



手征三体力与原子核第一性原理研究

马远卓, 李健国, 孙中浩, 胡柏山, 张爽, 许甫荣*

北京大学物理学院, 核物理与核技术国家重点实验室, 北京 100871

*联系人, E-mail: frxu@pku.edu.cn

收稿日期: 2022-11-11; 接受日期: 2023-01-06; 网络出版日期: 2023-09-14

国家重点基础研究发展计划(编号: 2018YFA0404401)、国家自然科学基金(编号: 11835001, 11921006, 12035001, 12105106, 12205340)、中国博士后自然科学基金(编号: BX20200136, 2020M682747)和北京大学核物理与核技术国家重点实验室(编号: NPT2020KFY13)资助项目

摘要 从第一性原理(*ab initio*)出发研究原子核已经成为当今理论核物理领域的前沿方向, 它不仅能够提供高精度的计算结果与可靠的理论预言, 而且能够在有效场论的基础上建立起与底层基本理论(量子色动力学-QCD)联系的桥梁. 近年来, 随着手征核力与量子多体理论的发展与完善, 以及新一代超级计算机的不断涌现, 原子核第一性原理研究取得了令人瞩目的成就. 一方面, 在手征有效场论框架下构建起来的核力能够高精度地复现核子-核子散射数据; 另一方面, 先进的量子多体方法已经能够将第一性原理计算的边界从轻核区推向中重质量核区、从深束缚的稳定核推向滴线区的不稳定核. 最近10余年, 我们在手征核力和量子多体方法两个方面开展了深入的研究, 特别是, 手征三体力与连续谱耦合效应. 作为手征核力的重要成分, 三体力对有限核与核物质的理论描述有着广泛和重要的影响, 而连续谱效应则对滴线区原子核的理论计算非常关键. 本文综述了我们在手征三体力和含连续谱第一性原理研究方面所取得的进展.

关键词 第一性原理, 手征三体力, 共振态, 连续谱, 滴线区原子核

PACS: 21.10.-k, 21.10.Dr, 21.60.De, 21.30.-x, 21.45.Ff

1 引言

原子核是一个令人着迷的量子世界. 从宇宙大爆炸早期合成的轻质量核到有近10 km半径的中子星, 它不仅拥有宽广的尺度, 而且存在诸如自束缚、衰变、共振、核子发射等丰富的物理现象. 同时由于存在 β 衰变、中微子与核散射、无中微子双 β 衰变等涉核基本过程, 原子核也已成为研究基本物理强有力的探针. 然而基于强基本相互作用的核力问题与核子间复

杂的多体关联问题尚未很好解决, 核物理研究充满了困难与挑战. 从基本原理出发, 认识、理解和预测原子核中纷繁复杂的结构和动力学特性便成为核物理学界长久以来的美好愿景.

对原子核的研究最早可以追溯到100多年前卢瑟福 α 粒子背散射实验. 直到今天, 原子核这个复杂体系仍存留许多未被解答的重要问题, 例如: 宇宙中比铁重的元素是如何形成的? 元素周期表的尽头在哪儿? 核素版图丰中子和丰质子滴线处的新物理等. 这都需要

引用格式: 马远卓, 李健国, 孙中浩, 等. 手征三体力与原子核第一性原理研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2023, 53: 100008
Ma Y Z, Li J G, Sun Z H, et al. Chiral three-body forces and nuclear first-principles studies (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2023, 53: 100008, doi: 10.1360/SSPMA-2022-0432

实验和理论的不断发展来寻找答案.

核物理百余年的发展, 理论研究大多还是建立在唯象模型基础之上. 20世纪30年代的液滴模型开启了核理论的定量描述, 但这是宏观的和唯象的. 即使到现在, 大部分核理论模型仍是唯象的, 需要使用核结构或核反应实验数据确定其模型参数. 当把这样的模型外推到未知核区时, 其可靠性往往不能自证, 给出的物理机制也很受限制. 因此, 人们迫切希望能够从核物理第一性原理(*ab initio*)出发来计算研究原子核. 由于没有额外参数的依赖, *ab initio*能够提供更加可信的预言, 也能够更好地建立起与底层理论的联系. 在这之中最为关键的两个问题是: 基本核力和严格的量子多体方法.

核力的发展伴随着人们对物质层次的逐步认识. 从20世纪30年代的汤川秀树(H. Yukawa)^[1] π 介子交换模型开始, 对核力的描述经历了单 π 介子、多 π 介子、重介子、单玻色子等过程. 20世纪70年代量子色动力学(QCD)的发现, 使人们认识到核力是强相互作用露在强子外的剩余相互作用. 但由于QCD在低能标附近的非微扰特性, 核力难以直接导出. 直到20世纪90年代初, 史蒂芬-温伯格(S. Weinberg)^[2-5]开创性地将有效场论思想引入到低能QCD, 才为核力的发展指明了方向. 在有效场论的框架下, 核力的构建需要遵从低能QCD对称性(尤其是手征对称性及其破缺)的要求. 基于此构建起的核子间相互作用称为手征核力. 它的精度在逐阶展开的过程中会逐渐提高, 同时多体力也会随之自然出现, 例如三体力在次次领头阶(NNLO)出现. 高精度的手征核力为原子核第一性原理研究奠定了坚实的基础.

原子核是一个复杂的量子多体体系. 高精度的真实核力是求解核多体问题的关键. 除了核力, 严格处理原子核量子多体问题是又一个关键. 与凝聚态物理和计算化学中由电磁相互作用主导的多体关联不同, 核力的短程强排斥和长程吸引给核物理理论计算带来更大的挑战. 除了理论方法上的困难, 核物理第一性原理研究往往需要巨大的计算资源, 这也阻碍它早期的发展.

在最近十多年间, 学界在核力和量子多体方法上的探索取得了许多瞩目的进展. 一方面, 自20世纪末开始, 手征核力在Weinberg^[3,4]、van Kolck等人^[6-8]、Entem和Machleidt^[9,10]、Epelbaum等人^[11]的发展下, 两

体力在次次次领头阶(N^3LO)已较为成熟. Machleidt与合作者^[12]的最新工作已经将两体力构建到 N^4LO . Navrátil等人^[13]、Roth等人^[14]通过将复杂的NNLO三体力引入到轻核的多体计算中, 解释了诸如 ^{10}B 基态自旋等若干困扰学界已久的难题. 另一方面, 随着超级计算机算力的飞速提升, 原子核量子多体方法在近些年得到了快速的发展. 较早出现的无芯壳模型(NCSM)^[15]与量子蒙特卡罗(QMC)^[16]能够对较轻的原子核进行精确的描述, 由于其计算量随核子数呈指数增加, 难以触及更重的原子核. 现实核力(Realistic Nuclear Forces)壳模型(SM)^[17,18]通过多体微扰的方法构建出模型空间哈密顿量, 在保证精度的同时有效地降低了计算量, 拓展了其理论描述的能力. 非微扰的Coupled Cluster^[19]和IM-SRG^[20]将满壳或半满壳核作为参考态, 以此能够对中重核进行理论计算与预言.

近些年来, 我们在手征核力和量子多体方法方面开展了系列的工作^[21-40]. 本文对这两个方面的工作进行综述. 第2节, 概述在手征核力, 尤其是三体力方面的进展. 第3节, 介绍我们发展起来的、含连续谱效应的第一性原理方法及其应用. 第4节, 选取了三个滴线区原子核体系进行计算和研究, 并讨论三体力与连续谱的贡献和影响. 最后第5节是总结与展望.

2 手征核力与手征三体矩阵元

核力研究始终是核物理领域的关键问题. 最为理想情况下, 我们希望用底层基本理论(QCD)来构建核力. 然而核子间的转移动量远小于QCD特征能标, 核力难以直接从QCD导出. 这一难题的转机出现在Weinberg等人^[2-5]将有效场论(EFT)引入到核物理中. EFT的显著特点是能够在对称性的基础上建立高-低两个能标下的物理关联. 在考虑QCD在低能标下的手征对称性及其破缺(显式破缺与自发破缺)后, 手征有效场论可以将QCD动力学中高动量部分“编码”到低能耦合常数(Low Energy Constants-LECs)中, 并以核子和 π 介子为自由度构建核子间的相互作用. 当前, 这些LECs大多是由基于核子-核子散射相移实验数据确定的. 期望在不远的将来, LECs可以从格点QCD的计算中直接抽取, 这也将完成从基本理论到宏观世界的最后一块拼图.

在手征有效场论框架下, 拉氏量将按照重要性

$[Q/\Lambda]^v$ 被有机组织起来^[4,10], 其中高动量 $\Lambda \sim 1 \text{ GeV}$ 为手征对称性自发破缺(或强子)能标, 低动量 Q 为核子转移动量(或为 π 介子的质量), v 是微扰展开的阶数. 核力在逐阶展开过程中精度会显著提高, 同时多体力也会自然出现. 手征两体力到目前为止已发展得较为成熟, 在次次领头阶($N^3\text{LO}$)已经能高精度地复现实验散射相移^[9]. 这样的两体力已经被广泛应用到原子核第一性原理计算. 手征三体力由于其复杂的张量结构, 直到近些年来才被发展起来, 并用到核多体计算. 目前为止的研究表明, 手征三体力对一些核结构和反应的理解非常关键, 例如 ^{10}B 基态自旋、核子-氘核反应中的 A_1 困惑及核物质饱和性等问题.

手征三体力首次出现在次次领头阶(NNLO), 包含两 π 交换项、单 π 交换项和接触项

$$\begin{aligned} v_{3N}^{2\pi} &= \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{g_A^2}{8f_\pi^2} \sum_{i \neq j \neq k} \frac{(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{q}_i)(\boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{q}_j)}{(q_i^2 + M_\pi^2)(q_j^2 + M_\pi^2)} F_{ijk}^{\alpha\beta} \boldsymbol{\tau}_i^\alpha \boldsymbol{\tau}_j^\beta, \\ v_{3N}^{1\pi} &= \frac{-1}{(2\pi)^6} \frac{g_A c_D}{8f_\pi^4 \Lambda_\chi} \sum_{i \neq j \neq k} \frac{\boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{q}_j}{q_j^2 + M_\pi^2} (\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j)(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{q}_j), \\ v_{3N}^{\text{cont}} &= \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{c_E}{2f_\pi^4 \Lambda_\chi} \sum_{j \neq k} \boldsymbol{\tau}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_k, \end{aligned} \quad (1)$$

其中函数 F 为

$$F_{ijk}^{\alpha\beta} = \delta^{\alpha\beta} \left[-\frac{4c_1 m_\pi^2}{f_\pi^2} + \frac{2c_3}{f_\pi^2} \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{q}_j \right] + \frac{c_4}{f_\pi^2} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \boldsymbol{\tau}_k^\gamma \boldsymbol{\sigma}_k \cdot [\mathbf{q}_i \times \mathbf{q}_j]. \quad (2)$$

对应的费曼图, 如图1所示.

其中两 π 交换项中的 π -N散射顶点与两体力中一致. 单 π 交换项与接触项中存在两个新的低能耦合常数(c_D 与 c_E), 它们需要通过拟合三体或少体可观测量来确定.

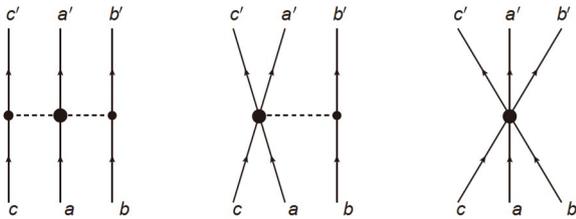


图1 NNLO三体力费曼图, 从左到右为两 π 交换项、单 π 交换项与接触项

Figure 1 Diagrams of NNLO three-body force, including two- π exchange term (left), one- π exchange term (middle) and contact term (right).

为了在原子核多体计算中考虑三体力, 我们把手征三体力展开到谐振子基下以得到三体相互作用矩阵元. 概括来说需要三个步骤来实现: (1) 将三粒子JT-coupled谐振子基转换为Jacobi-HO基, 以此分离质心运动和内禀相对运动; (2) 通过对角化反对称算符, 将Jacobi-HO基进行反对称化; (3) 推导并计算NNLO三体算符在Jacobi-HO基下的相互作用矩阵元. 最终反对称化的三体相互作用矩阵元有如下结构:

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{a}' \tilde{b}' \tilde{c}'; J'_{ab} J'_{ab} T' | V | \tilde{a} \tilde{b} \tilde{c}; J_{ab} J_{ab} T \rangle \\ &= 6 \sum_{N_{12}, N_3, \alpha} \sum_{N_0 L_0} \delta_{T_{ab}} T_{12} \delta_{T'_{ab}} \\ & \quad N'_{12}, N'_3, \alpha' \\ & \quad \times T'_{12} T'_{ab} \tilde{a}' \tilde{b}' \tilde{c}' J'_{ij} J'_{ij} T'_{ab} \tilde{a} \tilde{b} \tilde{c} J_{ab} J_{ab} \\ & \quad \times M'_{N'_{12} N'_3 \alpha'} M_{N_{12} N_3 \alpha} \\ & \quad \times \langle N' i' J'_{12,3} T', N_0 L_0; J' | V | N i J_{12,3} T, N_0 L_0; J \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

在上式中, 系数 T 包含了角动量耦合与Jacobi坐标的转换, 系数 M 是由对角化反对称算符获得, 最后一行代表了在Jacobi坐标下求解的三体矩阵元, 更多的细节请参考文献[41,42]. 值得一提的是, 相关公式的推导与程序实现非常复杂, 经历了近三年的摸索和耕耘, 我们最终建立了计算三体矩阵元的方案并发展出自主的跨节点、高性能计算程序.

在得到手征三体矩阵元后, 我们采用normal-ordering方法将三体力重排成一体、二体和剩余三体项. 在价粒子不是很多情况下, 剩余三体项的影响很小^[43]. 为了减少模型空间和计算工作量, 在多体计算中我们忽略剩余三体项. 为了验证三体力与多体方法的可靠性, 我们采用现实核力壳模型对较轻的 p 壳区原子核进行计算^[42], 其结果与实验数据及NCSM结果相一致. 之后, 我们进一步研究了更重质量的 fp 壳原子核. 计算表明三体力能够显著改善计算结果, 同时三体力的单极部分对壳效应解释非常重要, 更多讨论请参考文献[26].

3 含连续谱的第一性原理方法

原子核是自束缚量子体系, 但当当中子数或质子数不断增加时, 原子核的束缚性会变弱, 直至不束缚. 原

子核存在的极限称为滴线, 滴线外的原子核是不束缚的. 近滴线外的原子核可以以共振形式出现. 在滴线附近区域, 核子与周围连续谱的耦合可以很强, 因此多体计算中需要考虑与连续谱的耦合作用.

目前, 大部分第一性原理方法都是在没有连续谱耦合的情况下发展的, 这实际上限制了对弱束缚和不束缚核的真实描述. 连续谱波函数与束缚态波函数在远处的渐进行为有着本质上的差别, 这使理论计算弱束缚原子核充满了挑战. 因此发展含连续谱的第一性原理方法, 是研究滴线区原子核的重要手段. 本节介绍近些年间我们发展起来的、能够自洽考虑连续谱效应的第一性原理方法.

3.1 现实核力Gamow壳模型

通常的理论方法大多选择使用由无限深势阱产生的、局域的谐振子基作为希尔伯特空间, 因此难以对非局域的共振态和连续态波函数进行有效描述. 一种自洽且优雅的解决方案是将谐振子基替换为Gamow-Berggren基^[44]. Gamow-Berggren基是将薛定谔方程的解推广到复动量平面, 形成一组能同时包含束缚态、共振态以及非束缚散射连续态的完备基矢^[45-50], 如图2所示. 其中Gamow态(共振态)是薛定谔方程广义本征态, 对应复本征值 $e = e_0 - i\gamma/2$, 其中 γ 表示共振宽度. 这些能量本征值对应散射矩阵(S-matrix)在复能量平面位于正实轴以下的极点(Pole).

质心系内禀多体哈密顿量可以分解为非微扰的 H_0 与微扰的 H_1 ,

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i<j} \frac{(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2}{2mA} + \bar{V}_{NN} + \bar{V}_{3N} \\ &= \sum_{i=1}^A \left(\frac{p_i^2}{2m} + U \right) + \sum_{i<j}^A \left(V_{NN}^{(ij)} - U - \frac{p_i^2}{2mA} - \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{mA} \right) \\ &\quad + \sum_{i<j<k}^A V_{3N}^{(ijk)}, \end{aligned} \quad (4)$$

这里 V_{NN} 与 V_{3N} 分别代表两体和三体相互作用, $H_0 = \sum_{i=1}^A \left(\frac{p_i^2}{2m} + U \right)$ 代表了独立粒子的运动, 其中单粒子势 U 可选为Woods-Saxon或Hartree-Fock. 为了得到Gamow-Berggren基, 我们在复动量空间求解包含势 U 的单粒子运动方程. 借助于overlap方法^[22], 多体哈密顿

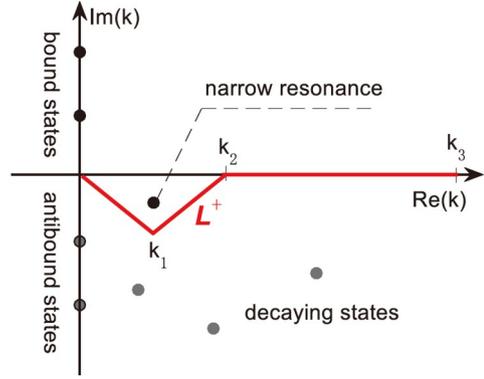


图2 (网络版彩图)复空间Gamow-Berggren基矢空间示意图^[22]

Figure 2 (Color online) Schematic Gamow-Berggren basis in complex-k plan [22].

量将被转换到Gamow-Berggren基下. 随后, 在这组单粒子基下, 我们选定合适的包含共振态以及连续谱的模型空间. 此时, 含连续谱的壳模型空间是非简并的, 所以不能用通常的单壳层多体微扰(MBPT)构建模型空间的有效哈密顿量. 我们将跨壳的扩展MBPT方法(又称为EKK方法)^[51]拓展到复空间, 进而构建含共振态和连续态分波的模型空间有效哈密顿量

$$H_{\text{eff}}^{(n)} = PH_0P + \bar{Q}(E) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{d^k \bar{Q}(E)}{dE^k} \{H_{\text{eff}}^{(n-1)} - E\}^k, \quad (5)$$

其中 \bar{Q} -box定义为

$$\bar{Q}(E) = PH_1P + PH_1Q \frac{1}{E - QH_0Q} QH_1P. \quad (6)$$

在求解 \bar{Q} -box过程中, 需要对分母中的 QH_0Q 进行微扰展开. 当微扰展开到二阶时, 包含有14个费曼图表示(其中5个单体项、9个两体项)的关联过程, 到三阶又会新增135个^[18]. 由于复动量模型空间的非简并性以及包含连续谱后空间维度的快速增长, Gamow基下的三阶微扰计算量巨大. 考虑到三阶贡献对能谱影响较小, 在实际计算中我们通常截断到两体的二阶与单体的三阶水平^[22,30]. 在得到复模型空间有效哈密顿量后, 通过采用Lanczos或Jacobi-Divison^[52,53]稀疏矩阵对角化方法将其对角化得到本征能量与本征波函数.

我们首先应用此方法计算了丰中子侧的氧同位素链^[22]. 现实核力Gamow壳模型具有的一个显著优势是它不仅能够得到能量信息, 也能给出共振宽度信息. 在图3中, CGSM是现实核力Gamow壳模型的计算结果.

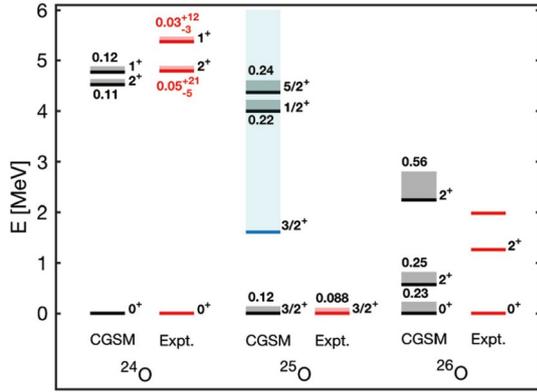


图3 (网络版彩图)现实核力Gamow壳模型计算 $^{24-26}\text{O}$ 能谱与共振宽度(阴影区域), 并与实验结果的比较^[22]

Figure 3 (Color online) Calculated spectra and decay width (shade regions) of $^{24-26}\text{O}$, compared with available experimental data ^[22].

可以看出, 计算结果不仅在能级位置与已有实验数据相一致, 共振宽度也与实验符合较好. 我们发展的现实核力Gamow壳模型已经成为了研究弱束缚原子核新的强有力工具.

3.2 无芯Gamow壳模型

第一性原理无芯壳模型是研究轻核区原子核高精度理论方法, 在 β 稳定线附近的轻核研究中取得了巨大的成功^[15]. 在无芯壳模型中, 由于所有核子均参与组态构建, 所以它的模型维度通常会非常高, 难以对较重的原子核进行计算. 在当前的超算能力下, 无芯壳模型也只能计算 ^{16}O 及更轻的原子核. 另外, 无芯壳模型一般采用局域的谐振子基矢, 这种谐振子无限深势阱不能包含连续态效应, 无法描述非束缚性质. 为了计算轻质量弱束缚原子核, 我们发展了复动量空间的无芯Gamow壳模型(NCGSM)^[27,34].

由于计算机能力的限制, 复空间的无芯Gamow壳模型目前只能计算非常轻的核体系, 如 ^5He ^[54]. 作为无芯Gamow壳模型的一个工作亮点, 我们计算研究了无质子的纯中子体系, 如四中子(4n)体系. 4n是一个非束缚体系. 最近几十年国际上理论和实验都给予了极大的关注. 对于这样一个非束缚纯中子体系, 理论计算对核力和量子多体关联两个方面均提出了极其高的要求. 理论计算不仅要给出非束缚4n体系的共振能量, 还要给出其共振宽度(即共振寿命). 我们用手征有效场论 N^3LO 核力描述中子间的相互作用, 用含共振连续谱自由度的无芯Gamow壳模型处理量子多体关联. 为了

包含更完备的多体关联, 我们采用了Gamow自然基.

在自然基NCGSM计算过程中, 我们首先在Gamow-Berggren基矢下对壳模型组态空间做一个粗略的截断(比如在构建壳模型组态时只容许两个或三个粒子自由激发), 并在此模型空间下先做一次NCGSM计算. 之后, 利用得到的单体密度矩阵的本征态构建新的完备基矢. 自然基中每条轨道的单粒子波函数是许多不同Gamow-Berggren基矢单粒子轨道波函数的线性叠加, 它能够给出更接近真实的弱束缚单粒子波函数, 因此称之为自然基. 之后, 将Gamow-Berggren基下的哈密顿量转化到自然基下, 在无任何截断的模型空间中再次进行NCGSM计算. 由于自然基的使用, NCGSM更完整地包含了量子多体关联与连续谱耦合效应, 得到的物理结果也更加可靠.

我们用自然基NCGSM计算预言的四中子态约有2.6 MeV的共振能量和2.3 MeV的共振宽度^[27]. 如图4所示, 这个共振能量明显高于2016年RIKEN的实验^[55]和无芯壳模型计算^[56,57]结果. 2016年的RIKEN实验后, 科学家们一直没有放弃实验继续寻找四中子态. 2022年实验取得重大突破, 成功地产生四中子体系, 并精确测量了四中子态的共振能量与宽度^[58]. 如图4所示, 在实验误差范围内, 无芯Gamow壳模型理论预言与实验结果高度一致.

3.3 复动量空间Gamow Hartree-Fock

含共振态和连续谱的Gamow-Berggren基一般可以通过求解有限深度的Woods-Saxon势阱得到^[46]. 为了使计算更自治, 我们也可以从真实的核子-核子相互作用本身出发产生单粒子的Hartree-Fock (HF)势, 进而生成Gamow-Berggren HF基^[23,25,30]. 与在动量空间直接迭代求解HF势方法^[50]不同, 我们发展了一种新的生成Gamow Hartree-Fock基方法^[23]. 在这个方法中, 我们首先在谐振子基下迭代求解HF势 U_{HF} , 然后将其解析延拓到复动量空间求解本征值方程, 如下所示:

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \psi_{n|j_z}(k) + \int_{L^+} dk' k'^2 \langle k | U_{\text{HF}}^{(l,j_z)} | k' \rangle \psi_{n|j_z}(k') \\ & = E_n \psi_{n|j_z}(k), \end{aligned} \quad (7)$$

其中 L^+ 是一个包围共振态的复动量空间积分围道. 由此得到的单粒子波函数所组成的基矢空间称为Gamow Hartree-Fock基. Gamow Hartree-Fock基能够更自

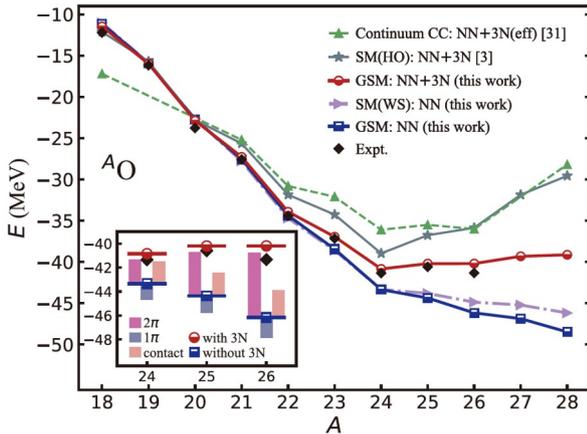


图5 (网络版彩图) 氧同位素链 $^{18-28}\text{O}$ 相对于 ^{16}O 的结合能理论计算与实验及其他计算的对比, 其中插图表示了三体力中不同成分的贡献^[31]

Figure 5 (Color online) Calculated $^{18-28}\text{O}$ ground-state energies with respect to the ^{16}O core, compared with experimental data and other calculations. Contributions from different components of 3NF are shown in the subfigure [31].

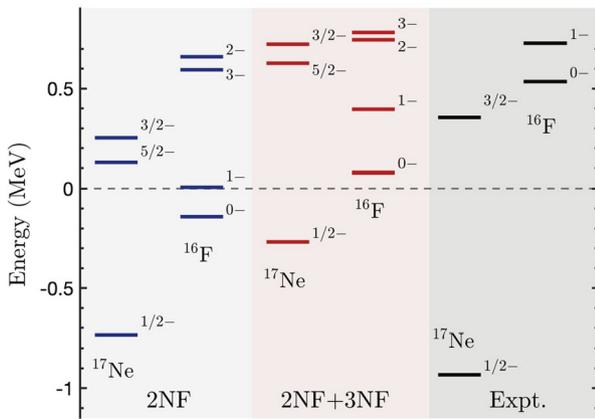


图6 (网络版彩图) ^{17}Ne 和 ^{16}F 的计算结果与实验数据相对于 ^{15}O 基态的能量^[32]

Figure 6 (Color online) Calculated spectra and experimental data of ^{17}Ne along with its isotope ^{16}F , with respect to ^{15}O [32].

与 ^{17}Ne 的结合能, 使 ^{17}Ne 保持束缚的同时 ^{16}F 非束缚. 因此三体力对于 ^{17}Ne 的Borromean结构形成至关重要.

由于 ^{17}Ne 可能存在晕结构, 我们计算了它的价核子密度分布, 如图7所示. 可以看到当考虑了连续谱效应后 ^{17}Ne 在较远的区域(大于10 fm)依然有明显的密度分布, 是晕结构存在的表征. 结合图6和7, 我们认为三体力与连续谱效应对于 ^{17}Ne 的结构有非常显著且不同的影响: 三体力对Borromean结构的形成至关重要, 而连续谱对于其晕结构的描述非常关键.

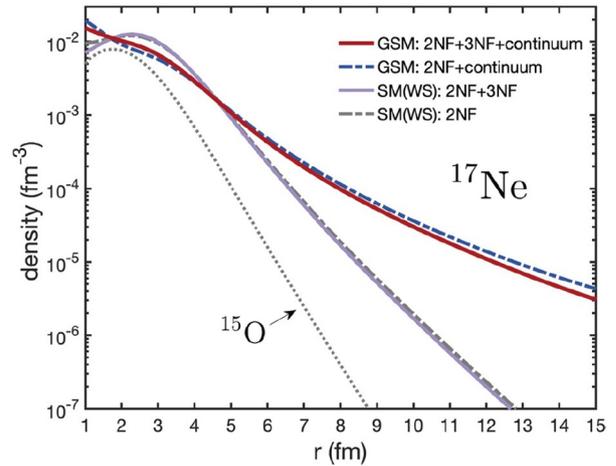


图7 (网络版彩图) ^{17}Ne 价核子密度分布计算结果^[32]

Figure 7 (Color online) Calculated valence particle density of ^{17}Ne [32].

4.3 滴线区原子核的镜像不对称

由于强相互作用的近似电荷无关性, 镜像核(质子数与中子数互换的两个原子核)的能级结构往往高度相似, 称为镜像对称性. 在极少数情况下, 这样的对称性会被破坏, 表现出的能谱间差异称为Thomas-Ehrmann shifts (TES)^[65,66]. 最近的一些研究表明, TES现象的成因不仅仅是质子间的库仑排斥所致, 连续谱效应也至关重要. $N=8$ 同中子素和 $Z=8$ 同位素提供了一个理想的讨论镜像对称性及镜像对称性破坏的场所, 实验观测到的 ^{19}Na 的 $1/2^+$ 态^[67]与 ^{19}O 的具有显著的镜像不对称现象, 以及 ^{18}Ne 与 ^{18}O 的 3^+ 态存在较大的镜像能差异. 为此, 我们从手征两体和三体力出发, 基于Gamow Hartree-Fock基矢, 构建出 $sdpf_{7/2}$ 模型空间相互作用, 研究了 ^{16}O 的丰中子同位素 $^{17-28}\text{O}$ 及其镜像对称的丰质子同中子素 ^{17}F - ^{22}Si ^[39].

图8中展示了三体力 and 连续谱耦合对 $A=19$ 原子核间镜像不对称性的影响. 其中“NN”和“3N”分别指计算中只使用两体力和包含三体力, 图中虚线代表不含连续谱耦合的实空间计算结果, 实线指的是GSM计算结果, 阴影表示具有TES现象的 $1/2^+$ 共振态的共振宽度. 可以看出, 只使用两体力的计算给出与实验不符的基态能级顺序, 含三体力的计算结果与实验一致.

为了进一步理解 $A=19$ 原子核的 $1/2^+$ 态中的TES现象, 我们首先排除库仑力计算了 ^{19}Na 的激发能谱. 从图8中看到, 计算得到的 ^{19}Na 和 ^{19}O 的激发能谱间对称

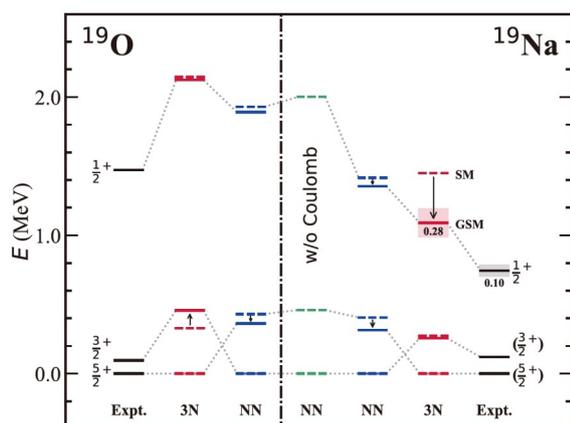


图 8 (网络版彩图) $A=19$ 的镜像核 ^{19}O 和 ^{19}Na 的激发能谱^[39]
Figure 8. (Color online) Excitation spectra of $A=19$ mirror partners, ^{19}O and ^{19}Na [39].

性保持较好, 也即来自手征核力 $N^3\text{LO}$ 中的 CSB 和 CIB 效应^[10] 的影响很小. 当包含库仑力的贡献时, ^{19}Na 的 $5/2^+$ 和 $3/2^+$ 态几乎保持不变, 而 $1/2^+$ 态激发能显著地降低. 计算给出 ^{19}Na 的 $1/2^+$ 态几乎由一个纯的 $(0d5/2)^2 (1s1/2)^1$ 组态构成. 由于 s 分波没有离心位垒, 所以 $1s1/2$ 轨道的波函数相比于其他轨道更容易“泄漏”出去, 因此导致了占据 $1s1/2$ 轨道的 $1/2^+$ 态的库仑能贡献相比于 $5/2^+$ 态和 $3/2^+$ 态较小, 最终使得能谱位置下降. 此外, 由于谐振子基的局域特性, 它对波函数的远程渐近行为处理不够精确, 而含三体力的 Gamow Hartree-Fock 基能够准确地处理共振态和散射连续态远程渐近行为.

在考虑连续态耦合后, 含三体力的 GSM 计算的 ^{19}Na 中 $1/2^+$ 态进一步下降, 并且给出 $1/2^+$ 态为共振态, 共振宽度为 0.28 MeV, 这与实验给出的 $1/2^+$ 态的共振宽度 0.1 MeV 相当吻合. 计算表明, 三体力可以显著改善 SM 计算对实验的描述. 然而, 要再现 ^{19}Na 中 $1/2^+$ 的共振特性和 TES 现象, 严格处理单粒子波函数的渐近行为及其与散射连续谱的耦合起着至关重要的作用. 因此在弱束缚和非束缚原子核奇特现象的描述中, 三体力 and 连续态耦合的联合效应至关重要.

5 结论与展望

第一性原理计算是当前研究原子核结构与反应的先进理论工具. 十余年来, 我们在手征核力和量子多体方法两个方面取得了有国际影响力的系列成果. 通过发展复动量空间的手征三体核力和连续谱耦合作用, 使第一性原理计算能够触及滴线区域的弱束缚和不束缚原子核, 大大提升了第一性原理计算的能力, 能很好地描述滴线区核的共振和连续谱特性. 含三体力 and 共振连续谱的第一性原理 Gamow 壳模型方法在国际上极具特色, 已得到国际同行的高度认可.

原子核的世界复杂而奇妙, 新奇现象不断被发现, 存留的谜题仍有许多未被解答. 从第一性原理出发研究原子核, 不仅是揭开这些谜底的利器, 更架起了连接物质世界与基本理论间的桥梁. 发展原子核第一性原理研究也将拉开核物理高精度计算的新篇章.

参考文献

- 1 Yukawa H. On the interaction of elementary particles. *Proc Phys Math Soc Jap*, 1935, 17: 48
- 2 Weinberg S. Phenomenological Lagrangians. *Phys A-Stat Mech Its Appl*, 1979, 96: 327–340
- 3 Weinberg S. Effective chiral lagrangians for nucleon-pion interactions and nuclear forces. *Nucl Phys B*, 1991, 363: 3–18
- 4 Weinberg S. Nuclear forces from chiral lagrangians. *Phys Lett B*, 1990, 251: 288–292
- 5 Weinberg S. Three-body interactions among nucleons and pions. *Phys Lett B*, 1992, 295: 114–121
- 6 van Kolck U. Few-nucleon forces from chiral Lagrangians. *Phys Rev C*, 1994, 49: 2932–2941
- 7 van Kolck U, Rentmeester M C M, Friar J L, et al. Electromagnetic corrections to the one-pion-exchange potential. *Phys Rev Lett*, 1998, 80: 4386–4389
- 8 Hammer H W, König S, van Kolck U. Nuclear effective field theory: Status and perspectives. *Rev Mod Phys*, 2020, 92: 025004
- 9 Entem D R, Machleidt R. Chiral 2π exchange at fourth order and peripheral NN scattering. *Phys Rev C*, 2002, 66: 014002
- 10 Machleidt R, Entem D R. Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys Rep*, 2011, 503: 1–75
- 11 Epelbaum E, Hammer H W, Meißner U G. Modern theory of nuclear forces. *Rev Mod Phys*, 2009, 81: 1773–1825
- 12 Entem D R, Machleidt R, Nosyk Y. High-quality two-nucleon potentials up to fifth order of the chiral expansion. *Phys Rev C*, 2017, 96: 024004

- 13 Navrátil P, Gueorguiev V G, Vary J P, et al. Structure of $A=10$ –13 nuclei with two-plus three-nucleon interactions from chiral effective field theory. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 042501
- 14 Roth R, Langhammer J, Calci A, et al. Similarity-transformed chiral $NN+3N$ interactions for the *ab initio* description of ^{12}C and ^{16}O . *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 072501
- 15 Barrett B R, Navrátil P, Vary J P. *Ab initio* no core shell model. *Prog Particle Nucl Phys*, 2013, 69: 131–181
- 16 Carlson J, Gandolfi S, Pederiva F, et al. Quantum Monte Carlo methods for nuclear physics. *Rev Mod Phys*, 2015, 87: 1067–1118
- 17 Coraggio L, Covello A, Gargano A, et al. Shell-model calculations and realistic effective interactions. *Prog Particle Nucl Phys*, 2009, 62: 135–182
- 18 Coraggio L, Covello A, Gargano A, et al. Effective shell-model hamiltonians from realistic nucleon-nucleon potentials within a perturbative approach. *Ann Phys*, 2012, 327: 2125–2151
- 19 Hagen G, Papenbrock T, Hjorth-Jensen M, et al. Coupled-cluster computations of atomic nuclei. *Rep Prog Phys*, 2014, 77: 096302
- 20 Hergert H, Bogner S K, Morris T D, et al. The in-medium similarity renormalization group: A novel *ab initio* method for nuclei. *Phys Rep*, 2016, 621: 165–222
- 21 Sun Z H, Wu Q, Xu F R. Nuclear shell model in natural basis (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2016, 61: 2793–2799 [孙中浩, 吴强, 许甫荣. 原子核结构的自然基壳模型. 科学通报, 2016, 61: 2793–2799]
- 22 Sun Z H, Wu Q, Zhao Z H, et al. Resonance and continuum Gamow shell model with realistic nuclear forces. *Phys Lett B*, 2017, 769: 227–232
- 23 Wu Q, Xu F R. Hartree-Fock Gamow basis from realistic nuclear forces (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2018, 63: 2876–2882 [吴强, 许甫荣. 现实核力Hartree-Fock Gamow基矢计算. 科学通报, 2018, 63: 2876–2882]
- 24 Dai S J, Xu F R, Li J G, et al. Continuum effect in resonance spectra of neutron-rich oxygen isotopes. *Chin Phys C*, 2018, 42: 114106
- 25 Hu B S, Wu Q, Sun Z H, et al. *Ab initio* Gamow in-medium similarity renormalization group with resonance and continuum. *Phys Rev C*, 2019, 99: 061302
- 26 Ma Y Z, Coraggio L, De Angelis L, et al. Contribution of chiral three-body forces to the monopole component of the effective shell-model Hamiltonian. *Phys Rev C*, 2019, 100: 034324
- 27 Li J G, Michel N, Hu B S, et al. *Ab initio* no-core Gamow shell-model calculations of multineutron systems. *Phys Rev C*, 2019, 100: 054313
- 28 Geng Y F, Ma Y Z, Li J G, et al. Realistic Gamow shell-model calculations for neutron-rich carbon isotopes (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2019, 64: 2037–2042 [耿一方, 马远卓, 李健国, 等. 现实核力Gamow壳模型计算丰中子碳同位素. 科学通报, 2019, 64: 2037–2042]
- 29 Li J G, Hu B S, Wu Q, et al. Neutron-rich calcium isotopes within realistic Gamow shell model calculations with continuum coupling. *Phys Rev C*, 2020, 102: 034302
- 30 Hu B S, Wu Q, Li J G, et al. An *ab-initio* Gamow shell model approach with a core. *Phys Lett B*, 2020, 802: 135206
- 31 Ma Y Z, Xu F R, Coraggio L, et al. Chiral three-nucleon force and continuum for dripline nuclei and beyond. *Phys Lett B*, 2020, 802: 135257
- 32 Ma Y Z, Xu F R, Michel N, et al. Continuum and three-nucleon force in Borromean system: The ^{17}Ne case. *Phys Lett B*, 2020, 808: 135673
- 33 Li J G, Michel N, Zuo W, et al. Unbound spectra of neutron-rich oxygen isotopes predicted by the Gamow shell model. *Phys Rev C*, 2021, 103: 034305
- 34 Li J G, Michel N, Zuo W, et al. Resonances of $A=4$ $T=1$ isospin triplet states within the *ab initio* no-core Gamow shell model. *Phys Rev C*, 2021, 104: 024319
- 35 Hu B S, Ma Y Z, Li J G, et al. *Ab initio* calculations of nuclear systems (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2021, 66: 3570–3580 [胡柏山, 马远卓, 李健国, 等. 原子核的第一性原理计算. 科学通报, 2021, 66: 3570–3580]
- 36 Zhang S, Cheng Z H, Li J G, et al. *Ab initio* Gamow shell model with chiral three-nucleon force for ^{14}O isotones (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2022, 67: 4101–4107 [张爽, 程泽华, 李健国, 等. 含手征三体力的第一性原理Gamow壳模型计算 ^{14}O 同中子素. 科学通报, 2022, 67: 4101–4107]
- 37 Dai B, Li J G, Xu F R. The descriptions of rotational bands in ^{10}Be and ^{12}Be with shell-model calculations (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2021, 66: 3712–3718 [戴博, 李健国, 许甫荣. 壳模型研究 ^{10}Be 和 ^{12}Be 中的转动带结构. 科学通报, 2021, 66: 3712–3718]
- 38 Dai B, Li J G, Zhang S, et al. Effects of three-nucleon force on the low-lying states of ^{28}F and ^{29}Ne within *ab initio* calculations (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2021, 66: 3866–3872 [戴博, 李健国, 张爽, 等. 第一性原理研究三体力对 ^{28}F 和 ^{29}Ne 低激发谱的影响. 科学通报, 2021, 66: 3866–3872]
- 39 Zhang S, Ma Y Z, Li J G, et al. The roles of three-nucleon force and continuum coupling in mirror symmetry breaking of oxygen mass region.

- [Phys Lett B](#), 2022, 827: 136958
- 40 Geng Y F, Li J G, Ma Y Z, et al. Excitation spectra of the heaviest carbon isotopes investigated within the CD-Bonn Gamow shell model. [Phys Rev C](#), 2022, 106: 024304
- 41 Ma Y Z. Chiral Three-Body Force and Nuclear *Ab Initio* Calculations (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Beijing: Peking University, 2020 [马远卓. 手征有效三体力与原子核第一性原理计算. 博士学位论文. 北京: 北京大学, 2020]
- 42 Fukui T, De Angelis L, Ma Y Z, et al. Realistic shell-model calculations for p-shell nuclei including contributions of a chiral three-body force. [Phys Rev C](#), 2018, 98: 044305
- 43 Roth R, Binder S, Vobig K, et al. Medium-mass nuclei with normal-ordered chiral $NN+3N$ interactions. [Phys Rev Lett](#), 2012, 109: 052501
- 44 Berggren T. On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes. [Nucl Phys A](#), 1968, 109: 265–287
- 45 Id Betan R, Liotta R J, Sandulescu N, et al. Two-particle resonant states in a many-body mean field. [Phys Rev Lett](#), 2002, 89: 042501
- 46 Michel N, Nazarewicz W, Płoszajczak M. Proton-neutron coupling in the Gamow shell model: The lithium chain. [Phys Rev C](#), 2004, 70: 064313
- 47 Michel N, Nazarewicz W, Płoszajczak M, et al. Gamow shell model description of neutron-rich nuclei. [Phys Rev Lett](#), 2002, 89: 042502
- 48 Michel N, Nazarewicz W, Płoszajczak M, et al. Shell model in the complex energy plane. [J Phys G-Nucl Part Phys](#), 2009, 36: 013101
- 49 Johnson C W, Launey K D, Auerbach N, et al. White paper: From bound states to the continuum. [J Phys G-Nucl Part Phys](#), 2020, 47: 123001
- 50 Hagen G, Hjorth-Jensen M, Michel N. Gamow shell model and realistic nucleon-nucleon interactions. [Phys Rev C](#), 2006, 73: 064307
- 51 Takayanagi K. Effective interaction in non-degenerate model space. [Nucl Phys A](#), 2011, 852: 61–81
- 52 Michel N, Aktulga H M, Jaganathen Y. Toward scalable many-body calculations for nuclear open quantum systems using the Gamow shell model. [Comput Phys Commun](#), 2020, 247: 106978
- 53 Michel N, Płoszajczak M. Gamow Shell Model: The Unified Theory of Nuclear Structure and Reactions. Cham: Springer, 2021
- 54 Papadimitriou G, Rotureau J, Michel N, et al. *Ab initio* no-core Gamow shell model calculations with realistic interactions. [Phys Rev C](#), 2013, 88: 044318
- 55 Kisamori K, Shimoura S, Miya H, et al. Candidate resonant tetraneutron state populated by the $^4\text{He} (^8\text{He}, ^8\text{Be})$ reaction. [Phys Rev Lett](#), 2016, 116: 052501
- 56 Shirokov A, Papadimitriou G, Mazur A, et al. Prediction for a four-neutron resonance. [Phys Rev Lett](#), 2016, 117: 182502
- 57 Shirokov A M, Kim Y, Mazur A I, et al. Tetraneutron resonance: Theory. [AIP Conf Proc](#), 2018, 2038: 020038
- 58 Duer M, Aumann T, Gernhäuser R, et al. Observation of a correlated free four-neutron system. [Nature](#), 2022, 606: 678–682
- 59 Kondo Y, Nakamura T, Tanaka R, et al. Nucleus ^{26}O : A barely unbound system beyond the drip line. [Phys Rev Lett](#), 2016, 116: 102503
- 60 Jones M D, Fosse K, Baumann T, et al. Search for excited states in ^{25}O . [Phys Rev C](#), 2017, 96: 054322
- 61 Hagen G, Hjorth-Jensen M, Jansen G R, et al. Continuum effects and three-nucleon forces in neutron-rich oxygen isotopes. [Phys Rev Lett](#), 2012, 108: 242501
- 62 Otsuka T, Suzuki T, Holt J D, et al. Three-body forces and the limit of oxygen isotopes. [Phys Rev Lett](#), 2010, 105: 032501
- 63 Thoennessen M. Reaching the limits of nuclear stability. [Rep Prog Phys](#), 2004, 67: 1187–1232
- 64 Sharov P G, Fomichev A S, Bezbakh A A, et al. Search for 2p decay of the first excited state of ^{17}Ne . [Phys Rev C](#), 2017, 96: 025807
- 65 Thomas R G. An analysis of the energy levels of the mirror nuclei, C^{13} and N^{13} . [Phys Rev](#), 1952, 88: 1109–1125
- 66 Ehrman J B. On the displacement of corresponding energy levels of C^{13} and N^{13} . [Phys Rev](#), 1951, 81: 412–416
- 67 Angulo C, Tabacaru G, Couder M, et al. Identification of a new low-lying state in the proton drip line nucleus ^{19}Na . [Phys Rev C](#), 2003, 67: 014308

Chiral three-body forces and nuclear first-principles studies

MA YuanZhuo, LI JianGuo, SUN ZhongHao, HU BaiShan,
ZHANG Shuang & XU FuRong*

State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China

Nuclear first-principles (or called *ab initio*) studies are the frontier of theoretical nuclear physics research for their reliable predictions and the ability to guide experiments. It bridges low-energy nuclear physics and the fundamental theory (quantum chromodynamics QCD) through the Chiral effective field theory. In past decades, *ab initio* methods have gained great success, benefiting from developments of quantum many-body methods and computer hardware. Using the innovative quantum many-body methods and the chiral potential that is fitted to low-energy nucleon-nucleon scattering data, *ab initio* calculations have been pushed from the light mass nuclei to heavy mass nuclei, from well-bound stable nuclei to weakly bound or unbound nuclei. During pasting years, we have been concentrating on exploring two aspects in *ab initio* calculations: chiral three-body forces and continuum effects. Chiral three-body forces have been shown to have broad influences on both the properties of finite nuclei and nuclear matter. Continuum effects are the key ingredient in the calculations of weakly bound or unbound nuclei. This paper reviews the series of achievements that we gained in the development of chiral three-body forces and *ab initio* Gamow shell model which takes the continuum coupling into account.

first principles, chiral three-body forces, resonances, continuum, nuclei around driplines

PACS: 21.10.-k, 21.10.Dr, 21.60.De, 21.30.-x, 21.45.Ff

doi: [10.1360/SSPMA-2022-0432](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2022-0432)