核温度的动力学计算*

郑玉明
(中国原子能科学研究院 北京 102413)

摘 要 介绍了测量热力学微正则系综中哈密顿动力学系统温度的一种新的动力学途径，即在各态历经性的假设下，温度可作为函数 $\nabla\cdot(\nabla H/\|\nabla H\|^2)$ 在能量面上的时间平均算出. 这一方法不仅给出了确定温度的一种有效的计算途径，而且也提供了动力学系统理论和哈密顿系统的统计力学之间的内在联系.

关 键 词 核温度 各态历经性 动力学平均
分 类 号 O571.41

平均场模型预言核物质存在液-气相变[1]，在中能重离子反应的多重碎裂实验研究中也发现了液-气相变现象[2]. 此后，液-气相变研究成为中能重离子反应中极感兴趣的主要课题之一[3~8]. 尤其是，自从 ALADIN 实验组发表了关于核多重碎裂中的液-气相变的实验证据[9]以来，这一研究课题再次成为新的研究热点，引起理论界和实验界的广泛讨论和研究[10~19].

研究液-气相变的主要途径之一是，考察系统的激发能与温度之间的热曲线特性[5,9]. 其中，需要计算或测量 2 个物理量：系统的温度和每核子激发能. 在微正则系综的统计模型计算中，温度 $T(E)$ 由下式给出[5]

$$\frac{1}{T(E)}=\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}E}, \tag{1}$$

其中，E 为系统的总能量，S 是系统的熵函数. 但是实际上，计算系统的熵函数是不容易的. 特别是，当系统的自由度数目很大时，熵函数的计算几乎是不可能的. 为了克服这一困难，本文介绍一种计算核温度的动力学方法[20].

由于欧几里得度规(Euclidean metric)能提供一个表示函数梯度和矢量场散度的动力学平均的方便形式. 因此，为了便于描述和讨论，我们限制在欧氏空间 $\Omega=R^{2d}(d\geqslant 1)$ 中考虑一个哈密顿函数 $H:\ \Omega\rightarrow R$，它保持刘维测度(Liouville measure)不变. 而且，对所有考虑的能量，$H(\xi)<E$ 是束缚的和具有一个光滑连接的表面 $A(E)=\{H(\xi)=E\}$.

众所周知，对于经典热力学的微正则系综，可定义熵 $S(E)$ 的指数等于一个能量面的正则不变的加权面积[20]

$$\begin{aligned}e^{S(E)}&\equiv\int m(\mathrm{d}\xi)\delta[H(\xi)-E]\\&=\int_{A(E)}\frac{m(\mathrm{d}A\xi)}{\|H(\xi)\|},\end{aligned}\tag{2}$$

而温度 $T(E)$ 则通过(1)式求得. 如上所讲，通过(1)和(2)式来计算温度是很困难的，特别是，当系统的自由度数目很大时，这种计算几乎是不可能的.

温度计算的动力学方法由如下定理给出[20]：设(Ω, H)对一非奇异能量面 $A(E)$ 的刘维测度 $m|_{A(E)}$ 是各态历经的(ergodic)，则对于 $m|_{A(E)}$——几乎每一个 $X(0)\in A(E)$，有

$$\frac{1}{T(E)}=\lim_{t\rightarrow\infty}\frac{1}{t}\int_{o}^{t}\mathrm{d}\tau\Phi[X(\tau)] \tag{3}$$

式中，$X(\tau)$ 是在哈密顿流下 $X(0)$ 的轨迹，可

* 1998-05-05 收稿.
* 国家自然科学基金(项目号 19775068)资助.

观测量

$$\Phi = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla H}{\| \nabla H \|^2} \right). \tag{4}$$

上述定理的核心思想是，将几何的能量关系，即(1)和(2)式中对于 $A(E)$的依赖关系，转换成为对一固定几何的代数关系. 这是通过引进一个辅助的矢量场来达到的.

我们考虑欧氏空间 Ω 中的 2 个矢量场

$$\upsilon = J \nabla H、\eta = \frac{\nabla H}{\langle \nabla H, \nabla H \rangle}, \tag{5}$$

其中，$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ 是辛矩阵(Symplectic matrix)，$\langle \cdot, \cdot \rangle$是 Ω 中通常的欧氏乘积. 对于 Ω 中的一个矢量场 X，令 g_X^t 表示相关的流. 于是，g_υ^t 是哈密顿流和 g_η^e 是规范化的能量梯度流. 因 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}e} H[g_\eta^e(x)] = \langle \nabla H(x), \eta(x) \rangle = 1$，故有

$$H[g_\eta^e(x)] = e + H(x). \tag{6}$$

假设沿梯度流方向没有奇异点，即假设在能量面上处处有▽H≠0，则映射

$$g_\eta^e : A(E) \to A(E+e) \tag{7}$$

是在能量面之间微分同胚的.

刘维测度 m 和能量是在哈密顿流下保持不变的，即 $m(g_\upsilon^t \mathrm{d}x) = m(\mathrm{d}x)$ 和 $H[g_\upsilon^t(x)] = H(x)$. 随之，在考虑能量梯度流下一个无限小流盒 $g_\eta^{[0,\varepsilon]}\mathrm{d}A$ 和测量这一流盒的体积时，可在能量面 $A(E)$上定义一个测度 μ

$$\mu(\mathrm{d}A) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{\varepsilon} m\{g_\eta^{[0,\varepsilon]}\mathrm{d}A\}, \tag{8}$$

它也是在 g_υ^t 下不变的. 对于这个测度，有

$$e^{S(E)} = \int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A), \tag{9}$$

流 g_η^e 是可自交换的. 因此，可通过(7)式，将流盒 $g_\eta^{[0,\varepsilon]}\mathrm{d}A(E)$ 映射为流盒 $g_\eta^{[0,\varepsilon]}\mathrm{d}A(E+e)$. 而且，无限小面元的加权面积之间的比率正好成为体积元之间的比率，它不是别的，正是映射的雅可比行列式(Jacobian)：

$$\frac{\mu[\mathrm{d}A(E+e)]}{\mu[\mathrm{d}A(E)]} = \det\left(\frac{\partial g_\eta^e}{\partial x} \right) = 1 + e \nabla \cdot \eta + O(e^2)$$

(展开到 e 的第 1 阶). 定义 $\Phi = \nabla \cdot \eta$(即(4)式)，则得到关系

$$\int_{A(E+e)} \mu(\mathrm{d}A) = \int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)(1 + e\Phi + \cdots). \tag{10}$$

对(9)式左边求导得

$$\frac{\mathrm{d}e^{S(E)}}{\mathrm{d}E} = \frac{\mathrm{d}e^{S(E)}}{\mathrm{d}S} \frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}E} = e^{S(E)} \frac{1}{T(E)} = \frac{\int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)}{T(E)}, \tag{11}$$

上式中已利用了温度计算式(1)式. 对(9)式右边微商，并利用(10)式，得

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E} \int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A) \\ &\equiv \lim_{e \to 0} \frac{\int_{A(E+e)} \mu(\mathrm{d}A) - \int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)}{e} \\ &= \lim_{e \to 0} \frac{\int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)(e\Phi + \cdots)}{e} \\ &\approx \int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)\Phi. \end{aligned} \tag{12}$$

由等式(11)与(12)相等，得

$$\frac{1}{T(E)} = \frac{\int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)\Phi}{\int_{A(E)} \mu(\mathrm{d}A)}. \tag{13}$$

如果哈密顿流对于能量面的刘维测度 μ 是各态历经的，则根据 Birkhoff 定理[21]，对于 μ (等价于 $m|_{A(E)}$)——在哈密顿流下几乎每一

个轨迹，有

$$\frac{\int_{A(E)}\mu(\mathrm{d}A)\Phi}{\int_{A(E)}\mu(\mathrm{d}A)} = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_o^t \mathrm{d}\tau\Phi[x(\tau)]. \tag{14}$$

于是，得到了(3)式，即证明了上述定理.

值得说明的是，由于测度和能量是正则不变的. 因此，从等式(1)和(2)得知，温度和 Φ 的时间平均也是正则不变的. 这个定理还能被容易地推广到非黎曼结构的任意辛流形上[20].

从上述定理可以看出，温度不象熵，它是系统的一个内在动力学特征量，它能作为一个动力学平均被计算出. 温度的这一动力学计算方法，不仅给出了确定温度的一种有效的计算途径，而且也提供了动力学系统理论和哈密顿系统的统计力学之间的内在联系. 在动力学模拟研究中，用这一方法来计算系统的温度是很方便的.

参　考　文　献

1 Jaqaman H, Mekjian A Z, Zamick L. Nuclear Condensation. Phys Rev, 1983, C27: 2782～2791; Liquid-gas Phase Transitions in Finite Nuclear Matter. Phys Rev, 1984, C29: 2067～2074; Goodman A L, Kapusta J I, Mekjian A Z. Liquid-gas Phase Instabilities and Droplet Formation in Nuclear Reactions. Phys Rev, 1984, C30: 851～865

2 Finn J E. Nuclear Fragment Mass Yield from High-energy Proton-nucleus Interactions. Phys Rev Lett, 1982, 49: 1321～1325; Hirsch A S, Bujak A, Finn J E *et al*. Experimental Results from High-energy Proton-nucleus Interactions, Critical Phenomena, and the Thermal Liquid Drop Model of Fragment Production. Phys Rev, 1984, C29: 508～525

3 Sa B H, Gross D H E. Finite-size Effects and Statistical Approach to Nuclear Fragmentation Processes: Monte Carlo Simulation. Nucl Phys, 1985, A437: 643～668

4 Bondorf J. Statistical Multifragmentation of Nuclei (Ⅱ). Apprication of the Model to Finite Nuclei Disassembly. Nucl Phys, 1985, A444: 460～476

5 Zheng Y M. On the Charge Dispersion in High-energy Proton-xenon Collisions. Phys Lett, 1987, B194: 183～186; Gross D H E, Zheng Y M, Massmann H. New Kind of Phase Transition in Hot Nuclei. Phys Lett, 1988, B200: 397～400

6 Ighezou F, Ngô H, Ngô C *et al*. Scaling Analysis of Multifragmentation with a Restructured Aggregation Model. Phys Lett, 1989, B233: 48～53

7 Zheng Y M, Ngô H, Ngô C *et al*. Scaling Properties of Nuclear Multifragmentation. Chinese Science Bulletin, 1991, 36: 1162～1166

8 Wada R, Fabris D, Hagel K *et al*. Temperatures and Excitation Energies of Hot Nuclei in Reactions of ^{32}S+Ag and ^{16}O+Ag at 30 MeV/nucleon. Phys Rev, 1989, C39: 497～515

9 Pochodzalla J. Probing the Nuclear Liquid-gas Phase Transition. Phys Rev Lett, 1995, 75(6～10): 1040～1043

10 Natowitz J B, Hagel K, Wada R *et al*. Limiting Temperatures of Neutron Rich Nuclei: A Possible Interpretation of Data from Isotope Yield Ratios. Phys Rev, 1995, C52(5～6): R2322～R2325

11 Moretto L G. Comment on "Probing the Nuclear Liquid-gas Phase Transition". Phys Rev Lett, 1996, 76: 2822

12 Tsang M B. Cross Comparisons of Nuclear Temperatures Determined from Excited State Populations and Isotope Yields. Phys Rev, 1996, C53: R1057～R1060

13 Zheng Yuming, Sa Benhao, Wang Hui. Properties of Very Hot Nuclei from Heavy-ion Reactions at Intermediate Energies. Chin Phys Lett, 1997, 14: 266～269

14 Majka Z. Quantum Statistical Thermodynamics of Hot Finite Nuclear Systems: Temperatures and Isotopic Yield Ratios. Phys Rev, 1997, C55: 2991～2997

15 Schnack J, Feldmeier H. The Nuclear Liquid-gas Phase Transition Within Fermionic Molecular Dynamics. Phys Lett, 1997, B409: 6～10

16 王　辉，郑玉明，萨本豪等. 非完全熔合碎裂模型与核液-气相变. 高能物理与核物理，1997，21：44～50

17 Wada R. Excitation Energies and Temperatures of Hot Nuclei Produced in the Reactions of ^{63}Cu+^{197}Au at 35 A MeV. Phys Rev, 1997, C55: 227～243

18 De J N, Das Gupta S, Shlomo S *et al*. Caloric Curve for finite Nuclei in Thomas-Fermi Theory. Phye Rev, 1997, C55: R1614～R1644

19 Das C B, Satpatty L. Caloric Curve in Au+Au Collisions. Phys Rev, 1998, C57: R35～R38

20 Rugh H H. Dynamical Approach to Temperature. Phys Rev lett，1997，78：772～774

21 Ruelle D. Statistical Meckanics：Rigorous Results，Addison-Wesley，New York，1989

Dynamical Calculation of Nuclear Temperature

Zheng Yuming

(*China Institute of Atomic Energy*，　*Beijing*　102413)

Abstract　A new dynamical approach for measuring the temperature of a Hamiltonian dynamical system in the microcanonical ensemble of thermodynamics is presented. It shows that under the hypothesis of ergodicity the temperature can be computed as a time average of the function，$\nabla \cdot (\nabla H / \| \nabla H \|^2)$，on the energy surface. This method not only yields an efficient computational approach for determining the temperature，but also provides an intrinsic link between dynamical system theory and the statistical mechanics of Hamiltonian system.

Key words　nuclear temperature　ergodicity　dynamical average

(上接第 197 页)

of hot nuclei is presented. The critical temperature of the phase transition and its dependence on size and asymmetry of nuclear matter and Coulomb interaction are discussed. The limiting temperatures of hot nuclei calculated with various nuclear forces or models and experimental results are compared.

Key words　nuclear matter　liquid-gas phase transition　stability of hot nuclei