

## Ch. ミクロとマ クロの整合性

### § 概要

物理学では、物質は、ミクロには量子力学に従い、マクロには熱力学に従うと信じられています。一方、量子力学と熱力学はあまりにも違う理論であるため、両者がどのようにして整合しているのか、どのように対応しているのかが、およそ百年の長きにわたって議論されており、いまだ十分には解明されていません。ようやく近年になって、実験技術の発展により、物理系を外界から孤立させる理想的な状況で実験することができるようになり、実験と理論が急速に進展しつつあります。とくに「クエンチ」と呼ばれる、物理的なパラメーターを突然変化させて、物理系のその後の量子力学的な時間発展を調べる研究が広く行われ、熱力学との整合性が議論されています。

従来の研究では、クエンチ後にさまざまな物理量の値が熱力学の予言する値に緩和するかどうかに関心がおかれ、クエンチ前後での物理量の値の変化率である感受率については調べられていませんでした。量子力学と熱力学が整合するためには、感受率の値も両者で一致する必要があります。ところが、熱力学の感受率には「等温感受率」と「断熱感受率」という2種類があり（注2）、量子力学が与える「クエンチ感受率」を、そのどちらと比較すべきかという点すら明らかではありませんでした（図1）。そのため、どちらかに一致するのか否かも、そのための条件は何かも、分かっていませんでした。

東京大学大学院総合文化研究科先進科学研究機構の千葉侑哉大学院生、清水明機構長、大阪大学全学教育推進機構の浅野建一教授は、磁場を印加したときの磁化の変化を表す感受率を例にとって、この感受率の問題を理論的に解明することに成功しました。

まず、外部磁場が一様ではなく有限の波数  $k$  で空間的に変化するような場合を考察する、というように問題自体を拡張しました。このときのクエンチ感受率は、磁場で生じた波数  $k$  の磁化の変化率であり、 $k$  の関数になります。そして、量子力学に従う運動が十分に複雑であれば、このクエンチ感受率が  $k=0$  で不連続になる（ $k=0$  での値と  $k \rightarrow 0$  の極限值が異なる）、という特異性を持つ事を証明しました（図2）。

さらに、この不連続性によって、クエンチ感受率は、異なる熱力学的感受率を両方とも与えることを見いだしました。すなわち、クエンチ感受率の  $k=0$  における値は断熱感受率を与え、 $k \rightarrow 0$  の極限は等温感受率を与えます。

そして、量子力学の結果と熱力学の結果がこのように綺麗に対応して整合するために物理系が満たすべき条件も明らかにしました。また、これらの条件が、従来の研究で、クエンチ後に物理量の値が熱力学の予言する値に緩和するための条件として挙げられていたいずれの条件とも異なっている、新しい条件になっていることも分かりました。

さらに、これらの発見を具体的な物理系について例示し、実験で得られるであろう結果を予言するために、一次元スピン系（注3）について具体的に、量子力学が与えるクエンチ感受率と、熱力学が与える等温感受率と断熱感受率を、波数  $k$  の関数として求めました（図2）。その結果、系の量子力学的な運動が複雑になるケースでは確かに上記のような振舞になることも、運動が単純になるケースでは条件が満たされなくなりクエンチ感受率が熱力学の感受率のいずれとも一致しなくなることも、確かめられました。

今回の研究で、クエンチ感受率と熱力学的感受率の関係やそのための条件が明らかになりました。これは、物理現象をミクロな立場から説明する量子力学と、マクロな立場から説明する熱力学の関係を明らかにするという物理学の大きな問題を部分的に解決したと言えます。この研究を契機に、この大問題に対する理解が進展することが期待されます。また今回明らかとなったクエンチ感受率の特異的な振舞が、今後実験的に検証されることも期待されます。

### 注 1：感受率

外場を変化させた結果、物理量が変化するとき、その変化率のこと。たとえば、外部から印加する磁場を  $\Delta h$  だけ増やした結果、磁化が  $\Delta m$  だけ変化したとき、その変化率  $\Delta m / \Delta h$  のこと。

### 注 2：等温感受率、断熱感受率

熱力学が与える感受率のうち、温度が一定に保たれるように大きな浴槽などに入れてゆっくり外場を変化させたときの感受率を等温感受率と言ひ、外部と熱のやりとりがないように断熱容器に入れてゆっくり外場を変化させたときの感受率を断熱感受率と言う。両者は一般には異なる値をとる。

### 注 3：一次元スピン系

量子力学的な物理量であるスピンの、一次元的に並んで相互作用している物理系。相互作用の仕方を表すパラメーターの値によって、系の運動が複雑になったり単純になったりする。

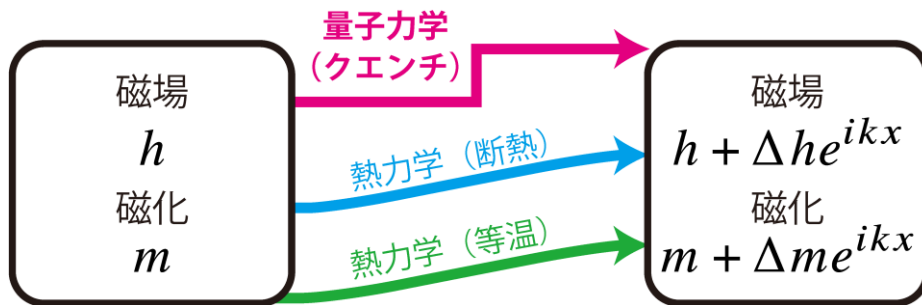


図 1 : 物質に外部から印加している磁場を  $\Delta h$  だけ増やすと、磁化が  $\Delta m$  だけ変化する。この過程が、量子力学的なクエンチ過程の場合 (赤) と、断熱容器に入れた熱力学過程の場合 (青)、そして、温度一定の熱力学過程の場合 (緑) の、3つのケースについて、感受率  $\Delta m / \Delta h$  を比較した。

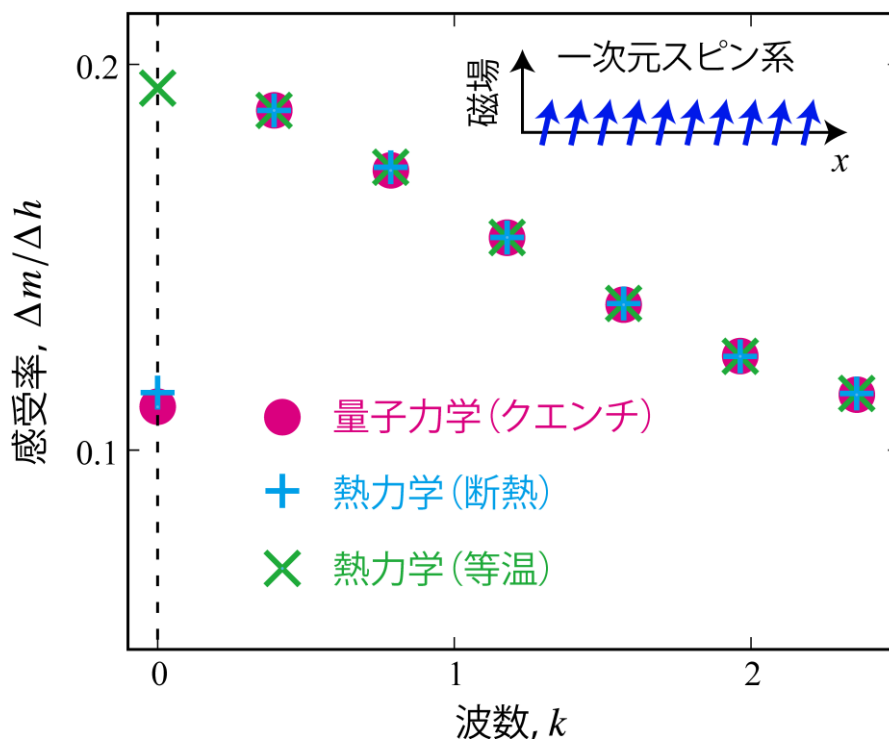


図 2: 一次元スピン系について、図 1 の 3つのケースの感受率  $\Delta m / \Delta h$  を計算で求めた結果を、波数  $k$  の関数としてプロットした。量子力学的なクエンチ過程の感受率は  $k=0$  で不連続に変化し、 $k=0$  における値は、断熱容器に入れた熱力学過程の断熱感受率に一致し、 $k \rightarrow 0$  の極限は、温度一定の熱力学過程の等温感受率に一致する。なお、僅かなずれは、系のサイズが小さいためで、サイズを大きくするにつれてずれは小さくなっていく。

## 12.7 マクスウェルの関係式

基本関係式 (完全な熱力学関数) は, 16.1 節で説明するように相転移が起こる領域を除くと解析的であり, 常に無限階連続的微分可能である. したがって, 数学の定理 1.2 (p.6) より, 2 階の偏微分係数は微分の順序に依らない. たとえば,

$$\frac{\partial}{\partial S} \left( \frac{\partial U(S, V, N)}{\partial V} \right) = \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{\partial U(S, V, N)}{\partial S} \right) \quad (12.63)$$

ということだ. この括弧内はそれぞれ  $-P(S, V, N)$ ,  $T(S, V, N)$  であるから,

$$\left( \frac{\partial P}{\partial S} \right)_{V, N} = - \left( \frac{\partial T}{\partial V} \right)_{S, N} \quad (12.64)$$

を得る. 物理的にはこれは, 断物容器にいれた物質について, 次のことを言っている: 左辺は, 体積を固定して準静的に熱 ( $d'Q = TdS$ ) を加えていったときの圧力の増加率を表す. 一方, 右辺は, 断熱して準静的に体積を増していったときの温度の (負号が付いているから) 低下率を表す. このような一見するとあまり関係がなさそうな2つの量が等しいことが予言できるのである!

これと同様の関係式は, 他にもいろいろと得られる. そのためには, 微分する変数を  $V, N$  に選ぶとか, あるいは, 微分される基本関係式を  $F(T, V, N)$  や  $G(T, P, N)$  や  $H(S, P, N)$  にすればよい (下の問題). 一見するとあまり関係がありそうもない量が等しいことが次々と分かるのだ. そうして得られた関係式たちを, マクスウェルの関係式 (Maxwell relation) と呼ぶ. (狭義には, 上で導いたものと下の問題で導くものだけをマクスウェルの関係式と呼ぶ.)

**問題 12.9** 次のマクスウェルの関係式を導き, 式 (12.64) の直後に述べたような物理的意味を考察せよ.

$$\left( \frac{\partial V}{\partial S} \right)_{P, N} = \left( \frac{\partial T}{\partial P} \right)_{S, N}, \quad (12.65)$$

$$\left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_{T, N} = \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V, N}, \quad (12.66)$$

$$\left( \frac{\partial S}{\partial P} \right)_{T, N} = - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P, N}. \quad (12.67)$$

注意して欲しいのは, これらの不思議な関係式は, 物質の種類にも量にもよらずに成り立つ, 極めて普遍的な関係式だという事実だ. このような関係式が導けることも, 熱力学の偉大な力である. 本書の理論体系では, マクスウェルの関係式は要請 II のあまりにも自然な帰結であったから, 読者はあまり驚きを感じないかもしれない. しかし, もしもこの関係式が成り立たなかったとしたら, 基本関係式は存在しないことになり<sup>11)</sup>, 熱力学そのものが成り立たないことになる. すなわち, 現実の系で,  $T$  とか  $P$  という, 読者が熱力学を知る以前からなじんでいたであろう物理量の間, マクスウェルの関係式が成り立っているという事実は, そのなじみ深い物理量たちの背後に熱力学という普遍的な理論構造が存在している傍証なのである!

<sup>11)</sup>基本関係式の存在  $\Rightarrow$  マクスウェルの関係式の成立だったから, その対偶をとることによってこれが言える.

## 15.2 ヤコビアン

次に、多変数関数の偏微分係数を扱うのに便利な、ヤコビアンを使った計算手法を説明する。15.4節の実例から分かるように、熱力学では実質的に2変数関数のケースを利用することが多いので、2変数関数で説明するが、多変数関数への拡張は容易である<sup>3)</sup>。微分可能性などの必要な条件は満たされているとする。

変数  $x, y$  の関数  $X = X(x, y), Y = Y(x, y)$  について、その偏微分係数からなる  $2 \times 2$  行列の行列式

$$\frac{\partial(X, Y)}{\partial(x, y)} \equiv \begin{vmatrix} \frac{\partial X}{\partial x} & \frac{\partial X}{\partial y} \\ \frac{\partial Y}{\partial x} & \frac{\partial Y}{\partial y} \end{vmatrix} \quad (15.1)$$

を、関数  $X, Y$  のヤコビアン (Jacobian) とか関数行列式と呼ぶ。ヤコビアンは、成分が数ではなくて関数だ、という以外は普通の行列の行列式と同じだから、行列式の様々な性質をそのまま持っている。たとえば、関数や変数を入れ替えると、行や列が入れ替わるので、1回入れ替える毎に符号が反転する：

$$\frac{\partial(X, Y)}{\partial(x, y)} = -\frac{\partial(Y, X)}{\partial(x, y)} = \frac{\partial(Y, X)}{\partial(y, x)} = -\frac{\partial(X, Y)}{\partial(y, x)} \quad (15.2)$$

という具合である。

このような普通の行列式の性質に加えて、ヤコビアンは、関数を様々に選ぶことによって、有用な関係式が得られる。とくに、 $Y = y$  と選べば、

$$\frac{\partial(X, y)}{\partial(x, y)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial X}{\partial x} & \frac{\partial X}{\partial y} \\ 0 & 1 \end{vmatrix} = \left( \frac{\partial X}{\partial x} \right)_y \quad (15.3)$$

---

<sup>3)</sup>  $n$  個の変数  $x_1, x_2, \dots, x_n$  の関数の場合には、関数も  $X_1, X_2, \dots, X_n$  のように  $n$  個考え、その偏微分係数  $\frac{\partial X_i}{\partial x_j}$  を  $i$  行  $j$  列目の行列要素とする  $n \times n$  行列の行列式がヤコビアンになる。

と、偏微分係数を、偏微分するとき固定する変数を分母分子に共通に入れたヤコビアンで表すことができる。たとえば、

$$\frac{\partial(X, x)}{\partial(y, x)} = \left( \frac{\partial X}{\partial y} \right)_x, \quad \frac{\partial(Y, y)}{\partial(x, y)} = \left( \frac{\partial Y}{\partial x} \right)_y, \quad \frac{\partial(Y, x)}{\partial(y, x)} = \left( \frac{\partial Y}{\partial y} \right)_x \quad (15.4)$$

という具合である。

さらに、 $x, y$  が別の変数  $\xi, \eta$  の関数であれば、次のような簡単な関係が成り立つことが示せる：

$$\frac{\partial(X, Y)}{\partial(\xi, \eta)} = \frac{\partial(X, Y)}{\partial(x, y)} \frac{\partial(x, y)}{\partial(\xi, \eta)}. \quad (15.5)$$

この式でとくに  $\xi = X, \eta = Y$  と選べば、

$$\frac{\partial(X, Y)}{\partial(x, y)} = 1 / \frac{\partial(x, y)}{\partial(X, Y)} \quad (15.6)$$

もわかる。式 (15.5) や (15.6) は要するに、 $\partial(\dots)$  を普通の数のように約分したりできると言っている。

これらの公式の簡単な応用例は、変数  $x, y$  の関数  $z = z(x, y)$  について、 $\frac{\partial(z, y)}{\partial(x, y)} = 1 / \frac{\partial(x, y)}{\partial(z, y)}$  から、

$$\left( \frac{\partial z}{\partial x} \right)_y = 1 / \left( \frac{\partial x}{\partial z} \right)_y. \quad (15.7)$$

ただ、この  $n$  変数版である (14.8) について述べたように、この等式はヤコビアンを用いずとも自明である。もう少し非自明な例としては、次の問題を解いてみよ：

**問題 15.4** (i) 変数  $x, y$  の関数  $z = z(x, y)$  について、次の綺麗な公式を導け：

$$\left( \frac{\partial x}{\partial y} \right)_z \left( \frac{\partial y}{\partial z} \right)_x \left( \frac{\partial z}{\partial x} \right)_y = -1 \quad (15.8)$$

(ii) 比較のため、ヤコビアンを使わずに  $z$  の微分  $dz = \left( \frac{\partial z}{\partial x} \right)_y dx + \left( \frac{\partial z}{\partial y} \right)_x dy$  を用いて、(15.8) を導いてみよ。

### 15.3 計算の処方箋

準備が整ったので、ひとつの熱力学量を、もっと測りやすい量の組み合わせで表すための処方箋を紹介しよう。

まず、結果をどんな熱力学量 (の組) で表したいかを決める。通常は、実験で測りやすく、物性値表などに載っている量で表したいことが多い。例えば、13.2 節で紹介した定圧モル比熱

$$c_P = \frac{T}{N} \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{P, N} \quad (15.9)$$

や、気体の膨張係数

$$\alpha \equiv \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P, N} \quad (15.10)$$

である。 $\alpha$  の物理的意味は、「読んで式のごとし」で、圧力一定のまま温度をあげたときに体積が増す割合 (温度を 1 K あげたときの体積の増し高と、もとの体積の比) である。

元の熱力学量を、これらの量に還元できる偏微分係数で表すように、式変形していけばよい。そのためには、以下の処方箋を用いればよい。

- a) 独立変数 (つまり偏微分する変数やその際に固定したい変数) を変更するにはヤコビアンを使う。独立変数を変更するといっても、ルジャンドル変換を実行せよ、というわけではなく (たとえ実際にはそれと同じになっていたとしても) そういうことを気にせずに機械的に計算しよう、というわけだ。

たとえば、独立変数を  $(S, P, N)$  から  $(T, P, N)$  に変更するには<sup>4)</sup>、次のようにすればよい：

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial T}{\partial P} \right)_{S, N} &= \frac{\partial(T, S)}{\partial(P, S)} \quad \text{の独立変数を } T, P \text{ にしたいので (15.5) を用いて} \\ &= \frac{\partial(T, S)}{\partial(T, P)} \frac{\partial(T, P)}{\partial(P, S)} \quad \text{に (15.2), (15.3) を用いて} \\ &= - \left( \frac{\partial S}{\partial P} \right)_{T, N} / \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{P, N}. \end{aligned} \quad (15.11)$$

<sup>4)</sup>12.5 節で説明したように、示強変数の全てを独立変数に採るのは不可能なので、示量変数  $N$  は残しておいた。

なお、この式を見ても分かるように、当然ではあるが、ずっと固定しておく変数（この場合は  $N$ ）は、省略して構わない。以後、しばしば、その種の省略を行う。

- b) 示量変数  $X_i$  を示強変数  $P_k$  で偏微分した  $\partial X_i / \partial P_k$  を、他の示量変数  $X_j$  を同じ示強変数  $P_k$  で偏微分した  $\partial X_j / \partial P_k$  に置き換えるには、元の示量変数  $X_i$  の微分  $dX_i$  の表式を使う。

例えば  $X_i = U, P_k = T$  なら、式 (6.19)  $dU = TdS - PdV + \mu dN$  を使う。この式は、どんな  $dS, dV, dN$  の値についても成り立つから、 $S, V, N$  のいずれかとは限らない何かの量  $\Xi$ （複数の量の組でもよい）を一定に保つ、という条件を課しても成り立つ。その条件下で  $dT$  で割算すれば、

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\Xi} = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\Xi} - P \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{\Xi} + \mu \left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_{\Xi} \quad (15.12)$$

を得るので、 $\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\Xi}$  を右辺の量で表せる、というわけだ。

- c) 示強変数  $P_i$  を示量変数  $X_k$  で偏微分した  $\partial P_i / \partial X_k$  を、他の示強変数  $P_j$  を同じ示量変数  $X_k$  で偏微分した  $\partial P_j / \partial X_k$  に置き換えるには、ギブズ-デュエム関係式 (12.56) を使う。

例えば  $P_i = \mu, P_k = N$  なら、ギブズ-デュエム関係式 (12.57) である  $SdT - VdP + Nd\mu = 0$  を、何かの量  $\Xi$ （複数の量の組でもよい）を一定に保つという条件下で、 $dN$  で割算すれば、

$$N \left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{\Xi} = V \left(\frac{\partial P}{\partial N}\right)_{\Xi} - S \left(\frac{\partial T}{\partial N}\right)_{\Xi} \quad (15.13)$$

を得るので、 $\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{\Xi}$  を右辺の量で表せる、というわけだ。

- d) 偏微分する変数もされる変数もそっくり置き換えるには、マクスウェルの関係式を使う。

たとえば、式 (12.64)-(12.67) を用いれば、偏微分する変数もされる変数もそっくり置き換えることができる。12.7 節で説明したように、他にもいろいろな形のマクスウェルの関係式が導けるので、目的に応じて選んで使えばよい。

もちろん、この処方箋では対応しきれない場合もあるだろうが、その場合には、あとひと工夫を各自ですればよい。

## 15.4 応用例

上で述べた処方箋は、実例で納得するのが手っ取り早いから、実例をいくつか紹介しよう。

### 15.4.1 断熱容器に入れた物質に圧力を加えたときの温度変化

物質を断熱容器に入れ、ゆっくり（準静的に）圧力を加えていったら、物質の温度はどれくらい変わるだろうか？ その変化率は、 $\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_{S,N}$  で与えられる。準静的断熱過程だから  $S$  が一定、物質の出入りが無いから  $N$  も一定、という条件で偏微分している。

この量を、定圧モル比熱  $c_P$  や膨張係数  $\alpha$  という、物性値表などに載っている量で表すことにより、具体的な値を計算したいとする。それには次のようにすればよい。式を見やすくするために、変数  $N$  は略す。独立変数を  $T, P$  にしたいので、まず、ヤコビアンを使って式 (15.11) の変形をする。続いて、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_S &= -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T / \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P \quad \text{に (15.9) を用いて} \\ &= -\frac{T}{Nc_P} \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T \quad \text{にマクスウェルの関係式 (12.67) を用いて} \\ &= \frac{T}{Nc_P} \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \quad \text{に膨張係数の定義 (15.10) を用いて} \\ &= \frac{T\alpha}{c_P} \cdot \frac{V}{N} \quad \text{で目的達成！} \end{aligned} \quad (15.14)$$



最後の式で  $V/N$  をまとめたのは，左辺が物質量に依らない量だから，右辺もそういう量の組み合わせで表した方がきれいだからである。

この導出過程で，たとえばマクスウェルの関係式のような，熱力学なくしては想像すらできない関係式を用いたことに注意して欲しい。さらに，求めたかった量を，まったく別の実験で得られる量（この例では  $c_P$  や  $\alpha$ ）で表す事ができてしまうので，元の量を測る実験をしなくても値が分かってしまう。この結果が実際に全ての物質について成り立つという実験事実が，熱力学の強大さを如実に物語っている。

Application to 液体

定常, かつ 平衡.

$V, N = \text{一定}$

$$dG = -SdT - Md\mu$$

$$\rightarrow \left(\frac{\partial A}{\partial \mu}\right)_T = \left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_\mu$$

$$\chi_s \equiv \left(\frac{\partial m}{\partial \mu}\right)_A = \frac{\partial(m, A)}{\partial(\mu, A)}$$

$$= \frac{\partial(m, A)}{\partial(T, \mu)} \bigg/ \frac{\partial(\mu, A)}{\partial(T, \mu)}$$

$$= - \left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_\mu \equiv \frac{C_h}{T}$$

$$= - \frac{T}{C_h} \begin{vmatrix} \frac{\partial m}{\partial T} & \frac{\partial m}{\partial \mu} \\ \frac{\partial A}{\partial T} & \frac{\partial A}{\partial \mu} \end{vmatrix}$$

$$= - \frac{T}{C_h} \left[ \underbrace{\left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_\mu}_{\equiv \left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_\mu} \underbrace{\left(\frac{\partial A}{\partial \mu}\right)_T}_{\equiv \chi_T} - \underbrace{\left(\frac{\partial m}{\partial \mu}\right)_T}_{\equiv \chi_s} \underbrace{\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_\mu}_{\equiv \frac{C_h}{T}} \right]$$

$$= \frac{T}{C_h} \left[ \frac{C_h}{T} \chi_T - \left[\left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_\mu\right]^2 \right]$$

$$= \chi_T - \frac{T}{C_h} \left[\left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_\mu\right]^2 < \chi_T$$

§ 詳しい内容

# Anomalous Behavior of Magnetic Susceptibility Obtained by Quench Experiments in Isolated Quantum Systems

*Komaba Institute for Science, The University of Tokyo<sup>A</sup>  
Department of Basic Science, The University of Tokyo<sup>A</sup>  
Center for Education in Liberal Arts and Sciences, Osaka  
University<sup>B</sup>*

Yuuya Chiba<sup>A</sup>, Kenichi Asano<sup>B</sup>, Akira Shimizu<sup>A</sup>

2020/Apr/22

# Table of contents

Introduction : Review and our problem

Setup : Definitions of susceptibilities

Main results

(i)  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

(ii)-(iv)  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$ , etc.

Conclusion

# Table of contents

Introduction : Review and our problem

Setup : Definitions of susceptibilities

Main results

(i)  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

(ii)-(iv)  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$ , etc.

Conclusion

# Thermalization

- In **quantum mechanics**,

$$|\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$$

- Assumption in **thermodynamics** :

In (macroscopically) isolated systems,

any non-equilibrium state  $\rightarrow$  equilibrium state

# Thermalization

- In **quantum mechanics**,

$$|\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$$

- Assumption in **thermodynamics** :

In (macroscopically) isolated systems,

any non-equilibrium state  $\rightarrow$  equilibrium state

↑ Consistent?

# Thermalization

- In **quantum mechanics**,

$$|\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$$

- Assumption in **thermodynamics** :

In (macroscopically) isolated systems,

any non-equilibrium state  $\rightarrow$  equilibrium state

↑ Consistent?

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \simeq \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} \text{ after sufficiently large } t?$$

$\hat{A}$  : macroscopic observable

$\langle \bullet \rangle_{\text{eq}}$  : expectation in equilibrium state



# Thermalization

- In **quantum mechanics**,

$$|\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$$

- Assumption in **thermodynamics** :

In (macroscopically) isolated systems,

any non-equilibrium state  $\rightarrow$  equilibrium state

↑ Consistent?

$$\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \simeq \langle \hat{A} \rangle_{\text{eq}} \text{ after sufficiently large } t?$$

$\hat{A}$  : macroscopic observable

$\langle \bullet \rangle_{\text{eq}}$  : expectation in equilibrium state

$\Rightarrow$  Depends on the property of **eigenstates of  $\hat{H}$**

cf. Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH)

# Realization of isolated quantum systems

## Ultracold atoms and molecules in optical lattices

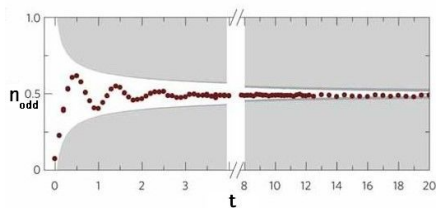
- ▶ various model systems
- ▶ various lattice geometry
- ▶ tunable physical parameters
- ▶ **isolated** over a reasonably long period

# Realization of isolated quantum systems

Ultracold atoms and molecules in optical lattices

- ▶ various model systems
- ▶ various lattice geometry
- ▶ tunable physical parameters
- ▶ **isolated** over a reasonably long period

⇒ direct observation of the Schrödinger dynamics  
after **quench** (sudden change of a physical parameter)



(S.Trotzky et al., 2012)

# In this talk,

**Susceptibility** obtained by **quench** experiment,  $\chi^{\text{qch}}$   
(quantum mechanics)

## In this talk,

**Susceptibility** obtained by **quench** experiment,  $\chi^{\text{qch}}$   
(quantum mechanics)  
= thermodynamic susceptibility?

## In this talk,

**Susceptibility** obtained by **quench** experiment,  $\chi^{\text{qch}}$   
(quantum mechanics)  
= thermodynamic susceptibility?

{ **isothermal** susceptibility,  $\chi^T$   
**adiabatic** susceptibility,  $\chi^S$

Which should be compared with  $\chi^{\text{qch}}$ ?

## In this talk,

**Susceptibility** obtained by **quench** experiment,  $\chi^{\text{qch}}$   
(quantum mechanics)  
= thermodynamic susceptibility?

$\left\{ \begin{array}{l} \text{isothermal susceptibility, } \chi^T \\ \text{adiabatic susceptibility, } \chi^S \end{array} \right.$

Which should be compared with  $\chi^{\text{qch}}$ ?

**Wavenumber  $k$**  dependence of susceptibilities  
 $\Rightarrow$  reveals an interesting behavior!

$$\chi^{\text{qch}}, \chi^T, \chi^S \rightarrow \chi^{\text{qch}}(\mathbf{k}), \chi^T(\mathbf{k}), \chi^S(\mathbf{k})$$

## Anomalous behavior of $\chi^{\text{qch}}(\mathbf{k})$

If the dynamics of the system is complicated enough,

- ▶  $\chi^{\text{qch}}(\mathbf{k})$  is discontinuous at  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi^{\text{qch}}(\mathbf{k}) \neq \chi^{\text{qch}}(\mathbf{0})$$



## Anomalous behavior of $\chi^{\text{qch}}(\mathbf{k})$

If the dynamics of the system is complicated enough,

- ▶  $\chi^{\text{qch}}(\mathbf{k})$  is discontinuous at  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi^{\text{qch}}(\mathbf{k}) \neq \chi^{\text{qch}}(\mathbf{0})$$

Each value gives each thermodynamic susceptibility :

- ▶  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :

$$\chi^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi^{\text{S}}(\mathbf{0})$$

- ▶  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$  :

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi^{\text{T}}(\mathbf{0})$$

⇒ Both  $\chi^{\text{S}}(\mathbf{0})$  and  $\chi^{\text{T}}(\mathbf{0})$  are obtained!

# Table of contents

Introduction : Review and our problem

Setup : Definitions of susceptibilities

Main results

(i)  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

(ii)-(iv)  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$ , etc.

Conclusion

## Quench susceptibility(1/3)

$N = L^d$  spins on a  $d$ -dimensional cubic lattice

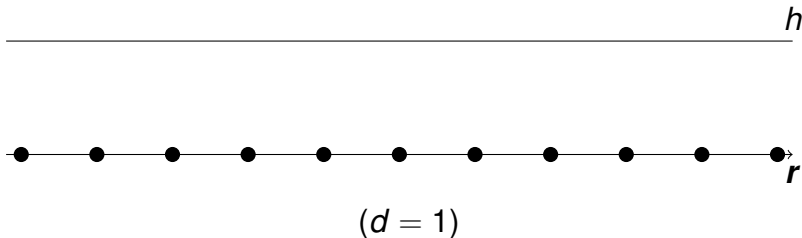
• pre-quench :  $t < 0$

**uniform** ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) offset magnetic field  $h$

$$(\Rightarrow \chi^S(\mathbf{0}) < \chi^T(\mathbf{0}))$$

Hamiltonian  $\hat{H}(h)$  : **translation invariant** (PBC)

state : **equilibrium** state  $\hat{\rho}_{\text{ini}} \propto e^{-\beta \hat{H}(h)}$



## Quench susceptibility(2/3)

- quench :  $t = 0$   
additional magnetic field  $\Delta h(\mathbf{r})$  (parallel to  $h$ ),  
with **wavenumber  $k$** , small magnitude  $\Delta h_k$
- post-quench :  $t > 0$   
Hamiltonian  $\hat{H}_{\text{post}} = \hat{H}(h) - \sum_r \hat{\sigma}_r^z \Delta h(\mathbf{r})$   
 $\hat{\rho}(t)$  obeys the **Schrödinger dynamics** of  $\hat{H}_{\text{post}}$



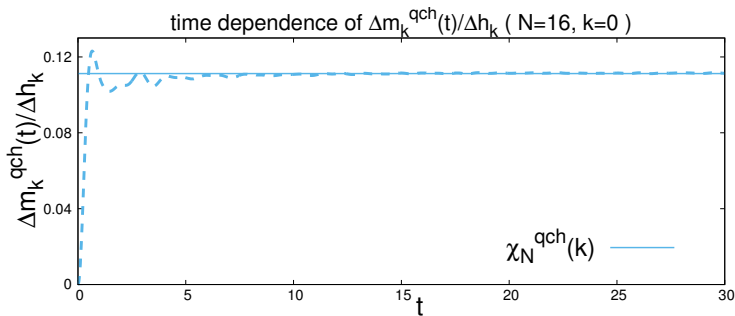
$$(d = 1, k = \pi)$$

# Quench susceptibility(3/3)

## Quench susceptibility

$$\chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{k}) := \text{time average of } \lim_{\Delta h_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}(t)\hat{m}_{\mathbf{k}}] - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}}\hat{m}_{\mathbf{k}}]}{\Delta h_{\mathbf{k}}}$$

$$(\text{magnetization } \hat{m}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{N} \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}^z)$$



# Thermodynamic susceptibilities(1/2)

Isothermal susceptibility

$\hat{\rho}_{\text{fin}}^T \propto e^{-\beta \hat{H}_{\text{post}}}$  has the same **temperature** as the initial one

$$\chi_N^T(\mathbf{k}) := \lim_{\Delta h_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{fin}}^T \hat{m}_{\mathbf{k}}] - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{m}_{\mathbf{k}}]}{\Delta h_{\mathbf{k}}}$$

cf. Isothermal quasistatic process

# Thermodynamic susceptibilities(1/2)

Isothermal susceptibility

$\hat{\rho}_{\text{fin}}^T \propto e^{-\beta \hat{H}_{\text{post}}}$  has the same **temperature** as the initial one

$$\chi_N^T(\mathbf{k}) := \lim_{\Delta h_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{fin}}^T \hat{m}_{\mathbf{k}}] - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{m}_{\mathbf{k}}]}{\Delta h_{\mathbf{k}}}$$

cf. Isothermal quasistatic process

Adiabatic susceptibility

$\hat{\rho}_{\text{fin}}^S$  has the same **entropy** as the initial one

(temperature of  $\hat{\rho}_{\text{fin}}^S$  is tuned)

$$\chi_N^S(\mathbf{k}) := \lim_{\Delta h_{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{fin}}^S \hat{m}_{\mathbf{k}}] - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{m}_{\mathbf{k}}]}{\Delta h_{\mathbf{k}}}$$

cf. Adiabatic quasistatic process

# Thermodynamic susceptibilities(2/2)

Thermodynamic relation

$$\chi_N^S(\mathbf{0}) = \chi_N^T(\mathbf{0}) - \frac{T}{C_h} \left| \left( \frac{\partial m_0}{\partial T} \right)_h \right|^2$$



## Thermodynamic susceptibilities(2/2)

Thermodynamic relation

$$\chi_N^S(\mathbf{0}) = \chi_N^T(\mathbf{0}) - \frac{T}{c_h} \left| \left( \frac{\partial m_0}{\partial T} \right)_h \right|^2$$

- exclude phase transition points  $\Rightarrow$  specific heat  $c_h < \infty$
- $h \neq 0 \Rightarrow (\partial m_0 / \partial T)_h \neq 0$

$$\therefore \chi_\infty^S(\mathbf{0}) < \chi_\infty^T(\mathbf{0})$$

Note  $\chi_\infty^\bullet(\mathbf{k}) := \lim_{N \rightarrow \infty} \chi_N^\bullet(\mathbf{k})$

# Table of contents

Introduction : Review and our problem

Setup : Definitions of susceptibilities

## Main results

(i)  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

(ii)-(iv)  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$ , etc.

Conclusion

# Main results

- (i)  $c1 \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0}) (< \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0}))$   
 ordinary weak ETH  $< c1 <$  ordinary strong ETH
- (ii)  $c2 \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$   
 $c2 <$  ordinary off-diagonal ETH
- (iii)  $c3 \Rightarrow \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  is continuous  
 $c3$  should be satisfied in normal systems
- (iv) From (ii) and (iii),  
 $c2, c3 \Rightarrow \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$
- $\Rightarrow$  If the system is complicated enough,  
 $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k})$  is **discontinuous** at  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$   
 both  $\chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$  and  $\chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$  can be obtained from  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k})$

# Table of contents

Introduction : Review and our problem

Setup : Definitions of susceptibilities

Main results

(i)  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

(ii)-(iv)  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$ , etc.

Conclusion

## Result (i)

(i)                      condition 1  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

ordinary weak ETH  $< c1 <$  ordinary strong ETH

## Result (i)

- (i) condition 1  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$   
ordinary weak ETH  $< c_1 <$  ordinary strong ETH

weak ETH : holds even in integrable systems

[Biroli et. al. (2010), Iyoda et. al. (2017)]

strong ETH : holds if the system is complicated enough,  
fails in integrable systems [Rigol et. al. (2008)]

$\Rightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$  holds if the system is complicated enough

Q : How is it observed in experiment? ( $N < \infty$ )

Q : Does it hold or fail in integrable systems?

# Numerical demonstrations

models : 1D XYZ, XXZ, XY spin models (ring)

$$\hat{H}(h) = - \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{\alpha} \hat{\sigma}_j^{\alpha} \hat{\sigma}_{j+1}^{\alpha} - \sum_{j=1}^N h \hat{\sigma}_j^z, \quad (\hat{\sigma}_{N+1}^{\alpha} = \hat{\sigma}_1^{\alpha})$$

$h = 0.8, J_x + J_y = 0.6, \beta = 0.15$  are fixed

- (a) XYZ :  $J_x - J_y = 1.2, J_z = 1.0$ , complicated (non-integrable)
- (b) XXZ :  $J_x - J_y = 0, J_z = 1.0$ , integrable
- (c) XY :  $J_x - J_y = 1.2, J_z = 0$ , integrable

# Numerical demonstrations

models : 1D XYZ, XXZ, XY spin models (ring)

$$\hat{H}(h) = - \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{\alpha} \hat{\sigma}_j^{\alpha} \hat{\sigma}_{j+1}^{\alpha} - \sum_{j=1}^N h \hat{\sigma}_j^z, \quad (\hat{\sigma}_{N+1}^{\alpha} = \hat{\sigma}_1^{\alpha})$$

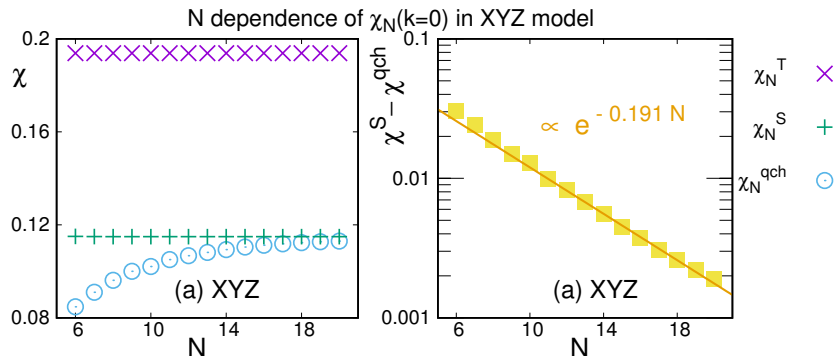
$h = 0.8, J_x + J_y = 0.6, \beta = 0.15$  are fixed

- (a) XYZ :  $J_x - J_y = 1.2, J_z = 1.0$ , complicated (non-integrable)
  - (b) XXZ :  $J_x - J_y = 0, J_z = 1.0$ , integrable
  - (c) XY :  $J_x - J_y = 1.2, J_z = 0$ , integrable
- ▶ In (a), how is  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$  observed in **experiments**? ( $N < \infty$ )
  - ▶ In (b) and (c), is it violated? If so, how?



# Demonstration of (i) / complicated system

(a) XYZ model :

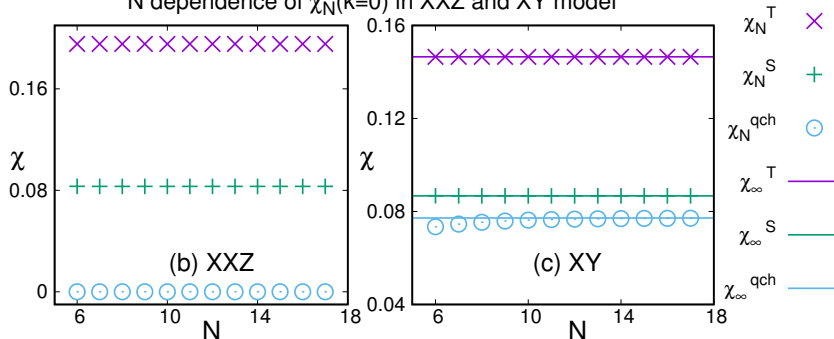


$\chi_N^S(\mathbf{0}) - \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{0})$  approaches 0 as  $N$  is increased  
 $\Rightarrow$  Indeed  $\chi_\infty^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_\infty^S(\mathbf{0})$  holds

# Demonstration of (i) / integrable systems

(b) XXZ model, (c) XY model :

N dependence of  $\chi_N(k=0)$  in XXZ and XY model



$\chi_N^{qch}(\mathbf{0})$  does not coincide with  $\chi_N^S(\mathbf{0})$  even in  $N \rightarrow \infty$

$\Rightarrow \chi_\infty^{qch}(\mathbf{0}) = \chi_\infty^S(\mathbf{0})$  fails!

# Table of contents

Introduction : Review and our problem

Setup : Definitions of susceptibilities

Main results

(i)  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  :  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

(ii)-(iv)  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$  :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$ , etc.

Conclusion

## Result (ii)

(ii) condition 2  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

c2 < ordinary off-diagonal ETH

## Result (ii)

(ii) condition 2  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

c2 < ordinary off-diagonal ETH

off-diagonal ETH : holds if the system is complicated enough, fails in integrable systems  
[D'Alessio et. al. (2016)]

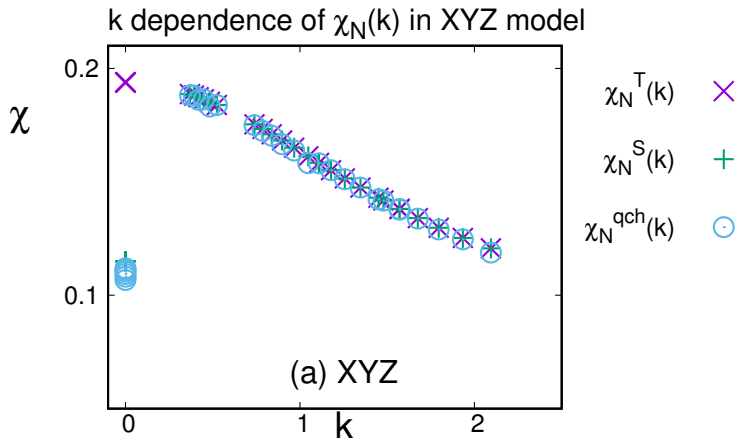
$\Rightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  holds for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$   
if the system is complicated enough

Q : How is it observed in experiment? ( $N < \infty$ )

Q : Does it hold or fail in integrable systems?

# Demonstration of (ii) / complicated system

(a) XYZ model :

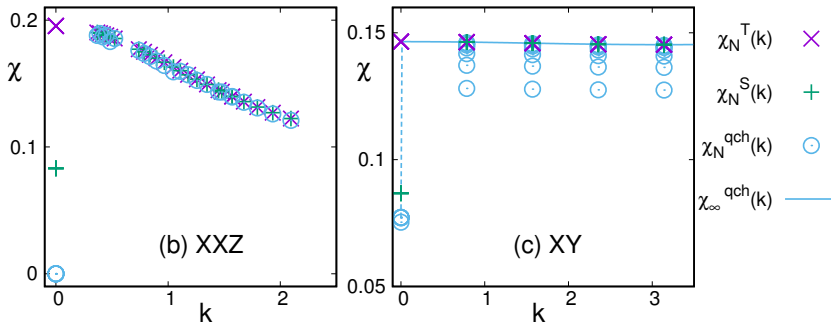


Indeed  $\chi_\infty^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_\infty^S(\mathbf{k}) = \chi_\infty^T(\mathbf{k})$  holds for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

# Demonstration of (ii) / integrable systems

(b) XXZ model, (c) XY model :

k dependence of  $\chi_N(k)$  in XXZ and XY model



Both integrable models also satisfy

$$\chi_\infty^{qch}(\mathbf{k}) = \chi_\infty^S(\mathbf{k}) = \chi_\infty^T(\mathbf{k}) \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}!$$

## Results (iii) and (iv)

(ii) condition 2  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$   
 c2 < ordinary off-diagonal ETH

(iii) c3  $\Rightarrow \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  is continuous

c3 should be satisfied in normal systems

(iv) From (ii) and (iii),

$$\text{c2, c3} \Rightarrow \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$$

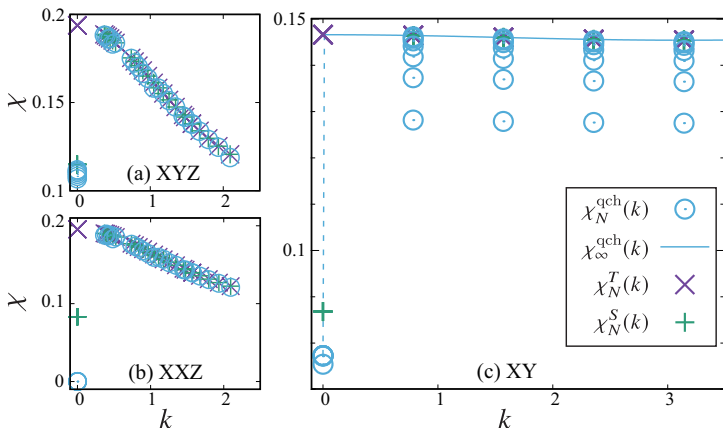
$\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k})$  is discontinuous at  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ !

Q : How should such an **anomalous behavior** be observed in experiment? ( $N < \infty$ )



# Demonstration of (iii) and (iv)

(a) XYZ model, (b) XXZ model, (c) XY model :



Indeed (iii)  $\chi_\infty^T(\mathbf{k})$  is continuous, (iv)  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_\infty^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_\infty^T(\mathbf{0})$

# Conclusion

(i)  $\text{c1} \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0}) (< \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0}))$

ordinary weak ETH  $<$  c1  $<$  ordinary strong ETH

(ii)  $\text{c2} \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

c2  $<$  ordinary off-diagonal ETH

(iii)  $\text{c3} \Rightarrow \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  is continuous

c3 should be satisfied in normal systems

(iv)  $\text{c2, c3} \Rightarrow \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$

$\Rightarrow$  If the systems is complicated enough,

$\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k})$  is **discontinuous** at  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$

both  $\chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$  and  $\chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$  can be obtained from  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k})$

- ▶ Experimental verification of the behaviors of  $\chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k})$ , including deviation from them, is feasible!

## Condition 1 (1/2)

(i) condition 1  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

ordinary weak ETH < c1 < ordinary strong ETH

## Condition 1 (1/2)

(i) condition 1  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

ordinary weak ETH  $< \text{c1} < \text{ordinary strong ETH}$

$$\hat{m}_{\mathbf{k}}^0 := \text{time average of } e^{i\hat{H}(h)t} \hat{m}_{\mathbf{k}} e^{-i\hat{H}(h)t}$$

$|\nu\rangle$  : simultaneous eigenstate of  $\hat{H}(h)$  and  $\hat{m}_{\mathbf{k}=0}^0$

$$E_{\nu} : \text{eigenenergy, } \delta E_{\nu} := E_{\nu} - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{H}(h)]$$

$$\delta \hat{m}_{\mathbf{k}} := \hat{m}_{\mathbf{k}} - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{m}_{\mathbf{k}}]$$

## Condition 1 (1/2)

(i) condition 1  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

ordinary weak ETH  $< \text{c1} < \text{ordinary strong ETH}$

$$\hat{m}_{\mathbf{k}}^0 := \text{time average of } e^{i\hat{H}(h)t} \hat{m}_{\mathbf{k}} e^{-i\hat{H}(h)t}$$

$|\nu\rangle$  : simultaneous eigenstate of  $\hat{H}(h)$  and  $\hat{m}_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^0$

$$E_{\nu} : \text{eigenenergy, } \delta E_{\nu} := E_{\nu} - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{H}(h)]$$

$$\delta \hat{m}_{\mathbf{k}} := \hat{m}_{\mathbf{k}} - \text{Tr}[\hat{\rho}_{\text{ini}} \hat{m}_{\mathbf{k}}]$$

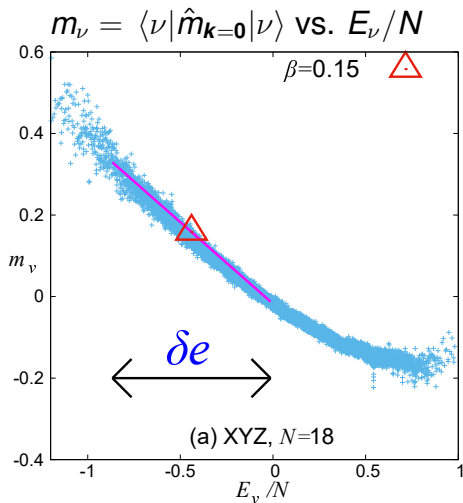
c1 : For almost all  $|\nu\rangle$  in a narrow energy region

$$|\delta E_{\nu}|/N \lesssim T \sqrt{c_h/N} (=:\delta e),$$

$$\langle \nu | \delta \hat{m}_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} | \nu \rangle = C \delta E_{\nu}/N + o(1/\sqrt{N}),$$

where  $C = \mathcal{O}(1)$  is some constant independent of  $\nu$ .

# Condition 1 (2/2)



## Condition 2

- (ii)  $c2 \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^S(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^T(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$   
 $c2 <$  ordinary off-diagonal ETH

## Condition 2

(ii)  $\mathbf{c2} \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

$\mathbf{c2} <$  ordinary off-diagonal ETH

$|\nu\rangle$  : simultaneous eigenstate of  $\hat{H}(h)$

and translation operators

$E_{\nu}$  : eigenenergy,  $\mathbf{K}_{\nu}$  : crystal momentum



## Condition 2

(ii)  $\text{c2} \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

$\text{c2} < \text{ordinary off-diagonal ETH}$

$|\nu\rangle$  : simultaneous eigenstate of  $\hat{H}(h)$

and translation operators

$E_{\nu}$  : eigenenergy,  $\mathbf{K}_{\nu}$  : crystal momentum

$\text{c2}$  : For almost all  $|\nu\rangle$  in a narrow energy region

$$|\delta E_{\nu}| \lesssim T\sqrt{c_h N},$$

$$\sum_{\nu'} \delta_{E_{\nu}, E_{\nu'}} \delta_{\mathbf{K}_{\nu}, \mathbf{K}_{\nu'} + \mathbf{k}} |\langle \nu' | \hat{m}_{\mathbf{k}} | \nu \rangle|^2 = o(1/N) \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}$$

$$E_{\nu} = E_{\nu'}, \quad \mathbf{K}_{\nu} = \mathbf{K}_{\nu'} + \mathbf{k}$$

## Condition 3

(iii)  $c3 \Rightarrow \chi_{\infty}^T(\mathbf{k})$  is continuous

c3 : Let  $\Omega_N$  be the lattice of the system

$\phi_N^T(\mathbf{r}) = \beta \langle \delta \hat{\sigma}_{\mathbf{0}}^z; \delta \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}^z \rangle$  : canonical correlation

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} |\phi_{\infty}^T(\mathbf{r})| < \infty \quad (1)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} |\phi_N^T(\mathbf{r}) - \phi_{\infty}^T(\mathbf{r})| = 0 \quad (2)$$

## Condition 3

(iii) c3  $\Rightarrow \chi_{\infty}^T(\mathbf{k})$  is continuous

c3 : Let  $\Omega_N$  be the lattice of the system

$\phi_N^T(\mathbf{r}) = \beta \langle \delta \hat{\sigma}_{\mathbf{0}}^z; \delta \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}^z \rangle$  : canonical correlation

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} |\phi_{\infty}^T(\mathbf{r})| < \infty \quad (1)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} |\phi_N^T(\mathbf{r}) - \phi_{\infty}^T(\mathbf{r})| = 0 \quad (2)$$

- ▶ Eq. (1) will be satisfied except at phase transition points
- ▶ Eq. (2) is plausible since canonical ensemble well emulates a subsystem in an infinite system  
 $\Rightarrow$  c3 should be satisfied in normal systems

# Outline of proof of (i)

(i) condition 1  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$

$$\chi_N^{\text{S}}(\mathbf{0}) - \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \beta N \left( \langle \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0; \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle - \frac{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle^2}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} \right) \geq 0,$$

where  $\langle \bullet; \bullet \rangle$  is canonical correlation (a kind of **inner product**).

# Outline of proof of (i)

$$(i) \quad \text{condition 1} \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$$

$$\chi_N^{\text{S}}(\mathbf{0}) - \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \beta N \left( \langle \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0; \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle - \frac{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle^2}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} \right) \geq 0,$$

where  $\langle \bullet; \bullet \rangle$  is canonical correlation (a kind of **inner product**).

From the property of Cauchy-Schwarz inequality,

$$\chi_N^{\text{S}}(\mathbf{0}) = \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{0}) \Leftrightarrow \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 = \frac{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} \delta \hat{H}(h) =: C \delta \hat{H}(h) / N.$$

## Outline of proof of (i)

$$(i) \quad \text{condition 1} \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{0})$$

$$\chi_{\text{N}}^{\text{S}}(\mathbf{0}) - \chi_{\text{N}}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) = \beta N \left( \langle \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0; \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle - \frac{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle^2}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} \right) \geq 0,$$

where  $\langle \bullet; \bullet \rangle$  is canonical correlation (a kind of **inner product**).

From the property of Cauchy-Schwarz inequality,

$$\chi_{\text{N}}^{\text{S}}(\mathbf{0}) = \chi_{\text{N}}^{\text{qch}}(\mathbf{0}) \Leftrightarrow \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 = \frac{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 \rangle}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} \delta \hat{H}(h) =: C \delta \hat{H}(h) / N.$$

By applying  $|\nu\rangle$  from the left and the right,

$$\langle \nu | \delta \hat{m}_{\mathbf{0}}^0 | \nu \rangle = \langle \nu | \delta \hat{m}_{\mathbf{0}} | \nu \rangle = C \delta E_{\nu} / N.$$

In the thermodynamic limit  $N \rightarrow \infty$ , this condition is relaxed as c1.

## Outline of proof of (ii)

(ii) c2  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

c2 : For almost all  $|\nu\rangle$  in a narrow energy region

$$|\delta E_{\nu}| \lesssim T\sqrt{c_h N},$$

$$\sum_{\nu'} \delta_{E_{\nu}, E_{\nu'}} \delta_{\mathbf{k}_{\nu}, \mathbf{k}_{\nu'} + \mathbf{k}} |\langle \nu' | \hat{m}_{\mathbf{k}} | \nu \rangle|^2 = o(1/N) \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}$$

Since  $\hat{H}(h)$  is translation invariant,

$$\chi_N^{\text{T}}(\mathbf{k}) - \chi_N^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \beta N \frac{|\langle \delta \hat{H}(h); \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle|^2}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} = 0 \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}.$$

## Outline of proof of (ii)

(ii) c2  $\Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

c2 : For almost all  $|\nu\rangle$  in a narrow energy region

$$|\delta E_{\nu}| \lesssim T\sqrt{c_h N},$$

$$\sum_{\nu'} \delta_{E_{\nu}, E_{\nu'}} \delta_{\mathbf{k}_{\nu}, \mathbf{k}_{\nu'} + \mathbf{k}} |\langle \nu' | \hat{m}_{\mathbf{k}} | \nu \rangle|^2 = o(1/N) \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}$$

Since  $\hat{H}(h)$  is translation invariant,

$$\chi_N^{\text{T}}(\mathbf{k}) - \chi_N^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \beta N \frac{|\langle \delta \hat{H}(h); \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle|^2}{\langle \delta \hat{H}(h); \delta \hat{H}(h) \rangle} = 0 \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}.$$

From  $\chi_N^{\text{S}}(\mathbf{k}) - \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \beta N \langle \hat{m}_{\mathbf{k}}^0; \hat{m}_{\mathbf{k}}^0 \rangle \geq 0$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ ,

$$\chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0}$$

$$\Leftrightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} N \langle \hat{m}_{\mathbf{k}}^0; \hat{m}_{\mathbf{k}}^0 \rangle = 0 \text{ for all } \mathbf{k} \neq \mathbf{0} \Leftrightarrow \text{c2}.$$



## Outline of proof of (iii)

(iii) **c3  $\Rightarrow \chi_{\infty}^T(\mathbf{k})$  is continuous**

$$\text{c3 : } \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} |\phi_{\infty}^T(\mathbf{r})| < \infty \quad (1)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} |\phi_N^T(\mathbf{r}) - \phi_{\infty}^T(\mathbf{r})| = 0 \quad (2)$$

From Eq. (1) and the property of Fourier transform,

$$\chi^{\text{inf}}(\mathbf{k}) := \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{\mathbf{r} \in \Omega_N} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \phi_{\infty}^T(\mathbf{r})$$

is a continuous function of  $\mathbf{k}$ .

From Eq. (2),  $\chi_{\infty}^T(\mathbf{k}) = \chi^{\text{inf}}(\mathbf{k})$  holds for all  $\mathbf{k}$ .

$\therefore \chi_{\infty}^T(\mathbf{k})$  is also continuous.

## Discussion on discontinuity(1/2)

(ii)  $c2 \Leftrightarrow \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  for all  $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$

(iii)  $c3 \Rightarrow \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k})$  is continuous

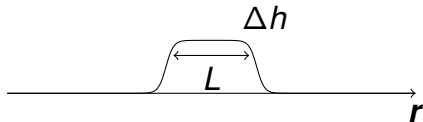
$$c2, c3 \Rightarrow \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) := \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})$$

Why  $\chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k})$  is discontinuous at  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ?

$$\text{Why } \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{S}}(\mathbf{k}) \neq \chi_{\infty}^{\text{T}}(\mathbf{0})?$$

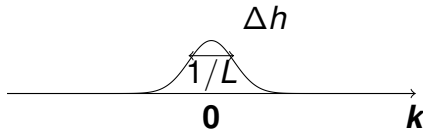
## Discussion on discontinuity(2/2)

Adiabatic quasistatic process (constant-entropy)



$$\Rightarrow \chi_N^T(\mathbf{0}) \text{ (Note } N = L^d)$$

↕ Fourier transform



$$\Rightarrow \chi_\infty^S(\mathbf{k}) \text{ with } |\mathbf{k}| \sim 1/L$$

$$\therefore \chi_\infty^S(\mathbf{k}) = \chi_N^T(\mathbf{0}) \text{ for } |\mathbf{k}| \sim 1/L$$

By taking  $L \rightarrow \infty$ ,

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_\infty^S(\mathbf{k}) = \chi_\infty^T(\mathbf{0})$$

## Relation to Kubo formula

$\chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon)$  is also defined assuming the Schrödinger dynamics [Kubo (1957)]

$\Delta h(\mathbf{r}, t)$ , with wavenumber  $\mathbf{k}$  and frequency  $\omega$ ,  
is applied gradually over a long time scale  $\sim 1/\varepsilon$

## Relation to Kubo formula

$\chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon)$  is also defined assuming the Schrödinger dynamics [Kubo (1957)]

$\Delta h(\mathbf{r}, t)$ , with wavenumber  $\mathbf{k}$  and frequency  $\omega$ ,  
is applied gradually over a long time scale  $\sim 1/\varepsilon$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, 0 + i\varepsilon) = \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{k}) \text{ for all } \mathbf{k} \text{ and } N \quad (3)$$

From Eq. (3) and result (iv),

c2, c3  $\Rightarrow$

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, 0 + i\varepsilon) = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^T(\mathbf{0}).$$

## Relation to Kubo formula

$\chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon)$  is also defined assuming the Schrödinger dynamics [Kubo (1957)]

$\Delta h(\mathbf{r}, t)$ , with wavenumber  $\mathbf{k}$  and frequency  $\omega$ ,  
is applied gradually over a long time scale  $\sim 1/\varepsilon$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, 0 + i\varepsilon) = \chi_N^{\text{qch}}(\mathbf{k}) \text{ for all } \mathbf{k} \text{ and } N \quad (3)$$

From Eq. (3) and result (iv),

c2, c3  $\Rightarrow$

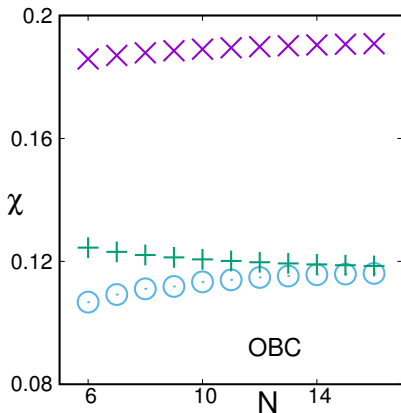
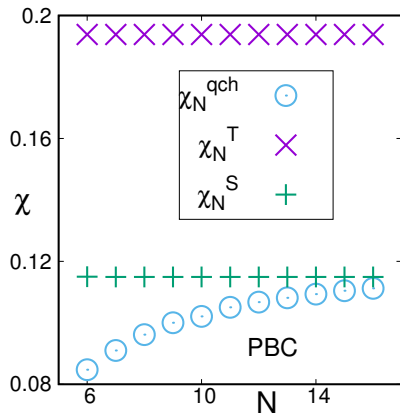
$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, 0 + i\varepsilon) = \lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \chi_{\infty}^{\text{qch}}(\mathbf{k}) = \chi_{\infty}^T(\mathbf{0}).$$

This suggests that c2 and c3 are also conditions for

conventional wisdom :  $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \lim_{N \rightarrow \infty} \chi_N^{\text{Kubo}}(\mathbf{k}, 0 + i\varepsilon) = \chi_{\infty}^T(\mathbf{0})$

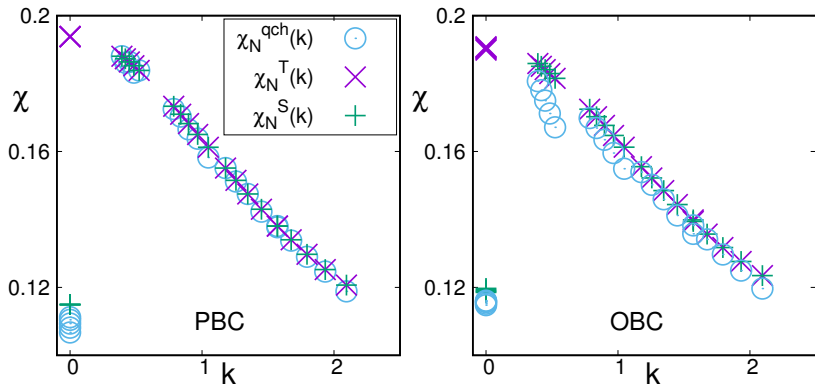
# PBC and OBC/ Result (i)

(a) XYZ model :



# PBC and OBC/ Result (ii)-(iv)

(a) XYZ model :





PBC : finite size effect is exponentially small [Iyer et. al. (2015)]