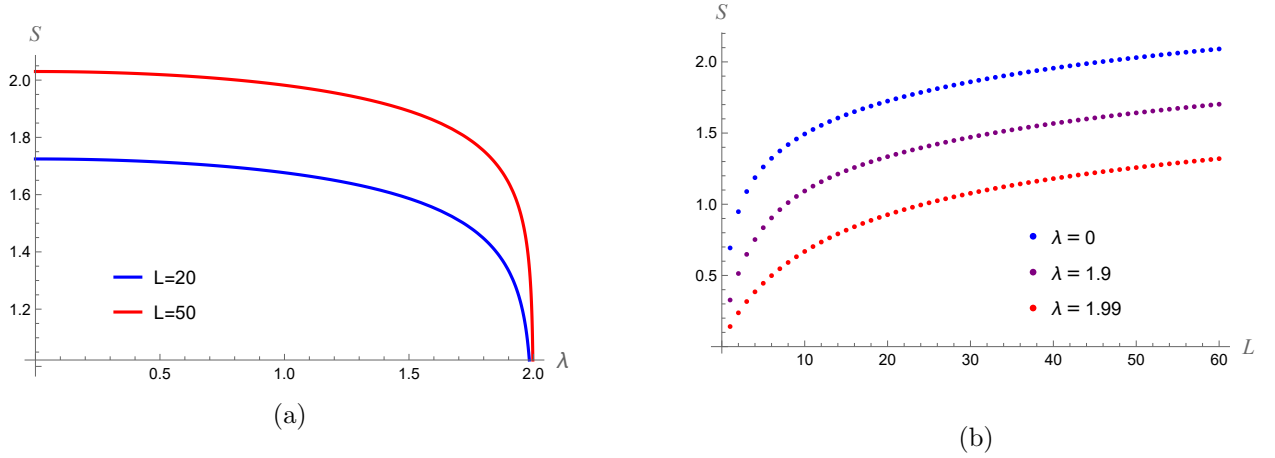


Figura 8: Cálculo numérico de la entropía diagonalizando la matriz de correlación (sin aproximaciones). Visión global.

A. Cálculo de la integral. Conjetura de Fisher-Hartwig

Para llegar a la ecuación (34), partimos de (33) y del polinomio característico $D_L = \det(T_L)$. La matriz $T_L = \lambda + \mathbf{1} - 2A$ hereda el ser matriz de Toeplitz de la matriz de correlación. En [1, 2] se muestra que esta matriz cumple unas hipótesis para las que la conjetura de Fisher-Hartwig está demostrada. Tras una serie de simplificaciones ahí descritas, se puede concluir que el determinante puede aproximarse en el límite asintótico $L \rightarrow \infty$ por

$$D_L(\lambda) \cong (2 \sin p L)^{-2\beta^2} (\lambda + 1)^L \left(\frac{\lambda + 1}{\lambda - 1} \right)^{-LP} (G(1 + \beta)G(1 - \beta))^2$$

con $P = p/\pi$, $p = k_c$, $\beta = 1/2\pi i \log(\lambda + 1/\lambda - 1)$.

Lo que sigue es el detalle de cómo introducir esta aproximación en la integral, y cómo llegar hasta (34).

Calculamos esa derivada del logaritmo de D_L , usando que

$$\frac{d\beta}{d\lambda} = \frac{-i}{\pi} \frac{1}{1 - \lambda^2}$$

Y definiendo

$$\phi(\lambda) := \frac{-1}{2\beta} \frac{d}{d\beta} \log(G(1 + \beta)G(1 - \beta))$$

Entonces

$$\frac{d}{d\beta} \log D_L \cong \frac{4i\beta}{\pi(1 - \lambda^2)} (\log(2L \sin p) + \phi(\lambda)) + L \left(\frac{1 - P}{\lambda + 1} + \frac{P}{\lambda - 1} \right)$$

El último sumando desaparece al multiplicarlo contra $s^{(\varepsilon)}$ e integrarlo porque

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma_{\varepsilon, \delta}} s^{(\varepsilon)}(\lambda) \frac{d\lambda}{\lambda \mp 1} = s^{(\varepsilon)}(\pm 1) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0^+} s(\pm 1) = 0$$

Por tanto la integral queda

$$S_L \cong \frac{2}{\pi^2} \lim_{\varepsilon, \delta \rightarrow 0^+} \int_{\gamma_{\varepsilon, \delta}} \frac{s^{(\varepsilon)}(\lambda)}{1 - \lambda^2} \beta(\log(2L \sin p) + \phi(\lambda)) d\lambda$$

Observación A.1. Hay una mejor expresión para $\phi(\lambda)$. Usando

$$G(1+z)G(1-z) = e^{-(1+\gamma_E)z^2} \prod_{n=1}^{\infty} \left[\left(1 - \frac{z^2}{n^2}\right)^n e^{z^2/n} \right]$$

Tenemos

$$\phi(\lambda) = \frac{-1}{2\beta} \frac{d}{d\beta} \left[-(1 + \gamma_E)\beta^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(n \log \left(1 - \frac{\beta^2}{n^2} \right) + \frac{\beta^2}{n} \right) \right] = 1 + \gamma_E + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^2}{n^2 - \beta^2}$$

La integral en la parte circular del contorno se anula porque las curvas son simétricas bajo $\lambda \mapsto -\lambda$ y además $\beta(-\lambda) = -\beta(\lambda)$, $s^{(\varepsilon)}(-\lambda) = s^{(\varepsilon)}(\lambda)$ y $\phi(-\lambda) = \phi(\lambda)$. Así que el integrando es antisimétrico. Nada nos impide ahora tomar el límite $\varepsilon \rightarrow 0^+$, resultando en

$$S_L \cong \frac{2}{\pi^2} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left(\int_{-1-i\delta}^{1-i\delta} - \int_{-1+i\delta}^{1+i\delta} \right) \frac{s(\lambda)}{1 - \lambda^2} \beta(\log(L 2 \sin p) + \phi(\lambda)) d\lambda$$

Sea $\lambda = x \pm i\delta$ con $|x| < 1$. Calculemos

$$w = \frac{\lambda + 1}{\lambda - 1} = \frac{x^2 - 1 + \delta^2}{(1-x)^2 + \delta^2} + i \frac{\mp 2\delta}{(1-x)^2 + \delta^2}$$

Por lo que para el módulo de w tenemos $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \|w\| = \frac{x+1}{1-x}$.

Fijado x , $\text{Re}(w) < 0$ para δ lo bastante pequeño. Así que $\text{Im}(w)/\text{Re}(w) = \pm 2\delta/(1-x^2-\delta^2) \xrightarrow{\delta \rightarrow 0^+} 0$ teniendo constantemente el signo de $\pm\delta$. Por tanto $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \arg_{(-\pi, \pi]} w = \mp\pi$. Otro límite necesario es

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \beta(x \pm i\delta) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (\log \|w\| + i \arg w) = -iB(x) \mp 1/2 = \beta^{\pm}(x),$$

con $B(x) = \frac{1}{2\pi} \log \left(\frac{1+x}{1-x} \right)$. Con esto la dependencia de L y p puede extraerse de la integral, y tenemos nuestra primera expresión de la entropía en función de unas integrales reales:

$$S_L \cong \log(L 2 \sin p) I_1 + \tilde{I}_2$$

A.1. Expresión de las integrales I_1, \tilde{I}_2 . Cálculo de I_1

Por un lado

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{2}{\pi^2} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left(\int_{-1-i\delta}^{1-i\delta} - \int_{-1+i\delta}^{1+i\delta} \right) \frac{s(\lambda)}{1 - \lambda^2} \beta d\lambda = \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1 - x^2} [(-iB(x) + 1/2) - (-iB(x) - 1/2)] dx \\ &= \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1 - x^2} dx \end{aligned}$$

Por otro

$$\begin{aligned}
\tilde{I}_2 &= \frac{2}{\pi^2} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left(\int_{-1-i\delta}^{1-i\delta} - \int_{-1+i\delta}^{1+i\delta} \right) \frac{s(\lambda)}{1-\lambda^2} \beta \phi(\lambda) d\lambda = \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} (\beta^- \phi^- - \beta^+ \phi^+) dx \\
&= (1 + \gamma_E) I_1 + \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left(\frac{(-iB(x) + 1/2)^3}{n^2 - (-iB(x) + 1/2)^2} - \frac{(-iB(x) - 1/2)^3}{n^2 - (-iB(x) - 1/2)^2} \right) dx \\
&= (1 + \gamma_E) I_1 + \frac{4}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} \operatorname{Re} \left(\frac{(iB(x) + 1/2)^3}{n^2 - (iB(x) + 1/2)^2} \right) dx = (1 + \gamma_E) I_1 + I_2
\end{aligned}$$

La primera de las integrales, I_1 , puede obtenerse exactamente usando el resultado $\int_0^1 \frac{\log t}{1-t} dt = -\frac{\pi^2}{6}$.

$$I_1 = \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} dx = \frac{-1}{\pi^2} \int_{-1}^1 \left(\frac{\log \frac{1+x}{2}}{1-x} + \frac{\log \frac{1-x}{2}}{1+x} \right) dx = \frac{1}{3}$$

Y la fórmula asintótica de la entropía resulta

$$S_L \cong \frac{1}{3} \log(L) + \frac{1}{3} \log(2 \sin p) + \tilde{C}, \quad (36)$$

donde $\tilde{C} = (1 + \gamma_E)/3 + I_2$ es una constante numérica.

A.2. Cálculo de \tilde{C}

Podemos manipular la integral I_2 para obtener una expresión algo más cerrada para \tilde{C} . Primero, darse cuenta de que se puede escribir I_2 tal que

$$I_2 = \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} (f(Z(x)) + f(1-Z(x))) dx,$$

donde $Z(x) = 1/2 + iB(x)$ y

$$f(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^3}{n(n^2 - z^2)}$$

Observación A.2 (Expresión de la función digamma). Sea $\psi(z) = \frac{d}{dz} \log \Gamma(z)$ la función digamma. Para Γ tomamos la definición

$$\Gamma(z) = \frac{e^{-\gamma_E z}}{z} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{n}\right)^{-1} e^{z/n}$$

Entonces

$$\psi(z) = -\gamma_E + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n-1+z} \right)$$

Lema A.3.

$$f(z) + f(1-z) = -(1 + \gamma_E) - \frac{1}{2}(\psi(z) + \psi(1-z))$$

Demostración. Sale trivialmente de la propiedad $\psi(1+z) = \psi(z) + 1/z$. □

Por lo que podemos escribir

$$\begin{aligned}
\tilde{C} &= (1 + \gamma_E)/3 + \frac{2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} dx (-1 - \gamma_E) - \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} (\psi(Z(x)) + \psi(1-Z(x))) dx \\
&= \frac{-1}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} (\psi(1/2 + iB(x)) + \psi(1/2 - iB(x))) dx = \frac{-1}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} (\psi(Z(x)) + \psi([Z(x)]^*)) dx \\
&= \frac{-2}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} \operatorname{Re} [\psi(1/2 + iB(x))] dx
\end{aligned}$$

Porque ψ está definida como suma de funciones racionales, así que $\psi(z^*) = (\psi(z))^*$.

Vamos a tomar el cambio de variable $w = B(x) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1+x}{1-x}$, que es equivalente a $x = \tanh \pi w$ y $e^{\pi w} = \frac{1+x}{1-x}$. Procede calcular

$$1 + x = \frac{e^{\pi w}}{\cosh \pi w} \quad 1 - x = \frac{e^{-\pi w}}{\cosh \pi w}$$

Por tanto, la función $s(w)$ se escribe

$$\begin{aligned}
s(w) &= \frac{-1}{2} \frac{e^{\pi w}}{\cosh \pi w} \log \left(\frac{e^{\pi w}}{2 \cosh \pi w} \right) + \frac{-1}{2} \frac{e^{-\pi w}}{\cosh \pi w} \log \left(\frac{e^{-\pi w}}{2 \cosh \pi w} \right) \\
&= \log(2 \cosh \pi w) \frac{e^{\pi w} + e^{-\pi w}}{2 \cosh \pi w} - \frac{\pi w}{\cosh \pi w} \frac{e^{\pi w} - e^{-\pi w}}{2} \\
&= \log(2 \cosh \pi w) - \pi w \tanh \pi w
\end{aligned}$$

Luego, nótese que por un lado $w(-1^-) = \log 0^+ = -\infty$, y por otro $w(1^-) = \log \infty = \infty$. Además, $dw = \frac{dx}{\pi(1-x^2)}$ y $s(w)$ tiene simetría par. La nueva expresión integral de la constante \tilde{C} resulta

$$\tilde{C} = \frac{-1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} s(w) (\psi(1/2 + iw) + \psi(1/2 - iw)) dw = \frac{-2}{\pi} \int_0^{\infty} s(w) (\psi(1/2 + iw) + \psi(1/2 - iw)) dw$$

Partimos de la representación integral de Gauss de la función digamma

$$\psi(z) = \int_0^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{t} - \frac{e^{-zt}}{1-e^{-t}} \right) dt$$

Para escribir

$$\psi(1/2 + iw) + \psi(1/2 - iw) = \int_0^{\infty} \frac{2e^{-t}}{t} - \frac{\cos wt}{\sinh t/2} dt$$

Quedando

$$\tilde{C} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} s(w) \int_0^{\infty} \left(\frac{-2e^{-t}}{t} + \frac{\cos wt}{\sinh t/2} \right) dt dw$$

Intercambiando las integrales

$$\tilde{C} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{-e^{-t}}{t} \left(2 \int_0^{\infty} s(w) dw \right) + \frac{1}{\sinh t/2} \left(\int_0^{\infty} s(w) \cos(wt) dw \right) dt$$

La primera integral de $s(w)$ ya la hemos calculado, está relacionada con I_1 .

$$2 \int_0^{\infty} s(w) dw = \int_{-\infty}^{\infty} s(w) dw = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{s(x)}{1-x^2} dx = \frac{\pi}{2} I_1 = \frac{\pi}{6}$$

La segunda la podemos integrar por partes, notando que $s'(w) = -\pi^2 w \operatorname{sech}^2(\pi w)$, y $s(0) = \log 2$, $s(\infty) = 0$.

$$\int_0^\infty s(w) \cos(wt) dw = - \int_0^\infty \frac{1}{t} s'(w) \sin(wt) dw$$

Resultando en

$$\begin{aligned} \tilde{C} &= \int_0^\infty \left(\frac{-1}{3} e^{-t} + \frac{2\pi}{\sinh t/2} \int_0^\infty \frac{w \sin wt}{\cosh^2 \pi w} dw \right) \frac{dt}{t} \\ &= \int_0^\infty \left(\frac{-1}{3} e^{-t} + \frac{8\pi}{\sinh t/2} \int_0^\infty \frac{e^{-2\pi w}}{(1 + e^{-2\pi w})^2} w \sin(wt) dw \right) \frac{dt}{t} \end{aligned}$$

Observación A.4. Consideramos la identidad, para $|r| < 1$

$$\frac{r}{(1+r)^2} = -r \frac{d}{dr} \frac{1}{1+r} = \sum_{n=1}^{\infty} n(-1)^{n+1} r^n$$

Que empleamos para calcular la integral dependiente del parámetro t

$$\begin{aligned} K(t) &= \int_0^\infty \frac{w e^{-2\pi w} \sin(wt)}{(1 + e^{-2\pi w})^2} dw = \operatorname{Im} \sum_{n=1}^{\infty} n(-1)^{n+1} \int_0^\infty e^{w(it-2\pi)} \cdot w dw = \operatorname{Im} \sum_{n=1}^{\infty} n(-1)^{n+1} \frac{1}{(it - 2\pi n)^2} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{4\pi t n^2}{(t^2 + 4\pi^2 n^2)^2} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{t}{\pi} \left(\frac{1}{t^2 + 4\pi^2 n^2} - \frac{t^2}{(t^2 + 4\pi^2 n^2)^2} \right) \end{aligned}$$

Para el primero de los sumandos usamos la identidad (calculable mediante residuos)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2 + a^2} = \frac{1}{2a^2} + \frac{\pi}{2a} \operatorname{csch} a\pi$$

Y resulta

$$\frac{-t}{4\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(t/2\pi)^2 + n^2} = \frac{1}{2\pi t} - \frac{1}{4\pi} \operatorname{csch} t/2$$

Para el segundo observamos que

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n^2 + \alpha)^2} &= \sum_{n=1}^{\infty} -\frac{d}{d\alpha} \frac{(-1)^n}{n^2 + \alpha} = -\frac{d}{d\alpha} \left(\frac{-1}{2\alpha} + \frac{\pi}{2\sqrt{\alpha}} \operatorname{csch} \pi\sqrt{\alpha} \right) \\ &= \frac{-1}{2\alpha^2} + \frac{\pi}{4\alpha^{3/2}} \operatorname{csch} \pi\sqrt{\alpha} + \frac{\pi^2}{4\alpha} \operatorname{csch}(\pi\sqrt{\alpha}) \operatorname{cotanh}(\pi\sqrt{\alpha}) \end{aligned}$$

Aplicado a nuestro caso

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(t^2 + 4\pi^2 n^2)^2} = \frac{1}{(4\pi^2)^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\left(\frac{t}{2\pi}\right)^2 + n^2} = \frac{-1}{2t^4} + \frac{1}{8t^3} \operatorname{csch} t/2 + \frac{1}{16t^2} \operatorname{csch} t/2 \operatorname{cotanh} t/2$$

Y la integral $K(t)$ queda resuelta

$$K(t) = \frac{\operatorname{csch} t/2}{16\pi} (t \operatorname{cotanh} t/2 - 2)$$

En conclusión

$$\begin{aligned}\tilde{C} &= \int_0^\infty \left(\frac{-1}{3} e^{-t} + \frac{8\pi}{\sinh(t/2)} \left(\frac{t}{\tanh(t/2)} - 2 \right) \frac{1}{16\pi \sinh(t/2)} \right) \frac{dt}{t} \\ &= \int_0^\infty \frac{-e^{-t}}{3t} + \frac{\cosh t/2}{2 \sinh^3(t/2)} - \frac{1}{t \sinh^2(t/2)} dt \\ &= \int_0^\infty \frac{-e^{-2t}}{3t} + \frac{\cosh t}{\sinh^3 t} - \frac{1}{t \sinh^2 t} dt \cong 0,49502\end{aligned}$$

Referencias

- [1] E. L. Basor. “A Localization Theorem for Toeplitz Determinants”. En: *Indiana University Mathematics Journal* 28 (1979), págs. 975-983. ISSN: 00222518, 19435258. URL: <http://www.jstor.org/stable/24892549> (visitado 26-05-2025).
- [2] A. Böttcher y B. Silbermann. “Toeplitz matrices and determinants with Fisher-Hartwig symbols”. En: *Journal of Functional Analysis* 63 (1985), págs. 178-214. ISSN: 0022-1236. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-1236\(85\)90085-0](https://doi.org/10.1016/0022-1236(85)90085-0). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022123685900850>.
- [3] P. Calabrese y J. Cardy. “Entanglement entropy and quantum field theory”. En: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2004 (jun. de 2004), P06002. ISSN: 1742-5468. DOI: 10.1088/1742-5468/2004/06/p06002. URL: <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/P06002>.
- [4] J. A. Carrasco, F. Finkel, A. González-López y M. A. Rodríguez. “Supersymmetric spin chains with nonmonotonic dispersion relation: Criticality and entanglement entropy”. En: *Phys. Rev. E* 95 (1 ene. de 2017), pág. 012129. DOI: 10.1103/PhysRevE.95.012129. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.95.012129>.
- [5] C. Holzhey, F. Larsen y F. Wilczek. “Geometric and renormalized entropy in conformal field theory”. En: *Nuclear Physics B* 424 (ago. de 1994), págs. 443-467. ISSN: 0550-3213. DOI: 10.1016/0550-3213(94)90402-2. URL: [http://dx.doi.org/10.1016/0550-3213\(94\)90402-2](http://dx.doi.org/10.1016/0550-3213(94)90402-2).
- [6] B.-Q. Jin y V. E. Korepin. “Quantum Spin Chain, Toeplitz Determinants and the Fisher—Hartwig Conjecture”. En: *Journal of Statistical Physics* 116 (ago. de 2004), págs. 79-95. DOI: 10.1023/B:J0SS.0000037230.37166.42. URL: <https://doi.org/10.1023/B:J0SS.0000037230.37166.42>.
- [7] J I Latorre y A Riera. “A short review on entanglement in quantum spin systems”. En: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 42 (dic. de 2009), pág. 504002. DOI: 10.1088/1751-8113/42/50/504002. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/42/50/504002>.
- [8] M. Nielsen e I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2010.
- [9] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico y A. Kitaev. “Entanglement in Quantum Critical Phenomena”. En: *Physical Review Letters* 90 (jun. de 2003). ISSN: 1079-7114. DOI: 10.1103/physrevlett.90.227902. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.227902>.