

杨李相变理论

陈童

February 9, 2026

Abstract

本文是一份关于杨李相变理论的讲义。我们将从对液气相变的介绍开始，系统讨论杨李相变理论的基本框架，搞清楚杨李相变理论如何在基本理论的层次上解决了液气相变的描述难题。同时，我们还会详细讨论并证明杨李的单位圆定理。

Contents

1 液气相变简介	2
2 统计物理和相变	5
3 杨李理论基础	8
3.1 杨李理论的基本框架	8
3.2 相变的物理图像	12
3.3 对相变的进一步刻画	13
4 伊辛模型与格气模型	17
5 单位圆定理	20
5.1 证明思路	20
5.2 物理讨论	22
6 参考文献	23

1 液气相变简介

水可以凝固成冰，也可以气化成水蒸气，气、水、冰本质都是由 H_2O 分子组成的物质，然而它们的物理性质截然不同。这种在环境变化无穷小时，物质的物理性质发生的不连续的改变，就是相变。气、水、冰就是宏观数量的 H_2O 分子的三种不同形态，或者说不同的相(phase)。这里值得注意的是，相变不是组成物质的分子的微观改变，也不是少量分子的改变，而是宏观数量的分子宏观物理性质的改变。

通常有不止一个变量可以影响物质的相。例如可以通过降低温度或者增加压强来使得蒸气凝结。我们使用相图来显示平衡相与温度和压强的关系(注意压强的单位， $1\text{bar} = 10^5\text{Pa}$, Pa表示帕斯卡，1bar大约就是一个标准大气压(atm), 实际上1atm约为1.01325bar)。

为了确定相图，19世纪人们就对气液相变进行了系统的研究。其中一种办法是将一定量的液体(如水、乙醚)封在容器中，缓慢加热，测定压力随温度的变化曲线。只要容器中同时存在液体和它的蒸气，气液两相就在共存，因此这样测得的 $P - T$ 曲线，就是气液的相界线，它也叫气化线。

如图(1)所示，如果保持压强为 P_0 ，由液相开始加热，状态将从图中的 L 点沿水平线向右移动，与气化线交于 Q 点，一部分液体开始气化，这时尽管在继续加热，温度却不会升高，一直保持在 Q 点的 T_0 值，加热的热量全部被吸收来用于气化了。这种在相变时才表现出来的气化热，是一种相变潜热。日常生活中，手上沾了水会有清凉感，就是因为水气化时从手里吸收了潜热。

液体全部气化之后，温度才继续沿着图中的 QG 线继续升高。值得注意的是，沿着 LQG 线做实验，为了保持压强不变，要不断改变系统的体积，因此这样的实验不能用前面提到的密封容器来做。

一个自然的问题是，气化线是会随着温度和压强的不断增加而无限延伸，还是会有一个截止的端点？1869年英国物理学家安德鲁斯作了一个题为“论物质液态和气态的连续性”的报告，明确地回答了这个问题。他精确地测量了二氧化碳在液态与气态时的密度差，发现在31摄氏度附近，两者的差别消失了！这意味着气液相界线有一个明确的终点，安德鲁斯称之为“临界点”。其他物理学家也观察到这个现象，发现在这个点，相变潜热等于零！

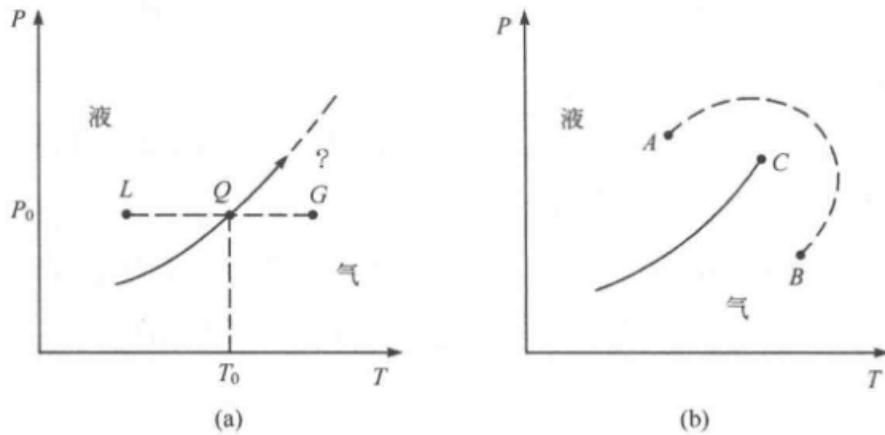


Figure 1: $P - T$ 相图上的气液相界线

这其实不难理解，关键是要注意到液气相界线总是有正的斜率，因此对于共存的液相和气相，如果要提高温度，就必须同时施加更高的压强，然而，随着压强的增加，气体将变得更加稠密，因此液体和气体之间的密度差会逐渐缩小，直至消失，也就是达到临界点。对于 H_2O ，这个临界点在 $T_c = 374$ 摄氏度、 $P_c = 221$ bar。在临界点上，就不再有任何不连续的从液相到气相的变化了。

由于临界点的存在，液相其实可以连续地变成气相，而不需要经过任何不连续的相变。方法是沿着图(1)b中所示的虚线变化温度和压强。

1873年，荷兰青年范德瓦尔斯利用当时刚刚发展起来的分子运动论观念，对液气相变提出了理论解释。他的论文题目与安德鲁斯的报告类似，也叫“论气态和液态的连续性”。

为了描写气液相变，范德瓦尔斯建议计入气体分子间的两种相互作用：第一，每个分子具有一定的体积 b （在小于 b 的范围之内，气体分子间会非常强烈地相互排斥），因此气体活动的有效体积缩小为 $V - Nb$ 。第二，气体分子间在较远的距离上有微弱的相互吸引力，相当于补充了一点“内压力”，使 P 增加到 $P + a(\frac{N}{V})^2$ 。这里“内压力”之所以能写成 $a(\frac{N}{V})^2$ ，是因为，首先它来自于分子之间的微弱吸引，既然是分子之间的，那就应该正比于 $N \times N = N^2$ 。其次，作为压强，“内压力”应该是强度量，所以就只能正比于 $(\frac{N}{V})^2$ 了。根据这些考虑，于是范德瓦尔斯把理想气体的物态方

程 $PV = Nk_B T$ 修改为

$$(P + a(\frac{N}{V})^2)(V - Nb) = Nk_B T. \quad (1)$$

我们可以在 $P - V$ 图上画出范德瓦尔斯方程的等温线，如图(2)所示。在足够高的温度下，减小体积会导致压强平稳地上升到无穷，同时体积逼近 Nb 。然而，在较低的温度下，等温线的行为要复杂得多，随着 V 的减小，等温线上升，下降，然后再次上升。似乎暗示着，对于某些状态来说，压缩液体会导致压强下降，即等温压缩系数 $\kappa_T \equiv -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial P}|_T < 0$ ，但是，热力学稳定性的考虑告诉我们， κ_T 一定是大于零的。这就说明，为了正确地描写液气相变，范德瓦尔斯方程还需要一些修正。

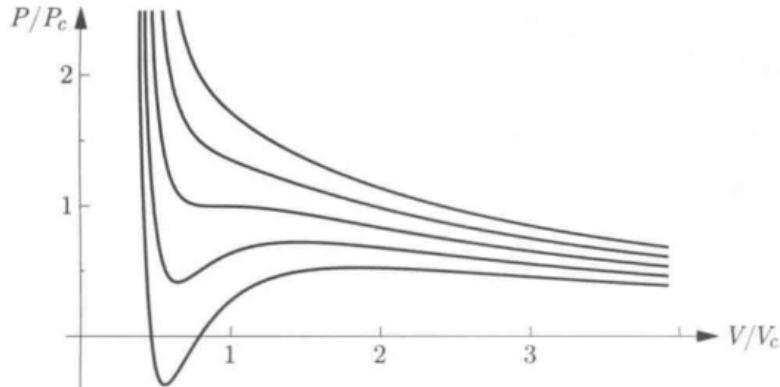


Figure 2: 范德瓦尔斯方程的等温线。

为了进行这样的修正，麦克斯韦提出了所谓的**麦克斯韦构造法**(细节我们这里不做讨论)。图(3)给出了在不同温度下重复麦克斯韦构造法得到的结果。对于每个温度，都有一个确定的压强(对应阴影部分的水平直线)，称为蒸气压，在该温度和压强下会发生液气转变，换言之，在一定的温度之下， $P - V$ 图上的等温曲线有一个平台区，它描写的就是液气两相共存的情况。这也符合实验，因为实验表明，两相共存时压强是确定的。平台区的左侧，随着体积的减小压强迅速增大，对应液相，平台区的右侧，体积减小导致的压强增加相对比较小，对应气相。

但是，范德瓦尔斯方程毕竟是一个唯象的理论，麦克斯韦构造法更是一个人为的东西。因此，一个自然的问题就是，能不能从一个基本理论出

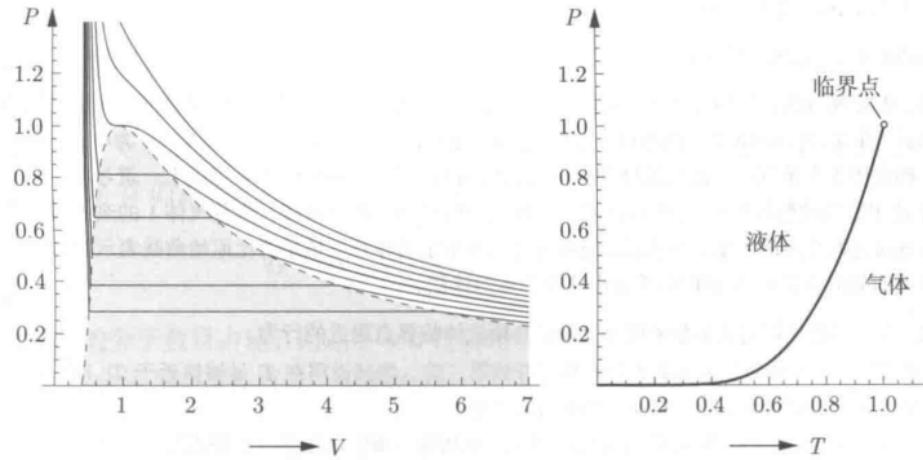


Figure 3: 范德瓦尔斯模型预测的相图。阴影部分的稳定态是两相共存。右图是相应 $P - T$ 图上的液气相界线。

发, 比如从统计物理出发, 得到能同时描写液气两相的物态方程呢? 比如推导出如图(3)那样的 $P - V$ 图等温曲线呢? 尤其是, 我们是通过人为的麦克斯韦构造法得到等温曲线上描写两相共存的平台区的, 能不能从一个基本理论出发, 自动得到这些平台区呢? 在很长时间之内, 这都是未解的难题, 杨振宁和李政道的相变理论正是解决了这个难题。

2 统计物理和相变

为了看清如何从微观的统计物理出发理解宏观的液气相变, 我们不妨将问题一般化为, 如何从统计物理出发理解相变。从热力学的角度来看, 所谓的相变, 就是当我们连续变化系统的控制参数(例如温度)时, 某些宏观物理量(比如比热、磁化率等等)表现出来的对控制参数的不连续依赖。根据热力学, 各种宏观物理量都可以从热力学势函数的偏导计算中得出, 因此, 相变就是某些热力学势函数偏导对控制参数的不连续性, 或者说, 非解析性。

但是根据统计物理, 热力学势函数正比于配分函数的对数, 而配分函数的计算就是以 $e^{-\beta H}$ (H 为系统哈密顿量) 为权重对系统位形进行求和。但

是，权重因子 $e^{-\beta H}$ 对控制参数都是解析依赖的。因此，如果这个位形求和只涉及有限项，那有限个解析函数的和必定依然是解析函数，那就必然不会有相变。因此，结论就是，一个有限系统从严格意义上来说是没有相变的。现实中的系统当然都是有限的，但是，它们也是宏观的，也就是涉及超过 10^{23} 量级的粒子数，同时系统的体积 V 也是宏观的。对于这样的宏观系统而言，我们可以近似认为其粒子数 $N \rightarrow \infty$ ，体积 $V \rightarrow \infty$ ，同时保持粒子数密度 $n = N/V$ 固定，这就是所谓的热力学极限。可以近似认为宏观系统是满足热力学极限的，而热力学极限下，位形求和就是一个无穷求和，无穷多个解析函数的和是有可能不解析的，换言之，在热力学极限下，相变可以发生。

但是，为了保证热力学极限的存在性，通常需要对粒子间的相互作用势能 $u(r)$ (r 是两粒子间距)进行一些假设：

- 第一，随着粒子间距大到一定程度， $u(r)$ 随着 r 的增加必须下降得足够快，通常来说要求随着 $r \rightarrow \infty$ ， $|u(r)| \leq C/r^{d+\epsilon}$ ，式中 $C > 0$ ， d 为空间维数， ϵ 为一个正常数。这种系统也就是所谓的短程相互作用的系统。之所以短程相互作用的系统才能保证热力学极限存在，是因为，有限系统必定有一个空间边界，边界条件可能影响系统体内的行为，如果相互作用是短程的，那么边界条件就只能影响边界附近薄薄的一层区域，对真正体内的影响可以忽略，从而在 $V \rightarrow \infty$ 的热力学极限下，整个边界都可以忽略。相反，如果相互作用是长程的，那边界条件的影响就可以穿透整个体内，那 $V \rightarrow \infty$ 下的行为将严重依赖边界条件，从而无法定义热力学极限。
- 第二，当粒子间距足够小时， $u(r)$ 必须有一个排斥势部分，它随着距离的减小势能迅速上升到无穷。这是为了防止整个系统坍缩到一个点上(那粒子数密度 n 就趋于无穷了)。这里我们不妨假设当 $r < r_0$ 时， $u(r) = \infty$ ，也就是说，每个粒子都有一个有限大的硬核。根据这个假设，给定一个有限的体积 V ，整个系统内能放下的粒子总数必定有一个上限，不妨记这个上限为 M 。在热力学极限之下， M/V 是固定的。
- 第三，无论粒子间距为多少，势能 $u(r)$ 都有下界！换言之， $u(r) \geq$

$-u_0$, 式中 u_0 是一个正常数。这一条是为了保证整个系统的总能量有下界, 因为否则系统是不可能稳定存在的。

杨李相变理论是以上面这三条假设为基础的。考虑一个体积为 V 的盒子, 内部是一盒子气体分子, 分子之间的相互作用势能为 $u(r)$ 。盒子处于温度为 T 的环境中, 并与一个化学势为 μ 的粒子源交换气体分子。则系统的巨配分函数为

$$\Xi_V(T, z) = \sum_{N=0}^M \mathcal{Z}_N(T) z^N, \quad (2)$$

式中 $\mathcal{Z}_N(T)$ 为 N 个粒子的正则系综配分函数,

$$z = e^{\mu/k_B T} \quad (3)$$

为逸度。根据配分函数的定义, 显然 $\mathcal{Z}_N(T)$ 是正实数, $\Xi_V(T, z)$ 就是一个以 $\mathcal{Z}_N(T)$ 为系数的关于 z 的多项式。杨李理论的关键想法是, 将这个多项式的定义域从正实轴延拓到整个复 z 平面!

有了巨配分函数以后, 我们就可以定义有限体积的压强 P_V 和有限体积的粒子数密度 n_V 如下(式中 \log 表示以 e 为底的对数)

$$\begin{aligned} P_V(z) &= k_B T \frac{1}{V} \log \Xi_V(T, z), \\ n_V(z) &= \frac{\partial}{\partial \log(z)} \frac{1}{V} \log \Xi_V(T, z). \end{aligned} \quad (4)$$

并且人们还可以把这个定义从 z 的正实轴往整个复平面延拓, 当然延拓以后, 除正实轴之外的复 $P_V(z)$ 和复 $n_V(z)$ 就只有数学上的意义。取热力学极限之后, 就得到我们关心的压强和粒子数密度

$$P(z) = \lim_{V \rightarrow \infty} P_V(z), \quad n(z) = \lim_{V \rightarrow \infty} n_V(z). \quad (5)$$

通过将 $P(z)$ 和 $n(z)$ 消去逸度 z , 就可以得到系统的物态方程。问题是, 上述 $P(z)$ 和 $n(z)$ 是否对整个复 z 平面都有定义? 对于液气相变而言, 我们怎么知道这样得到的物态方程既可以描写液相, 同时又可以描写气相, 以及如何刻画两相之间的相变?

3 杨李理论基础

3.1 杨李理论的基本框架

注意到 $\Xi_V(T, z)$ 是一个关于 z 的 M 次多项式，杨李的关键观察是，除了这个多项式在复 z 平面上的零点处之外， $P_V(z)$ 和 $n_V(z)$ 关于 z 均是解析的，因此相变只可能和 $\Xi_V(T, z)$ 关于 z 的零点有关。注意到多项式 $\Xi_V(T, z) = \sum_{N=0}^M \mathcal{Z}_N(T) z^N$ 各项系数都是正实数，所以 $\Xi_V(T, z)$ 在 z 的正实轴上必定没有零点，但是， z 的正实轴才是物理的逸度，所以，这就说明，对于有限的 V ，系统必定没有相变。

类似的，由于多项式 $\Xi_V(T, z) = \sum_{N=0}^M \mathcal{Z}_N(T) z^N$ 各项系数都是实数，所以它的零点必定成对出现，每一个零点都有一个相应的复共轭零点。进而，我们可以把这个多项式因式分解成

$$\Xi_V(T, z) = \Xi_0(T) \prod_{i=1}^M \left[1 - \frac{z}{z_i(T)} \right], \quad (6)$$

式中 $z_i(T)$ 表示第 i 个零点位置， $\Xi_0(T)$ 是与 z 无关的常数。注意，这些零点的分布与温度 T 有关，随着温度的改变，零点分布也会改变。同样，零点分布还依赖于体积 V 。特别的，因为零点数目 M 是给定体积下粒子数目的上限，所以，随着 $V \rightarrow \infty$ ，必定同步的也有 $M \rightarrow \infty$ 。

根据(4)式，即可以得到

$$\begin{aligned} P_V(z) &= P_0(T) + k_B T \frac{1}{V} \sum_{i=1}^M \log \left[1 - \frac{z}{z_i(T)} \right], \\ n_V(z) &= \frac{\partial}{\partial \log(z)} P_V(z) / k_B T = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^M \frac{z}{z - z_i}. \end{aligned} \quad (7)$$

式中 $P_0(T) \equiv k_B T (\log \Xi_0(T)) / V$ ，这一项对 $P_V(z)$ 的贡献其实不重要，因为我们关心的是 P_V 作为 z 的函数。注意，由上式不一定能推出 $n(z) = \frac{\partial}{\partial \log(z)} P(z) / k_B T$ ，因为正如后文会分析的，虽然 $P(z)$ 在整个复 z 平面上都有定义，但是 $n(z)$ 却并非如此。

对于物理的 z ，也即是正实轴，根据统计物理的标准知识，有

$$\frac{\partial}{\partial \log z} \log \Xi_V(z) = \langle N \rangle, \quad (8)$$

也即是粒子数 N 的统计期望值。进一步也有

$$\frac{\partial^2}{(\partial \log z)^2} \log \Xi_V(z) = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \langle (\Delta N)^2 \rangle > 0, \quad (9)$$

式中 $\Delta N \equiv N - \langle N \rangle$ 。即 $\log \Xi_V$ 对 $\log(z)$ 的二阶偏导大于零, 由于 $n_V(z) = \frac{\partial}{\partial \log(z)} \frac{1}{V} \log \Xi_V(z)$ 正比于 $\log \Xi_V$ 对 $\log(z)$ 的一阶偏导, 这就说明, 对于物理的 z , $n_V(z)$ 是 $\log(z)$ 的单调递增函数, 并且很显然, 根据(7)给出的 $n_V(z)$ 表达式, $n_V(z)$ 在正实轴上有一个有限的上界 M/V 。进一步, 同样根据这个 $n_V(z)$ 的表达式, 不难看出 $n_V(0) = 0$, 结合 $n_V(z)$ 是 z 的单调递增函数即可知, 在正实轴上, $n_V(z) > 0$ 且有上界。也即, $\log \Xi_V$ 对 $\log(z)$ 的一阶偏导在 z 的正实轴上大于零且有上界, 进而可知, 在 z 的正实轴上, $\log \Xi_V$ 是 $\log(z)$ 的单调增函数。显然这说明, 在 z 的正实轴上, $P_V(z)$ 是 $\log(z)$ 的单调增函数。取热力学极限, 即有 $P(z), n(z)$ 在正实轴上都是单调递增函数(对于有定义的 z), 且 $n(z)$ 在正实轴上有上界 M/V 。

注意到除了 $\Xi_V(z)$ 的零点之外, $P_V(z)$ 在整个复平面上均解析, 换言之, 给定复 z 平面上的某个任意点 z_0 , P_V 在 z_0 处解析的充要条件是: 围绕 z_0 取一个任意小的邻域, 此邻域内不含有 $\Xi_V(z)$ 的零点。换言之, 随着 $V \rightarrow \infty$, 只要 $\Xi_V(z)$ 的零点不以 z_0 为聚点, 则 $P_V(z)$ 在 z_0 处就一定解析。同样的道理也适用于 $n(z)$ 。这种解析性得以满足的地方当然和相变没有关系。因此, 相变只可能发生在 $\Xi_V(z)$ 零点的聚点处(随着 $V \rightarrow \infty$)。进一步, 由于真正的物理量只对正实数的 z 有定义, 所以, 相变对应于 $\Xi_V(z)$ 的零点在正实轴上的聚点。前面说过, 对于有限的 V , $\Xi_V(z)$ 在正实轴上没有零点, 但, 这并不表示, 随着 $V \rightarrow \infty$, 复 z 平面上的零点不会在正实轴上形成聚点。

同时, 由 $n_V(z)$ 的表达式可知, 对于有限的 V , 复 z 平面上这些零点是 $n_V(z)$ 的极点, 但是, 这些零点的聚点, 就会成为 $n(z)$ 的本性奇点, 所以, 在这些零点的聚点处, $n(z)$ 一般来说会有无穷多个取值(或者说 $n(z)$ 在该处没有定义)。类似的分析也适用于 $\Xi_V(z)$ 对 $\log(z)$ 的高阶偏导。问题是, $P(z)$ 在这些聚点处有没有定义呢? 这个问题我们稍后再做讨论。

现在我们来改写一下方程(7)。设复平面上的坐标 $z = x + iy$, 零点 $z_j = x_j + iy_j$, 进而定义零点密度函数 $\rho(z)$ 为

$$\rho(z) \equiv \frac{1}{V} \sum_{i=1}^M \delta(x - x_i) \delta(y - y_i), \quad (10)$$

由于零点是成对出现的，每一对中的两个零点互为对方的复共轭，所以显然有

$$\rho(z) = \rho(\bar{z}), \quad (11)$$

式中 \bar{z} 表示 z 的复共轭。假设所有的零点均分布在复平面上的区域 \mathcal{D} 之内(\mathcal{D} 当然依赖于温度 T)，则很显然

$$\int_{\mathcal{D}} dz \rho(z) = \frac{M}{V}, \quad (12)$$

式中 $dz \equiv dx dy$ 。可以设想，随着 $V \rightarrow \infty, M \rightarrow \infty$ 的热力学极限，复平面上的零点可能在区域 \mathcal{D} 内汇聚成连续的一片，即， \mathcal{D} 内的每一个点都是聚点，并使得 $\rho(z) = \rho(x, y)$ 成为 x, y 的连续函数(在热力学极限之下)。后文我们默认所说的 $\rho(z)$ 都是指此热力学极限之下的零点密度函数。

根据(7)式不难看出，

$$\begin{aligned} P(z) &= P_0(T) + k_B T \int_{\mathcal{D}} dz' \rho(z') \log \left[1 - \frac{z}{z'} \right], \\ n(z) &= \frac{\partial}{\partial \log(z)} P(z) / k_B T = \int_{\mathcal{D}} dz' \rho(z') \frac{z}{z - z'}. \end{aligned} \quad (13)$$

当然， $P(z)$ 是 z 的多值函数。很明显，只要知道了零点的分布函数 $\rho(z)$ ，那我们就能根据上式算出 $P(z)$ 和 $n(z)$ ，对于物理的 z (正实轴)，通过消去它，就能得到系统的物态方程 $P = P(n, T)$ 。然而，给定一个系统，算出其零点分布函数 $\rho(z)$ 是一个极端困难的事情，事实上，即使只是决定零点的分布区域 \mathcal{D} 都是一个难题。好在对于一大类系统(伊辛模型和格气模型)，杨振宁和李政道的原始论文解决了后面这个难题，这就是著名的单位圆定义，它说的是，对于这一类系统，其零点均分布在复 z 平面的单位圆上，即 \mathcal{D} 是一个单位圆。后文我们再回到对单位圆定理的讨论和证明。

现在，不妨将 $P(z) - P_0(T)$ 的实部和虚部分开来考虑，定义

$$[P(z) - P_0(T)]/k_B T \equiv \varphi(z) + i\psi(z), \quad (14)$$

式中 $\varphi(z), \psi(z)$ 是两个实函数。很显然，

$$\varphi(z) = \int dz' \rho(z') \log \left| 1 - \frac{z}{z'} \right|. \quad (15)$$

注意 $\frac{1}{2\pi} \log |z|$ 是两维拉普拉斯算符 $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ 的格林函数。进而通过将拉普拉斯算符作用于上式，不难看出

$$\Delta \varphi(z) = 2\pi\rho(z). \quad (16)$$

这意味着 $\varphi(z)$ 是两维平面上电荷密度 $\rho(z)$ 所对应的静电势！根据电动力学的知识可知，对于有限区域 \mathcal{D} 内的任何电荷密度 $\rho(z)$ ，相应的静电势 $\varphi(z)$ 在整个两维平面上都有解，且这个解是连续函数！特别的，这说明 $\varphi(z)$ 在零点的聚点处有定义，且在这些地方也是连续的！

不仅如此，假设最终的零点汇聚在复平面上的一条封闭曲线上（这是很典型的情况），当然它也就是我们的电荷分布区域 \mathcal{D} ，因此这样的曲线 \mathcal{D} 就将整个复平面分割成内外两个区域，区域1和区域2。在这两个区域内部，由于电荷为零，所以静电势 $\varphi(z)$ 是解析函数，分别记这两个解析函数为 $\varphi_1(z)$, $\varphi_2(z)$ 。由于静电势在整个两维平面上连续，所以必定有

$$\varphi_1(z)|_{\mathcal{D}} = \varphi_2(z)|_{\mathcal{D}}. \quad (17)$$

但是，请注意，在区域分割线 \mathcal{D} 上， $\varphi(z)$ 虽然连续，但并不解析。

承接上一段的假设，假设封闭曲线 \mathcal{D} 与 z 的正实轴相交，那这些交点就对应相变发生的地方。同时，由于在 z 的正实轴上， $P(z) - P_0(T)$ 是一个实函数，它只有实部 $k_B T \varphi(z)$ 。因此上面关于 $\varphi(z)$ 连续性的讨论就说明， $P(z)$ 在整个正实轴上都有定义，且是连续函数。特别的，对于零点在正实轴上的聚点处， $P(z)$ 有定义，且在此处连续。总之，对于任何物理的逸度 z ， $P(z)$ 均有定义，且是连续函数。

依然承接上面的假设，由于 \mathcal{D} 是一条曲线，所以相应的零点密度 $\rho(z)$ 可以改成线密度 $\lambda(z)$ 。进一步假设 $z_p = x_p$ 为 \mathcal{D} 与正实轴的某个交点。为了看清楚沿着正实轴从两侧趋于 x_p 时，粒子数密度 $n(z)$ 的跳变情况（注意，前文分析过，在这样的聚点处， $n(z)$ 一般来说有无穷多个取值），我们不妨把两维 z 平面逆向旋转 90 度，使得实轴变成虚轴，虚轴变成实轴，从而旋转之后 $z \rightarrow iz = ix - y$ 。记 $x^\pm = x \pm \epsilon$ ，式中 ϵ 为无穷小正实数，则根据 $n(z)$ 的计算公式（13），有（注意 $\rho(z) \rightarrow \lambda(z)$ 了）

$$n(x_p^-) = \int_{\mathcal{D}} dz' \lambda(z') \frac{iz_p}{iz_p - i\epsilon - z'} = \int_{\mathcal{D}} dz' \lambda(z') \frac{-ix_p}{z' - iz_p + i\epsilon}. \quad (18)$$

利用数学公式

$$\frac{1}{z - i\epsilon} = \frac{1}{z} + i\pi\delta(z), \quad \frac{1}{z + i\epsilon} = \frac{1}{z} - i\pi\delta(z). \quad (19)$$

可得

$$n(x_p^-) = -ix_p \mathcal{P} \int_{\mathcal{D}} dz' \frac{\lambda(z')}{z' - iz_p} - x_p \pi \lambda(iz_p). \quad (20)$$

式中 $\mathcal{P} \int$ 表示主值积分。同理可得

$$n(x_p^+) = -ix_p \mathcal{P} \int_{\mathcal{D}} dz' \frac{\lambda(z')}{z' - iz_p} + x_p \pi \lambda(iz_p). \quad (21)$$

从而即有(坐标轴旋转回来了)

$$n(x_p^+) - n(x_p^-) = 2\pi x_p \lambda(z_p) = 2\pi x_p \lambda(x_p). \quad (22)$$

所以, 只要零点密度在聚点 x_p 处不为零, 那么 $n(z)$ 在 $z = x_p$ 处就是不连续的, 而是会发生一个 $2\pi x_p \lambda(x_p)$ 的正向的跳变。

3.2 相变的物理图像

根据以上分析, 我们可以得出如下物理图像。假设在热力学极限之下, z 的正实轴 x 上没有聚点, 如图(4)所示。则, 压强随着 $\log(x)$ 连续单调递增, 同时, 粒子数密度 n 随着 $\log(x)$ 也连续单调上升, 且有一个上界。所以, 系统只有唯一的一个相, 没有相变。最终在 $P - 1/n$ ($1/n$ 为比体积) 图上, 等温线连续单调下降, 没有平台区。

而假设在热力学极限之下, z 的正实轴 x 上有比方说两个聚点 x_p 和 x_q , 如图(5)(a)所示。则系统共有三个不同的相, x_p 和 x_q 就是相变发生的地方。压强 P 随 $\log(x)$ 连续单调增, 但在 $\log(x_p)$ 和 $\log(x_q)$ 处不解析, 如图(5)(b)所示。粒子数密度 n 随 $\log(x)$ 也单调增, 同时在 $\log(x_p)$ 和 $\log(x_q)$ 处有正向跃变, 如图(5)(c)所示。根据图(b)和图(c)可以画出最终压强和比体积 $1/n$ 的曲线, 如图(5)(d)所示, 注意, 在粒子数密度跳变的地方, $\log(x)$ 是固定的, 因此相应的压强 P 也固定, 这就对应 $P - 1/n$ 曲线上的平台区。

随着温度的变化, 聚点 x_p 和 x_q 当然会在正实轴上移动。假设在某个温度 T_c 之下, x_p 处的聚点消失了, 那就说明 1 相和 2 相之间的相变消失了,

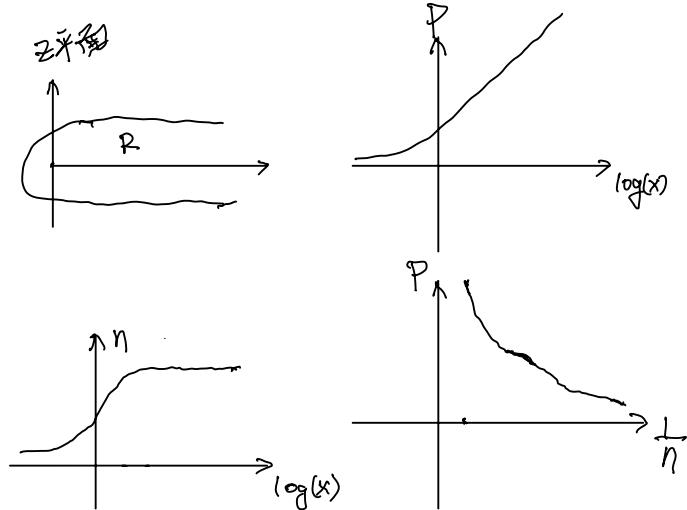


Figure 4: 在热力学极限之下，左上角图中的区域 R 内没有零点，则系统只有一个相，在给定温度下，其压强随着比体积 $1/n$ 单调下降。

那这个温度 T_c 就是一个所谓的临界温度。当然，也有可能在比方说聚点 x_p 处，零点密度 $\lambda(x_p) = 0$ ，则根据(22)式可知，这时候，粒子数密度 n 没有跳变，而是连续的。因此这时候 x_p 处的相变就是所谓的连续相变。

很显然，如果正实轴上的聚点只有一个，那就是两个相，分析和上面完全类似。特别的， $P - 1/n$ 等温线上会自动出现描述两相共存的平台区。很显然，这幅物理图像自然可以正确描述液气相变。但，这里的关键是，我们得出这幅物理图像并不需要任何唯象的或者手动的假设，而是从统计物理的基本理论中自动得出来的。特别的，从不同温度下的 $P - 1/n$ 等温曲线，我们原则上可以得到能够同时描写两个不同相的物态方程。所以，杨李的这个相变理论自然解决了如何从基本理论出发描述液气相变的难题。

3.3 对相变的进一步刻画

为了进一步刻画相变，依然让我们假设零点的分布区域 \mathcal{D} 是一条曲线，并

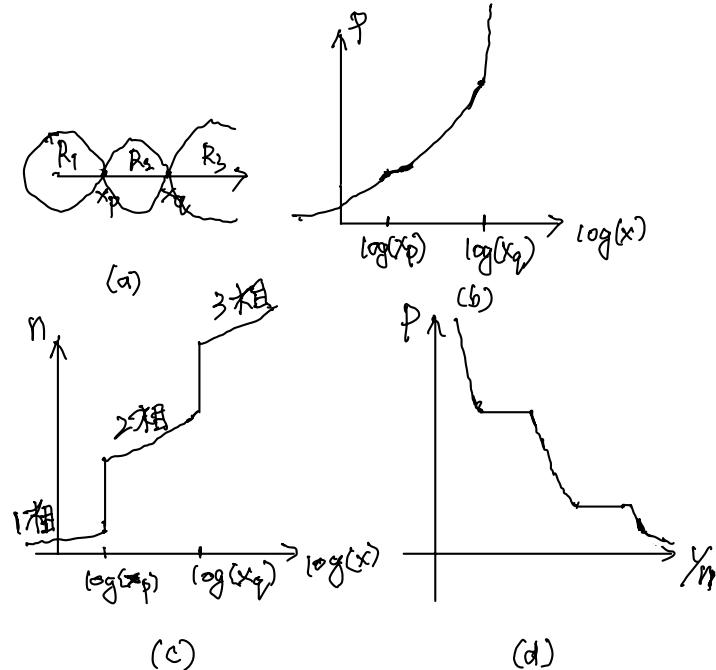


Figure 5: 图(a)表示正实轴上有两个聚点 x_p 和 x_q , 区域 R_1, R_2, R_3 之内没有零点。图(b)是相应的 $P - \log(x)$ 曲线, P 随 $\log(x)$ 连续单调增, 但在 $\log(x_p)$ 和 $\log(x_q)$ 处不解析。图(c)是 $n - \log(x)$ 曲线, n 随 $\log(x)$ 单调增, 同时在 $\log(x_p)$ 和 $\log(x_q)$ 处有正向跃变。图(d)是 $P - 1/n$ 曲线, 注意在两相共存区自动出现了等温线的平台。

假设它与正实轴交于 z_0 点, 如图(6)所示。当然, z_0 就是相变点。不妨以 s 来表示这条曲线 \mathcal{D} 的弧长参数, 其中弧长从 z_0 点开始量起, 并以逆时针方向为 s 增加的方向。显然, 这条曲线将复 z 平面分成了左右两个区域, 记左侧为区域1, 右侧为区域2。

将方程 $\nabla^2 \varphi(z) = 2\pi\rho(z)$ 类比于静电力学的拉普拉斯方程, 并在曲线 \mathcal{D} 附近应用静电力学的高斯定理, 即有

$$[\nabla \varphi_2(z) - \nabla \varphi_1(z)] \cdot \mathbf{n}|_{\mathcal{D}} = \lambda(s), \quad (23)$$

式中 \mathbf{n} 为曲线 \mathcal{D} 的单位法向量, $\lambda(s)$ 是曲线上的零点线密度。由于 $P(z) -$

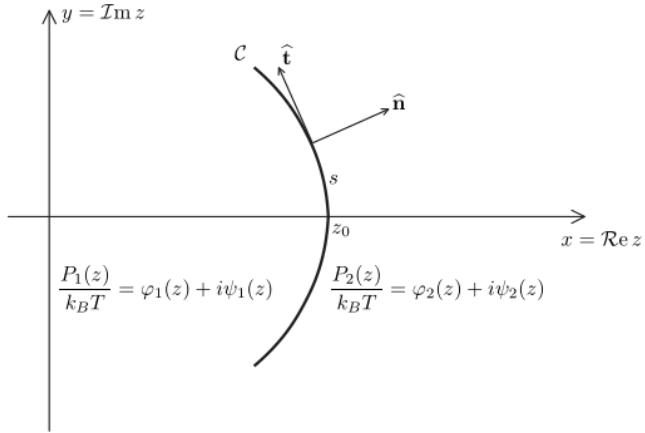


Figure 6: 零点分布区域 \mathcal{D} 是一条曲线的典型情况。图中此曲线与正实轴交于 z_0 ，当然，这就是相变点。

$P_0(T) = k_B T[\varphi(z) + i\psi(z)]$ 在左右两个区域均为 z 的解析函数，应用解析函数的柯西-黎曼方程，即有

$$\nabla \varphi_{1,2}(z) \cdot \mathbf{n}|_{\mathcal{D}} = \nabla \psi_{1,2}(z) \cdot \mathbf{t}|_{\mathcal{D}}, \quad (24)$$

式中 \mathbf{t} 为曲线 \mathcal{D} 的单位切向量。结合上面这两个方程，即有

$$\frac{d}{ds}[\psi_2(z) - \psi_1(z)]|_{\mathcal{D}} = 2\pi\lambda(s). \quad (25)$$

特别的，在相变点 z_0 处，我们有

$$\frac{d}{ds}[\psi_2(z) - \psi_1(z)]|_{z_0} = 2\pi\lambda(0). \quad (26)$$

这些结果，再结合下面的连续性条件就可以对相变构成进一步的刻画

$$\varphi_2(z)|_{\mathcal{D}} = \varphi_1(z)|_{\mathcal{D}}. \quad (27)$$

为此，我们把 $[P(z) - P_0(T)]/k_B T$ 在 z_0 点的两侧分别做泰勒展开

$$[P_{1,2}(z) - P_0]/k_B T = C(z_0) + a_{1,2}(z - z_0) + b_{1,2}(z - z_0)^2 + \mathcal{O}((z - z_0)^3), \quad (28)$$

式中 $C(z_0)$ 为泰勒展开的零阶项, 由 $P(z)$ 在 z_0 处的连续性, 这个零阶项对于左右两侧都是一样的。同时, 为了确保 $P_{1,2}(z)$ 在正实轴上为实函数, 上式所有的展开系数都必定是实数。记 $z = x + iy$, 则根据连续性条件(27), 即可以得到曲线 \mathcal{D} 在 z_0 附近的方程, 为

$$(a_2 - a_1)(x - z_0) + (b_2 - b_1)[(x - z_0)^2 - y^2] + \operatorname{Re}[\mathcal{O}((z - z_0)^3)] = 0. \quad (29)$$

下面分几种情况进行讨论:

- **一阶相变:** 假如 $a_2 \neq a_1$, 则复压强的一阶导数在 z_0 处不连续, 相应的相变称之为一阶相变。假如进一步有 $b_2 \neq b_1$, 则曲线 \mathcal{D} 在 z_0 附近是双曲线, 方程为

$$y^2 = (x - z_0)^2 + \frac{a_2 - a_1}{b_2 - b_1}(x - z_0). \quad (30)$$

它在 z_0 处的切向量平行于虚轴。进而通过取方程(28)的虚部, 并应用(26), 即可以得到

$$\lambda(0) = \frac{a_2 - a_1}{2\pi}. \quad (31)$$

因此, 对于一阶相变, 相变点处的零点密度非零。这与上一小节的物理图像完全吻合。

- **二阶相变:** 假如 $a_2 = a_1$, 但是 $b_2 \neq b_1$, 那这就是二阶相变。相应 \mathcal{D} 在 z_0 附近的方程为

$$y = \pm(x - z_0), \quad (32)$$

很显然, 这说明 \mathcal{D} 在 z_0 处与虚轴成 $\pm\pi/4$ 的夹角。进而通过取方程(28)的虚部, 并应用(25), 即可以得到

$$\lambda(s) = \frac{b_2 - b_1}{\pi}|s| + \mathcal{O}(s^2). \quad (33)$$

即零点密度在相变点处线性地趋于零。

- **高阶相变:** 假如复压强的不连续性出现在更高阶的导数上, 那这就是高阶相变。这时候, 完全类似于上面的分析, 也可以得到 \mathcal{D} 在相变点附近的方程, 并能得出零点密度在相变点处也是趋于零的。实际上, 假设相变是 n 阶的 ($n \geq 3$), 则具体分析表明 $\lambda(s) \sim |s|^{n-1}$ 。

4 伊辛模型与格气模型

为了考察具体的零点分布情况，杨和李考察了两类相互等价的模型，伊辛模型和格气模型，其中格气模型可以用来理解液气相变。下面我们从伊辛模型开始讲起。

考虑 N 个伊辛自旋 $\sigma_i = \pm 1 (i = 1, 2, \dots, N)$ ，式中 $\sigma_i = +1$ 表示自旋向上状态， $\sigma_i = -1$ 表示自旋向下状态。(1). 这 N 个自旋放置在一个 d -维格点上。(2). 不同的自旋两两结对，每对的两个自旋之间存在铁磁相互作用，即当这两个自旋平行时(都向上或都向下)能量比较低，而反平行时(一个向上一个向下)则能量比较高。(3). 整个系统处于一个非均匀磁场中，第 i 个自旋感受到的磁场为 h_i 。

则系统的哈密顿量 H_Y 可以写成

$$H_Y = -\frac{1}{2} \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i, \quad (34)$$

铁磁相互作用要求 $J_{ij} > 0$ ，且关于 i, j 指标对称。则系统的正则配分函数为

$$\mathcal{Z}(h_1, h_2, \dots, h_N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-H_Y/k_B T}. \quad (35)$$

很明显，在磁场翻转之下，即在所有 h_i 同步变换为 $-h_i$ 时， \mathcal{Z} 保持不变，因为我们可以同时作翻转自旋的变换 $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ ，从而可以保持系统的哈密顿量 H_Y 不变，进而使得配分函数保持不变，即有

$$\mathcal{Z}(h_1, h_2, \dots, h_N) = \mathcal{Z}(-h_1, -h_2, \dots, -h_N). \quad (36)$$

为了得到与之等价的格气模型，我们进行如下变量代换

$$\sigma_i = 2n_i - 1, \quad (37)$$

显然 $n_i = 0, 1$ ，分别对应 $\sigma_i = -1, +1$ 。代入 H_Y 的表达式，即有

$$H_Y = -2 \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} n_i n_j - \frac{1}{2} \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} + 2 \sum_i (-h_i + \sum_{j, j \neq i} J_{ij}) n_i + \sum_i h_i. \quad (38)$$

记 $\sum_{j, j \neq i} J_{ij} \equiv J_i$, $\frac{1}{2} \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} = J$, 则上式可以重写成

$$H_Y = -2 \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} n_i n_j - J + 2 \sum_i (-h_i + J_i) n_i + \sum_i h_i. \quad (39)$$

下面我们定义相应格气模型的哈密顿量 H_G 为

$$H_G \equiv -2 \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} n_i n_j - J. \quad (40)$$

之所以称这个哈密顿量描述的格点模型为格气模型，原因在于我们可以把 $n_i = 1$ 的格点想象成是某种气体原子占据的格点，而 $n_i = 0$ 的格点则是未被占据的格点，且每个格点最多被一个原子占据。那哈密顿量 H_G 描述的就是这些格点气体原子之间以 $-4J_{ij} < 0$ 的吸引型相互作用能进行相互作用的气体系统，称之为格气系统。

则由(39)式和 H_G 的定义，不难看出，

$$\mathcal{Z}(h_1, h_2, \dots, h_N) = \sum_{\{n_i\}} e^{-H_G/k_B T} \prod_i e^{-2n_i(J_i - h_i)/k_B T} \prod_i e^{-h_i/k_B T}. \quad (41)$$

定义局域逸度 y_i 为

$$y_i \equiv e^{-2J_i/k_B T} e^{2h_i/k_B T} \equiv a_i z_i, \quad \text{其中 } a_i \equiv e^{-2J_i/k_B T}, z_i \equiv e^{2h_i/k_B T}. \quad (42)$$

后文我们将保持 $a_i > 0$ 为实数不变，但是把 z_i 延拓到复平面上去(相当于让局域磁场 h_i 可以取复数值)。进而即有

$$\mathcal{Z}(h_1, h_2, \dots, h_N) = (z_1 z_2 \cdots z_N)^{-1/2} \sum_{\{n_i\}} \left[e^{-H_G/k_B T} \prod_i y_i^{n_i} \right]. \quad (43)$$

很显然，式中 $\sum_{\{n_i\}} e^{-H_G/k_B T} \prod_i y_i^{n_i}$ 是一个以 $\{n_i\}$ 为变量，局域逸度为 $y_i = a_i z_i$ 的格气系统的巨配分函数，不妨记作 $\Xi(z_1, z_2, \dots, z_N)$ ，

$$\Xi(z_1, z_2, \dots, z_N) = \sum_{\{n_i\}} \left[e^{-H_G/k_B T} \prod_i y_i^{n_i} \right] = \sum_{\{n_i\}} \left[e^{-H_G/k_B T} \prod_i (a_i z_i)^{n_i} \right].$$

从而

$$\mathcal{Z}(h_1, h_2, \dots, h_N) = (z_1 z_2 \cdots z_N)^{-1/2} \Xi(z_1, z_2, \dots, z_N). \quad (44)$$

很明显，磁场翻转 $h_i \rightarrow -h_i$ 相应于变换 $z_i \rightarrow 1/z_i$ (根据 z_i 的定义)。进而结合式(36)与式(44)，即可知

$$\Xi(1/z_1, 1/z_2, \dots, 1/z_N) = (z_1 z_2 \cdots z_N)^{-1} \Xi(z_1, z_2, \dots, z_N). \quad (45)$$

将 H_G 的定义式(40)代入巨配分函数 $\Xi(z_1, z_2, \dots, z_N)$ 的计算公式, 即有(结合 a_i 的定义式, 以及 J_i 的定义)

$$\begin{aligned}\Xi(z_1, z_2, \dots, z_N) &= \sum_{\{n_i\}} \left[(e^{-H_G/k_B T} \prod_i (a_i z_i)^{n_i}) \right] \\ &= e^{J/k_B T} \sum_{\{n_i\}} \prod_{i,j, j \neq i} e^{2n_i n_j J_{ij}/k_B T - 2n_i J_{ij}/k_B T} z_i^{n_i}.\end{aligned}\quad (46)$$

由于 $J_{ij} > 0$, 所以很显然 $2n_i n_j J_{ij}/k_B T - 2n_i J_{ij}/k_B T \leq 0$, 所以

$$0 < e^{2n_i n_j J_{ij}/k_B T - 2n_i J_{ij}/k_B T} \leq 1, \quad (47)$$

并且很明显, 当 $n_i = n_j = 1$ 时(即 i, j 格点均被占据时), 或者 $n_i = 0$ 时(即 i 格点为空时), 有 $e^{2n_i n_j J_{ij}/k_B T - 2n_i J_{ij}/k_B T} = 1$ 。又请注意 i 格点为空时, $z_i^{n_i} = 1$, 而当 i 格点被占据时, $z_i^{n_i} = z_i$ 。

不妨将所有被原子占据的格点(即 $n_i = 1$)的集合记作 $S \subseteq \{1, 2, \dots, N\}$, 其补集(空格点集合)记作 \bar{S} , 并记 $z^S \equiv \prod_{i \in S} z_i$ 。则不难将上面的巨配分函数按照被占据的格点泰勒展开成如下形式

$$\Xi(z_1, z_2, \dots, z_N) = e^{J/k_B T} \sum_S [z^S \prod_{i \in S, j \in \bar{S}} A_{ij}] \equiv e^{J/k_B T} Q_N(z_1, \dots, z_N). \quad (48)$$

式中 $0 < A_{ij} \leq 1$, 且关于指标 i, j 对称。人们也常常记

$$\prod_{i \in S, j \in \bar{S}} A_{ij} \equiv A_S. \quad (49)$$

很显然, $A_{\bar{S}} = A_S$ 。进而将多项式 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 简写成

$$Q_N(z_1, \dots, z_N) = \sum_S A_S z^S. \quad (50)$$

根据(45)式, 当然也有

$$Q_N(1/z_1, 1/z_2, \dots, 1/z_N) = (z_1 z_2 \cdots z_N)^{-1} Q_N(z_1, z_2, \dots, z_N). \quad (51)$$

这个结论也可以通过直接在(50)式中交换集合 S 与其补集 \bar{S} , 并利用 $A_{\bar{S}} = A_S$ 直接证明。

我们要研究的, 就是巨配分函数 $\Xi(z_1, z_2, \dots, z_N)$ 关于所有复自变量 z_i 的零点, 很显然, 这等价于研究多项式 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 关于所有复自变量 z_i 的零点。

5 单位圆定理

定理叙述

先概括一下上一节关于多项式 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 的定义：设 (A_{ij}) 是实对称矩阵，满足任意矩阵元 $0 < A_{ij} \leq 1$ 。对 $[N] = \{1, 2, \dots, N\}$ 的子集 S ，定义 $A_S = \prod_{i \in S} \prod_{j \notin S} A_{ij}$ ，其中 $A_\emptyset = A_{[N]} = 1$ 。定义 N 元多项式

$$Q_N(z_1, \dots, z_N) = \sum_{S \subseteq [N]} A_S z^S,$$

式中 $z^S = \prod_{i \in S} z_i$ 。容易证明，这样的 N 元多项式满足

$$Q_N(1/z_1, 1/z_2, \dots, 1/z_N) = (z_1 z_2 \cdots z_N)^{-1} Q_N(z_1, z_2, \dots, z_N). \quad (52)$$

所为的单位圆定理，说的就是：如果 $|z_1| \leq 1, |z_2| \leq 1, \dots, |z_N| \leq 1$ ，则 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 在此范围内的零点，全部位于 N 为复空间 \mathbb{C}^N 的如下单位环面 \mathbf{T}^N 上

$$\mathbf{T}^N : |z_1| = |z_2| = \cdots = |z_N| = 1. \quad (53)$$

不妨引入一个术语，用 \mathbb{D} 表示(开)单位圆盘 $\{z : |z| < 1\}$ ，称一个多元多项式 $P(z_1, \dots, z_N)$ 是 \mathbb{D} -stable 的，如果对任意 $z_1, \dots, z_N \in \mathbb{D}$ ， $P(z_1, \dots, z_N) \neq 0$ 。称线性变换 T 是 \mathbb{D} -stable 的，如果 T 将 \mathbb{D} -stable 多项式映为 \mathbb{D} -stable 多项式或者 0。

很显然，要证明单位圆定理，只需证明， $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 是 \mathbb{D} -stable 的。而且由于 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 满足反演关系(52)，所以，如果它对圆盘内部是 \mathbb{D} -stable 的，则它对圆盘外部也同样是 \mathbb{D} -stable 的。特别的，这就意味着 N 次多项式 $Q_N(z, \dots, z)$ 的零点全部位于 $|z| = 1$ 的单位圆之上。

5.1 证明思路

证明的策略是从一些基本的、容易验证的 \mathbb{D} -stable 多项式出发，通过一系列 \mathbb{D} -stable 的变换得到 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 。为此，我们需要以下引理：

引理1

设复数 $|a| < 1$, 则多项式 $g(z_1, z_2) = 1 + az_1 + \bar{a}z_2 + z_1z_2$ 是 \mathbb{D} -stable 的。

证明: 若 $z_1, z_2 \in \mathbb{D}$, 则

$$|1 + az_1|^2 - |\bar{a} + z_1|^2 = (1 - |a|^2)(1 - |z_1|^2) > 0,$$

$$\text{于是 } |1 + az_1| > |\bar{a} + z_1| \geq |\bar{a}z_2 + z_1z_2|,$$

$$\text{从而必有 } g(z_1, z_2) \neq 0.$$

引理2: (Asano Contraction)

考虑线性映射 T_{zw} 将 $P_1(z, w) = a + bz + cw + dzw$ 映射成 $P_2(z) = a + dz$, 那么 T_{zw} 是 \mathbb{D} -stable 的。注意, T_{zw} 相当于将变量 z 和 w 进行配对收缩, 一对变量收缩成一个(记为 z), 如果某个变量没有相应的配对, 那它就收缩为零。人们也称 T_{zw} 为 Asano Contraction。

证明: 假设 $P_1(z, w) = a + bz + cw + dzw$ 是 \mathbb{D} -stable 的多项式, 下证 $|a| \geq |d|$ 。

反证, 假设 $|a| < |d|$, 对任意 $|z| < 1$, 由 $P_1(z, w) = a + bz + (c + dz)w$ 可知 $|a + bz| \geq |c + dz|$, 取极限可知该式对 $|z| = 1$ 也成立。

取 $z = 0$ 可得 $|a| \geq |c|$ 。若 $|a| \leq |b|$, 取 $z = -a/b$ 得矛盾, 从而必有 $|a| > |b|$ 。

取 $|z| = 1$ 满足 $|c + dz| = |c| + |d|$, 则由三角不等式有 $|a| + |b| \geq |c| + |d|$, 由 $|a| < |d|$ 可知 $|b| > |c|$, 即 $|d| > |a| > |b| > |c|$ 。

取 $|z| = 1$ 满足 $|a + bz| = |a| - |b|$ 可得矛盾。

于是必有 $|a| \geq |d|$, 从而 $P_2(z) = a + dz$ 是 \mathbb{D} -stable 的。

定义: (Schur-Hadamard 乘积)

设多项式

$$f(z_1, \dots, z_N) = \sum_{S \subseteq [N]} a_S z^S, \quad g(z_1, \dots, z_N) = \sum_{S \subseteq [N]} b_S z^S,$$

定义其 Schur-Hadamard 乘积为

$$(f \cdot g)(z) = \sum_{S \subseteq [N]} a_S b_S z^S.$$

引理3: (Hinkkanen's composition theorem)

沿用上面的定义, 若 f, g 是 \mathbb{D} -stable 的, 则 $f \cdot g$ 也是 \mathbb{D} -stable 的。

证明: 考虑 $2N$ 元多项式 $\phi(z, w) = f(z)g(w) = \sum_{S \subseteq [N]} a_S z^S g(w)$ 。将 Asano Contraction T_{z_k, w_k} 简记为 T_k , 不难看出(请大家想象一下配对收缩的定义)

$$T_N T_{N-1} \cdots T_1 \phi(z, w) = \sum_{S \subseteq [N]} a_S b_S z^S = f \cdot g$$

显然 ϕ 关于 z, w 是 \mathbb{D} -stable 的, 故我们依次作 Asano Contraction T_1, T_2, \dots, T_N 后得到的多项式 $f \cdot g$ 也是 \mathbb{D} -stable 的。

最后, 考虑多项式

$$f_{i,j}(z) = (1 + A_{ij}z_i + A_{ji}z_j + z_i z_j) \prod_{k \neq i, j} (1 + z_k)$$

对所有 $i < j$ 求 Schur-Hadamard 乘积, 计算可得

$$Q_N(z_1, \dots, z_N) = f_{12} \cdot f_{13} \cdots \cdot f_{N-1, N}$$

由引理1, $f_{i,j}$ 是 \mathbb{D} -stable 的多项式。于是不断使用引理3可得 $Q_N(z_1, \dots, z_N)$ 是 \mathbb{D} -stable 的, 证毕。

5.2 物理讨论

回到我们的物理问题, 如果取 $z_1 = z_2 = \cdots = z_N = z$, 即取所有的局域复磁场 h_i 均相等, 也就是相当于对系统施加的是一个整体的磁场 h 。相应伊辛模型的哈密顿量成为

$$H_Y = -\frac{1}{2} \sum_{i,j, i \neq j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i. \quad (54)$$

这里, $z \equiv e^{2h/k_B T}$.

这时候格气模型的巨配分函数 $\Xi(z, \dots, z)$ 可以简记为 $\Xi(z)$, 很显然

$$\Xi(z) = \sum_{\{n_i\}} [e^{-H_G/k_B T} \prod_i y_i^{n_i}] = \sum_{\{n_i\}} [(e^{-H_G/k_B T} \prod_j a_j^{n_j}) z^{\sum_i n_i}].$$

注意 $\sum_i n_i$ 其实就是总粒子数。所以这就是一个比较标准的以 z 为逸度的巨配分函数，它是关于 z 的一个 N 次多项式。

这时候相应的，也可以将多项式 $Q_N(z, \dots, z)$ 简记为 $Q_N(z)$ ，它由一个 N 元多项式变成了一个 N 次多项式。则由(48)式知

$$\Xi(z) = e^{J/k_B T} Q_N(z). \quad (55)$$

引用单位圆定理，即有， $\Xi(z)$ 的零点均分布在复 z 空间的单位圆 $|z| = 1$ 上。

注意，在格气模型中，格点的总数 N 就相当于总体积 V ，也相当于最大粒子数 M ，所以热力学极限其实就是 $N \rightarrow \infty$ 的极限。如果这个极限存在(这对相互作用 J_{ij} 有要求，一般要求它是一种短程相互作用)，那根据上面的讨论可知， $\Xi(z)$ 在热力学极限之下的零点依然分布在单位圆上，即零点分布区域 \mathcal{D} 为复 z 平面上的单位圆。

6 参考文献

两篇原始文献：

1. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation, C. N. Yang and T. D. Lee
2. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model, T. D. Lee and C. N. Yang

两篇综述：

3. Statistical Mechanics of Equilibrium and Nonequilibrium Phase Transitions: The Yang-Lee Formalism, Ioana Bena, Michel Droz, Adam Lipowski, arXiv:cond-mat/0510278
4. 知乎文章: 李-杨单位圆定理, YoiHong
<https://zhuanlan.zhihu.com/p/1963625182053762633>

李新征老师组的两篇综述文章：

5. 李-杨相变理论：历史与新进展, 王方成, 叶麒俊, 李新征
6. 物质的态与相, 叶麒俊, 欧阳霄宇, 李新征