



第一性原理介质相似重整化群理论

胡柏山, 袁琪, 范思钦, 孙中浩, 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

2022-10-09 收稿, 2022-12-11 修回, 2022-12-13 接受, 2022-12-14 网络版发表

国家重点研发计划(2018YFA0404401)和国家自然科学基金(11835001, 11921006, 12035001)资助

摘要 由于手征有效场论核力、量子多体关联方法和超级计算机能力的发展, 原子核第一性原理计算或称从头计算(*ab initio*, first principles)在最近20年取得了巨大的进步. 作为处理强关联多体问题的新秀, 介质相似重整化群理论(in-medium similarity renormalization group, IMSRG)已经在原子核第一性原理计算中发挥了重要作用. 虽然理论本身仍需进一步发展, 但目前的计算已经可以达到较重核区, 如已经成功地实现了对 ^{208}Pb 的收敛计算. 本文简要回顾介质相似重整化群理论的发展历史, 介绍我们在介质相似重整化群理论方面的最新发展, 即复动量空间介质相似重整化群和形变介质相似重整化群. 复空间介质相似重整化群方法包含了连续谱耦合作用, 可以描述原子核的非束缚共振态和弱束缚特性. 形变相似重整化群可以更有效地描述形变原子核的结构.

关键词 第一性原理, 手征有效场论, 核力, 介质相似重整化群, 连续谱耦合, 形变

不同于传统的唯象模型, 原子核第一性原理计算或称从头计算(*ab initio*, first principles)能够从量子色动力学(quantum chromodynamics, QCD)的低能有效理论出发, 构建原子核多体量子体系哈密顿量, 并用“严格”的量子多体理论计算研究原子核物理问题, 提供更基本、更准确的物理结果. 除手征有效场论核力^[1], 第一性原理计算中也经常使用其他可以重复两核子散射相移及少体原子核性质的现实核力, 如CD-Bonn势^[2]和Argonne势^[3]. 现实核力由于具有强排斥芯和强张量力成分, 会产生很强的短程关联, 同时低动量与高动量模式之间有很强的关联, 使得核结构计算的收敛速度非常慢. 在重整化群理论的启发下, 核物理领域发展了多种核力重整化方法, 如 $V_{\text{low-}k}$ ^[4]、相似重整化群(similarity renormalization group, SRG)^[5,6]、Okubo-Lee-Suzuki^[7]和么正关联算符变换(unitary correlation operator method, UCOM^[8]). 这些重整化方法将核力的高低动量进行退耦合, 同时保证低能区所有对称性及可观测量

保持不变, 最终使核力变“软”, 这可以加速量子多体计算的收敛速度. 原初核力在只考虑两体作用时经过重整化会产生多体力(如诱导三体力, induced three-body force). 如果计算中同时包含重整化后的两体力和诱导三体力, 量子多体方法可以在较小的基矢空间给出与原初核力在较大基矢空间一致的结果^[9]. 相似重整化群方法由于自动给出诱导三体力, 且可以自洽重整化电弱算符而备受青睐^[9,10].

为了从更基本的物理角度理解原子核, 第一性原理计算越来越受重视. 目前一些先进的第一性原理多体方法已经被建立, 包括: 无核芯壳模型(no-core shell model, NCSM)^[11]、量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo, QMC)^[12]、格点有效场论(lattice effective field theory, LEFT)^[13]、多体微扰理论(many-body perturbation theory, MBPT)^[14,15]、耦合集团方法(coupled cluster, CC)^[16]、自洽格林函数(self-consistent Green's function, SCGF)^[17]和介质相似重整化群(in-medium similarity re-

引用格式: 胡柏山, 袁琪, 范思钦, 等. 第一性原理介质相似重整化群理论. 科学通报, 2023, 68: 1016–1025

Hu B S, Yuan Q, Fan S Q, et al. *Ab initio* in-medium similarity renormalization group (in Chinese). Chin Sci Bull, 2023, 68: 1016–1025, doi: 10.1360/TB-2022-1001

normalization group, IMSRG)^[18]. NCSM和QMC由于其计算量随核子数的增加呈指数增长, 目前只能计算较轻原子核(质量数 $A \leq 16$). 而先进的IMSRG、CC、SCGF和MBPT计算量随核子数多项式增长, 这使得它们可以计算更重的原子核. 图1描绘了第一性原理计算的现状, 其中IMSRG和CC在2022年实现了对重质量核 ^{208}Pb 的定量计算^[19], 这令人振奋地看到了第一性原理计算核素版图中所有原子核的曙光. 在核力重整化和量子多体方法中, SRG是唯一既可以用于重整化核力又可以作为量子多体方法求解多体薛定谔方程的理论. 此外, IMSRG还是目前可以对中等质量或者重质量核的电弱跃迁物理量进行计算的为数不多的第一性原理方法. 本文将介绍IMSRG的最新进展.

相似重整化群是由Wegner^[20]、Głazek和Wilson^[21]分别于20世纪90年代提出用于研究凝聚态物理和光前量子场论的方法. 从2007年开始, SRG方法被用于重整化现实核力^[5,6]. 2010年, Tsukiyama等人^[22]首次将SRG方法应用到闭壳原子核结构计算中, 开创了介质相似重整化群方法(IMSRG). 近几年, IMSRG在核物理领域蓬勃发展, 先后发展了价空间IMSRG^[23,24]、多参考态IMSRG^[25-27]以及与其他第一性原理计算相结合的各种

衍生方法^[27,28]. 虽然IMSRG是目前可以计算中等质量甚至重质量核的为数不多的几种第一性原理方法之一, 但是IMSRG无法有效描述弱束缚或非束缚原子核以及具有较大内禀形变或者具有形状共存的原子核. 本文重点介绍我们课题组为计算这两类非常有挑战性原子核而发展出来的新IMSRG方法: 一种是在Gamow-Berggren表象的复动量空间Gamow IMSRG(G-IMSRG)方法, 可以描述所谓的开放量子体系, 即可以处理弱束缚和非束缚原子核; 另一种是在形变基下的IMSRG(deformed IMSRG或D-IMSRG)方法, 可以对集体激发很强的原子核进行更好的定量描述.

1 Gamow IMSRG

随着新一代放射性核束装置的建成和使用, 越来越多的不稳定原子核将被生成, 由此掀起弱束缚或不束缚原子核性质研究的高潮. 正如文献^[15]中所述: 这类奇特核的最大特点是弱束缚, 受到周围散射连续谱的较大耦合影响, 属于开放量子多体系统, 对理论研究提出了很大的挑战. 在极端同位旋条件下, 丰质子或丰中子原子核的结构和相互作用方式可以发生系统性的演变, 出现以新的结构自由度和有效相互作用为表征的新物理, 涌现出与稳定原子核不一样的奇特结构和动力学性质, 如: 核芯外可以存在很低且弥散很大的密度分布(如晕现象、厚的中子皮)、奇异的集体运动模式(如矮共振等)、与散射连续谱发生很强的耦合作用以至传统幻数消失与新幻数出现等. 研究远离稳定线的原子核又与认识平稳和爆发性天体过程、理解宇宙元素起源以及探索核物质状态方程密切相关, 涉及许多当今国际上重要的前沿交叉科学问题.

从现实核力出发, 用第一性原理自洽描述稳定、弱束缚甚至不束缚原子核是低能核物理领域的前沿研究方向. 第一性原理计算不引入额外参数, 能可靠地揭示自然界物理规律, 提供更基础、可信的理论预测, 还可以在有效场论的基础上建立起与更基本理论QCD的联系. 绝大多数第一性原理计算都是基于球形谐振子基矢, 虽然取得了巨大的成功, 但是存在明显的缺陷. 量子多体计算无法在谐振子基矢空间有效地描述弱束缚核特别是晕核的结构性质. 这是由于用无限深势阱谐振子势产生的波函数具有高斯衰减形式的渐近行为, 都是深束缚的, 有很强的局域性, 无法包含连续谱耦合效应. 为正确描述弱束缚或者不束缚原子核的结构和激发性质, 需要在理论计算时同时考虑束缚

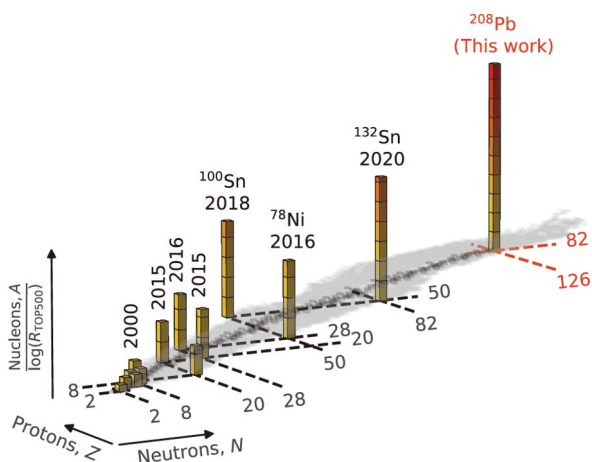


图1 A 体原子核体系的第一性原理计算趋势图^[19]. 柱状图给出了第一性原理首次计算双幻核的年份. 柱状图的高度是原子核质量数 A 除以以每秒浮点(flop/s)运算数为单位的500强超级计算机算力 R_{TOP500} (<https://www.top500.org/statistics/perfdevel/>)的对数. “This work”是文献^[19]在2022年的计算

Figure 1 Trend of *ab initio* calculations for the nuclear A -body problem^[19]. The bars highlight the years of the first realistic computations of doubly magic nuclei. The height of each bar corresponds to the mass number A divided by the logarithm of the total compute power R_{TOP500} (in flop/s) of the pertinent TOP500 list (<https://www.top500.org/statistics/perfdevel/>). “This work” gives the calculation in year 2022^[19]

态、共振态和散射连续态.

目前,可以包含连续谱耦合效应的第一性原理方法主要有:结合RGM(resonating group method)的NCSM(no-core shell model with continuum, NCSMC)^[29]、Green's function Monte Carlo(GFMC)^[30]以及在Gamow-Berggren表象的no-core Gamow shell model(NCGSM)^[31,32]、复动量MBPT^[33,34]和复动量CC^[35,36].此外,一些少体方法^[37]也可以精确地描述核子数少于5的弱束缚或不束缚原子核.理论上NCSMC通过统一处理结构和反应可以实现对原子核体系的精确求解.然而由于NCSMC对计算资源的巨大需求,目前只能对核子数 $A < 16$ 的体系进行描述.NCGSM是NCSM在Gamow-Berggren基矢下的扩展^[38-40],可以统一处理束缚态、共振态以及散射连续态.但是由于NCGSM是一种全组态混合计算方法,而Gamow-Berggren基矢的数目要远大于常用的谐振子基矢,加上求解复对称哈密顿量会大大增加计算消耗,因此NCGSM局限在比较轻质量的核区(核子数 $A < 6$).复数MBPT^[15,33,34]将Gamow-Berggren基下的哈密顿量通过拓展的 Q -box折叠图方法使选定的价空间组态与闭壳核芯组态及其他组态空间进行退耦合,从而得到价空间的现实有效哈密顿量.复动量空间的CC也是通过Gamow-Berggren基包含连续谱耦合效应,但是局限在计算闭壳原子核或者闭壳核加减一两个核子的体系.在这些研究现状下,我们课题组^[41]发展出了在复动量Gamow-Berggren基下的介质相似重整化群理论(G-IMSRG),可以非微扰地计算轻质量和重质量的束缚、弱束缚以及不束缚原子核的低能激发谱、共振宽度(或者衰变寿命)以及其他跃迁物理量.

超越通常的谐振子基Hilbert空间, Gamow-Berggren基空间(一个rigged Hilbert空间)是将薛定谔方程推广到复动量空间,给出同时含束缚态、共振态和非束缚散射连续态的一组完备基矢,尤其是可以正确处理衰变共振态和散射连续态波函数的边界条件.有关Berggren基的具体理论框架可以参考文献^[38-40].通常的IMSRG计算都是基于球形谐振子基的,要将IMSRG拓展到复动量空间的Gamow-Berggren表象会遇到很大的挑战.一方面,在正常的Hilbert空间中,哈密顿量是厄米的,相应的IMSRG流方程的生成元是逆厄米的.但是在rigged Hilbert空间,哈密顿量变成了非厄米,生成元变为了反正交,这需要我们重新定义和推导整个重整化群的流方程.此外,自洽生成Gamow-Bergg-

ren基也非常困难.另一方面,我们也不清楚在复动量空间能否保证在求解流方程时哈密顿量的非对角元逐步被压低. Gamow-Berggren基空间必然涉及连续谱,这使得退耦过程类似多壳退耦^[34,41],导致计算异常困难.我们课题组^[41]发展了Gamow-Berggren基下的IMSRG方法.我们将这种新方法命名为Gamow IMSRG.本文以弱束缚晕核 ^{22}C 为例,讨论从手征有效场论两体和三体核力出发的Gamow IMSRG应用前景.

在碳同位素链中,靠近中子滴线一侧的 ^{20}C 是束缚核, ^{21}C 是非束缚核,而 ^{22}C 又变为束缚核,所以 ^{22}C 属于Borromean核. ^{23}C 是非束缚核,故而 ^{22}C 有可能是C同位素链的中子滴线位置.最新的实验^[42,43]显示 ^{22}C 是一个晕核(halo),实验提取的半径均方根是 3.44 ± 0.08 ^[42]或者 3.38 ± 0.10 fm^[43]. ^{22}C 的连续态效应会非常明显,而描述晕核需要低轨道角动量的分波给出空间弥散很大的波函数,所以 ^{22}C 这个奇特核对多体方法提出了非常高的要求.我们应用Gamow IMSRG给出了首个第一性原理计算结果.图2展示了Gamow IMSRG计算的 ^{22}C 密度分布.此计算采用了手征有效场论NNLO_{opt}^[44]和NNLO_{sat}^[45]相互作用.我们发展了Gamow Hartree Fock方法,用这两种手征有效场论核力自洽地产生Hartree Fock Gamow-Berggren基矢^[41].NNLO_{opt}相互作用可以在没有三体力情况下很好地描述结合能、激发能谱、滴线位置以及核物质状态方程^[44].而NNLO_{sat}是将两体力和三体力放在一起同时拟合核子-核子散射相移以及一些典型核结构数据.NNLO_{sat}可以很好地描述原子核的半径^[45],而NNLO_{opt}给出的原子核半径一般比实验值小.从图2可以清楚地看到,相比传统谐振子基矢下的IMSRG(R-IMSRG), Gamow IMSRG给出了更长的密度尾巴,显示出原子核密度明显的空间弥散,支持晕结构.当不考虑连续态效应时,R-IMSRG使用NNLO_{opt}核力给出的半径是2.798 fm, NNLO_{sat}给出的半径是2.983 fm;而当考虑连续态效应后, Gamow IMSRG使用NNLO_{opt}给出2.928 fm, NNLO_{sat}给出3.139 fm.所以,可以清楚地看到,连续态效应对 ^{22}C 的半径有重要影响.

图3给出了 ^{22}C 的低激发谱.我们对比了谐振子基矢下R-IMSRG和有连续态耦合Gamow IMSRG的结果,可以看到,对于共振态,考虑连续态效应后,G-IMSRG拉低了谱的位置.图3也给出了Gamow IMSRG计算中考虑不同Berggren分波的结果.从只取中子 $d_{3/2}$ 分波的结果及取 $s_{1/2}$ 和 $d_{3/2}$ 分波为Berggren基的结果可以看到: ^{22}C 的低激发谱主要由中子的 $d_{3/2}$ 分波决定.我们也看到,

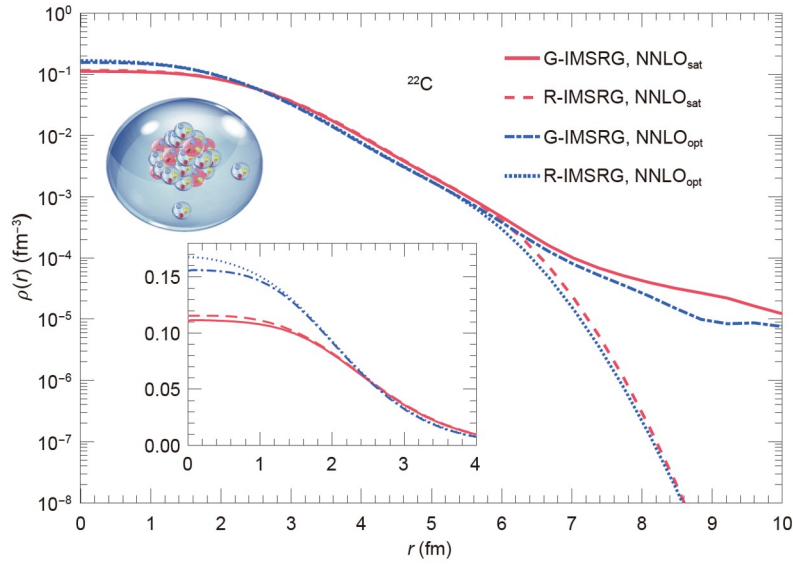


图2 理论计算的以坐标表示的 ^{22}C 基态密度分布^[41]. R-IMSRG指代实能量的IMSRG计算, G-IMSRG给出了Gamow IMSRG的结果. 内嵌的小图给出了正常坐标表示的 ^{22}C 中心部分的密度. Copyright © 2019, the American Physical Society

Figure 2 Calculated ^{22}C ground-state densities displayed on the logarithm scale^[41]. R-IMSRG indicates the real-energy IMSRG calculation, whereas G-IMSRG is the Gamow IMSRG calculation. The inset details the densities in the central region of the nucleus with the standard scale. Copyright © 2019, the American Physical Society

NNLO_{sat}和NNLO_{opt}虽然给出的 ^{22}C 基态半径差异非常大, 但是对于谱的信息, 结果却很接近. 对于第一个 2^+ 态, R-IMSRG和G-IMSRG两种方法给出了几乎一致的结果. 第一个 2^+ 态很特别, 是一个束缚态, 并且能量比较低. 一般来说, ^{22}C 是一个双闭壳核, 它应该给出较高的第一个 2^+ 激发态能量, 但是与一般情况相比, 我们的计算结果却有出入. 经过仔细研究发现, 此 2^+ 态主要是由质子从 $0p_{3/2}$ 空穴轨道到 $0p_{1/2}$ 粒子轨道的1-particle-1-hole激发导致的. 此外, 图3也给出了与复数CC的对比结果(G. Hagen, 私人交流), 可以看到, 两种第一性原理计算给出了一致的结果, 展示出 $ab initio$ 方法的强大之处.

2 形变IMSRG

目前可以对中等质量或者重质量核进行计算的第一性原理方法有IMSRG、CC、SCGF和MBPT. 这些先进的量子多体方法都是将计算过程中正规序排列的(normal ordered)算符截断到两体水平, 但可以用近似的方法考虑三体算符的影响, 例如通常所说的IMSRG实际是指IMSRG(2)^[18]. 目前没有量子多体方法可以达到正规序排列四体水平. 为方便讨论, 我们将原子核的关联分为动态关联(dynamic correlation)和静态关联(static correlation或集体关联)^[46,47]. 动态关联由一个占主导的

组态与非常多权重很小的组态(但整体对能量有明显贡献)混合而产生. 动态关联包含少数几个核子激发到高能态, 可以很好地被normal ordered两体水平的多体方法所包含. 因此, 少数核子占主导的跃迁, 如M1跃迁、beta衰变等, 可以很好地被球形基下的量子多体方法描述^[48,49], 例如价空间介质相似重整化群(valence-space IMSRG或VS-IMSRG). 静态关联是少数较大权重组态混合而成的, 需要考虑多粒子多空穴(甚至是 A -particle- A -hole)的激发, 需要超越IMSRG(2)的计算, 如IMSRG(3), 甚至IMSRG(4). 在很多计算中, 球形基下的VS-IMSRG(2)对电四极矩和电E2跃迁都给出比实验观测小的值^[48,50]. 这也暗示着将算符截断到normal ordered两体水平, 即使考虑了三体贡献的VS-IMSRG(2)仍然无法包含高阶的集体激发关联.

内禀坐标系中的形变基加上对多体波函数的角动量投影可以捕捉到多粒子多空穴, 甚至是 A -粒子- A -空穴的激发模式, 可以提供很好的通道对具有大的内禀形变或者形状共存的原子核进行非常有效的描述^[46,51~53]. 我们课题组^[54]发展了第一性原理形变介质相似重整化群理论(D-IMSRG), 将相似重整化群理论在形变基下扩展到了开壳原子核的计算中. 首先在m-scheme求解Hartree-Fock(HF)得到形变的HF基矢, 然后在此形变基下进行IMSRG计算. 形变的参考态波函数

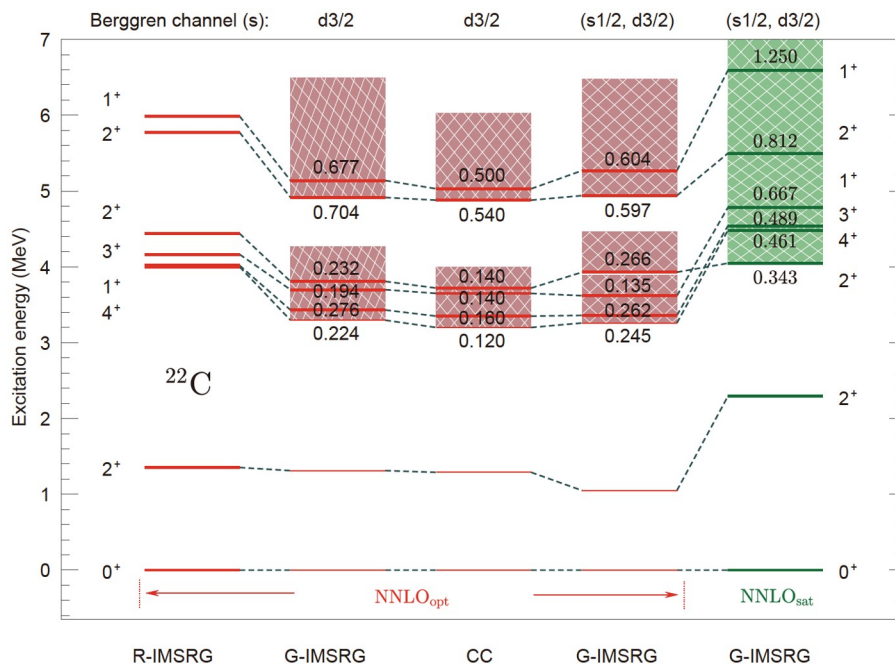


图3 采用手征 NNLO_{opt} (两核子)和 NNLO_{sat} (两核子+三核子)相互作用Gamow IMSRG预言的 ^{22}C 激发能谱^[41]。图中也给出了与复数CC(G. Hagen, 私人交流)的对比。共振态用阴影标识并在其附近给出了以MeV为单位的共振态宽度。图顶部给出了用包含共振态和连续谱的Berggren表象所处理的分波。Copyright © 2019, the American Physical Society

Figure 3 Excited states in ^{22}C predicted by Gamow IMSRG with chiral NNLO_{opt} (NN) and NNLO_{sat} (NN+3N) interactions^[41], compared with the complex CC calculation (G. Hagen, private communication). Resonant states are indicated by shading, and their widths (in MeV) are given by the numbers nearby. The channel(s) given at the top of the panel indicates that the partial waves are treated in the resonance and continuum Berggren representation. Copyright © 2019, the American Physical Society

可以更加有效地描述形变原子核, 但需要修复破坏的 $\text{SU}(2)$ 对称性(总角动量为整数或半整数)。不同于MR-IMSRG在流演化之前选取保持球对称性的Hartree-Fock-Bogoliubov(HFB)态作为参考态^[25]或将形变HFB态通过投影恢复球对称性之后作为参考态^[26], 在D-IMSRG中, 需要对IMSRG演化后的波函数作角动量投影, 这是极其复杂和困难的, 具体讨论见文献^[54]。在目前工作中, 通过HF波函数的角动量投影作为领头阶近似考虑了角动量投影修正, 即通过对形变的HF波函数作角动量投影获得相应的投影修正能量, 这对应着IMSRG演化后波函数角动量投影的领头阶近似。HF能和IMSRG求解的关联能是大小拓展(size-extensive)的, 即计算能量与核子数有近似线性行为, 而最终的投影能几乎是与size-extensive无关的。这种领头阶的修正已经非常接近精确的结果^[46,54]。

作为多体方法的试金石, ^8Be 和 ^{10}Be 由于具有复杂的两个阿尔法集团结构, 对传统球形谐振子基下的第一性原理计算提出了挑战, 需要考虑非常高阶的关联。图4给出了从手征有效场论核力 NNLO_{opt} 出发, 形变

IMSRG计算的 $^{8,10}\text{Be}$ 结合能。“Extrap”代表了以指数形式将截断的基空间(N_{shell} 个谐振子大壳)外推到无穷大基空间的能量, 具体形式见文献^[54]。“Extrap”下面6个点分别是投影前和投影后用 $N_{\text{shell}}=3\sim7$ 、 $3\sim10$ 、 $6\sim10$ 的计算结果进行外推的值, 可以看到, 外推值与无芯壳模型(NCSM)的精确解以及实验值相符合。从图4中可以看到, 在 ^8Be 和 ^{10}Be 的计算中, 角动量投影带来的修正分别为 -7.2 和 -5.9 MeV。由于两个原子核的形变明显, 因此投影修正效果显著。图4中VS-IMSRG是以 ^4He 为核芯, p壳层为价空间进行计算的。可以看到, VS-IMSRG的结果和NCSM的结果与实验值有一定差异: 一方面, VS-IMSRG计算的价空间受限于p壳层, 没有很好地考虑跨壳激发的组态混合; 另一方面, VS-IMSRG(2)也无法很好地处理强集体激发态的关联^[48,50]。

图5展示了从轻C到中等质量Mg偶偶核同位素结合能的D-IMSRG以及VS-IMSRG的计算结果。考虑投影修正后的D-IMSRG计算结果与VS-IMSRG计算结果及实验数据吻合得更好。可以看出, 对于 ^{14}C 和 $^{14,16,22,24,28}\text{O}$ 等闭壳核, 投影修正的值为零, 表明了这些核的球形特

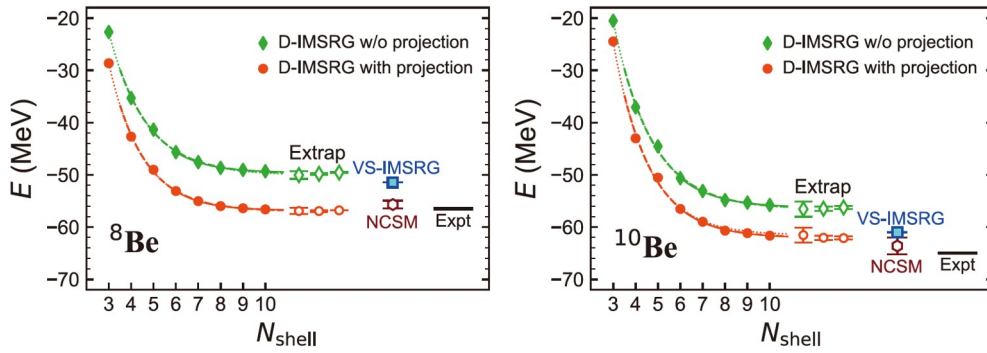


图4 包含和不包含投影修正的D-IMSRG计算的 ^8Be 和 ^{10}Be 基态能量随基空间大小 N_{shell} 的变化趋势^[54]。标识“Extrap”代表了基于不同计算数据点以指数形式外推到无穷大基空间的能量，从左到右依次给出了基于 $N_{\text{shell}}=3\sim7$ 、 $3\sim10$ 和 $6\sim10$ 的外推结果。外推结果的不确定性用误差棒表示。NCSM和VS-IMSRG的外推结果不确定性也用误差棒表示。实验数据采用自AME2020^[55]。Copyright © 2022, the American Physical Society

Figure 4 Ground-state energies calculated by D-IMSRG with and without the projection correction for ^8Be and ^{10}Be , with respect to the basis-space size N_{shell} ^[54]. Symbols below “Extrap” represent the exponential extrapolated energies to infinite basis space, based on different data points, from left to right, $N_{\text{shell}}=3\sim7$, $3\sim10$, and $6\sim10$, respectively, with the fitting uncertainties given by error bars. Extrapolation uncertainties in NCSM and VS-IMSRG calculations are also given by error bars there. Experimental data are taken from AME2020^[55]. Copyright © 2022, the American Physical Society

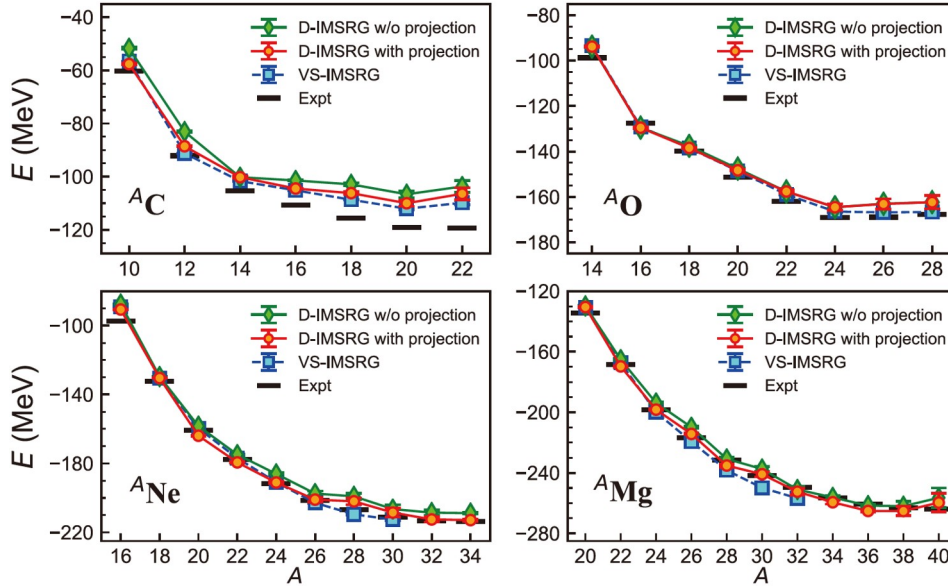


图5 C、O、Ne和Mg同位素量的基态能量^[54]。D-IMSRG的结果是基于 $N_{\text{shell}}=6\sim10$ 的计算点外推到无穷大基空间，VS-IMSRG的结果是基于 $N_{\text{shell}}=8\sim13$ 的外推结果。VS-IMSRG计算中采用的价空间是： ^{6-14}C 同时取质子和中子 $0p_{3/2,1/2}$ ； $^{14-22}\text{C}$ 取质子 $0p_{3/2,1/2}$ 和中子 $1s_{1/2}$ 、 $0d_{5/2,3/2}$ ；O、Ne和Mg同位素链同时采取质子和中子的 $1s_{1/2}$ 和 $0d_{5/2,3/2}$ 。实验数据采用自AME2020^[55]。Copyright © 2022, the American Physical Society

Figure 5 Ground-state energies of C, O, Ne, and Mg isotopes^[54]. D-IMSRG results are extrapolated to infinite basis space based on $N_{\text{shell}}=6\sim10$ data points, and the VS-IMSRG results are extrapolated based on $N_{\text{shell}}=8\sim13$. The valance space of VS-IMSRG calculations is both protons and neutrons in $0p_{3/2,1/2}$ for ^{6-14}C ; protons in $0p_{3/2,1/2}$ and neutrons in $1s_{1/2}$, $0d_{5/2,3/2}$ for $^{14-22}\text{C}$; both protons and neutrons in $1s_{1/2}$ and $0d_{5/2,3/2}$ for O, Ne, and Mg isotopes. Experimental data are taken from AME2020^[55]. Copyright © 2022, the American Physical Society

性，该结果也与理论和实验预期相符。在不确定度范围内，D-IMSRG与VS-IMSRG的计算结果相吻合。然而，对于理论预期中的 $^{12,22}\text{C}$ 闭壳核，投影修正前后结合能的计算结果并不相等，表明这些核存在形变；计算得到的 ^{12}C 和 ^{22}C 角动量投影修正分别为 -5.5 和 -2.7 MeV，这使其基态能量结果更接近VS-IMSRG结果和实验值。对于中子数 $N=20$ 反转岛附近的Ne和Mg同位素，投影修正

约为 $-3\sim-6$ MeV。对于这些反转岛附近的原子核，sd和pf壳层之间存在很强的组态混合；而在D-IMSRG计算中，通过形变基可以有效地考虑波函数的形变信息。此外，VS-IMSRG和D-IMSRG计算的C同位素链结合能都与实验值有一定的系统偏差，C同位素链结合能的计算对于核力和多体方法仍然是一个挑战^[24]。

图6给出了Be、C、O、Ne和Mg同位素电荷半径

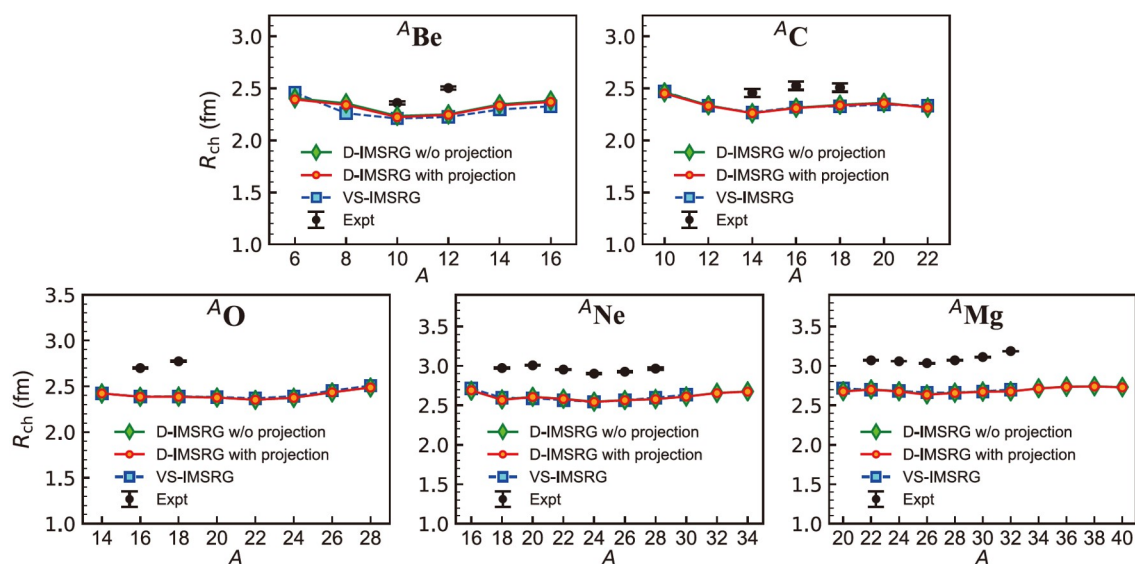


图6 Be、C、O、Ne和Mg同位素链的电荷半径^[54]. D-IMSRG是在基空间 $N_{\text{shell}}=10$ 中的结果, VS-IMSRG是在 $N_{\text{shell}}=13$ 中. VS-IMSRG计算中采用的价空间是: ^{6-12}Be 同时取质子和中子 $0p_{3/2,1/2}$; $^{12-16}\text{Be}$ 取质子 $0p_{3/2,1/2}$ 和中子 $1s_{1/2}$ 、 $0d_{5/2,3/2}$; ^{6-14}C 同时取质子和中子 $0p_{3/2,1/2}$; $^{14-22}\text{C}$ 取质子 $0p_{3/2,1/2}$ 和中子 $1s_{1/2}$ 、 $0d_{5/2,3/2}$; O、Ne和Mg同位素链同时采取质子和中子的 $1s_{1/2}$ 、 $0d_{5/2,3/2}$. 实验数据取自文献[56–60]. Copyright © 2022, the American Physical Society

Figure 6 Charge radii of Be, C, O, Ne, and Mg isotopes^[54], calculated by D-IMSRG in a basis space with $N_{\text{shell}}=10$ and by VS-IMSRG with $N_{\text{shell}}=13$. The valence space of VS-IMSRG calculations is both protons and neutrons in $0p_{3/2,1/2}$ space for ^{6-12}Be ; protons in $0p_{3/2,1/2}$ and neutrons in $1s_{1/2}$ and $0d_{5/2,3/2}$ for $^{12-16}\text{Be}$; both protons and neutrons in $0p_{3/2,1/2}$ for ^{6-14}C ; protons in $0p_{3/2,1/2}$ and neutrons in $1s_{1/2}$, $0d_{5/2,3/2}$ for $^{14-22}\text{C}$; both protons and neutrons in $1s_{1/2}$ and $0d_{5/2,3/2}$ for O, Ne, and Mg isotopes. Experimental data are taken from Refs. [56–60]. Copyright © 2022, the American Physical Society

的计算结果, 并与VS-IMSRG计算和实验数据进行了对比, 可以看到, 经过投影修正和未经过投影修正的D-IMSRG半径比较接近, 且与VS-IMSRG计算结果吻合较好, 这一结果也与其他第一性原理多体方法的计算结果相一致. 除了 ^8Be 外, 投影修正对电荷半径的影响很小. 这种差异可能是由 ^8Be 的大形变所致. 从图6中也可以看到, 总体上, 各种多体方法计算结果与实验结果相比在趋势上是合理的, 尽管NNLO_{opt}核力对电荷半径的计算存在系统性的偏小^[56].

3 总结与展望

第一性原理计算正在向着定量描述核素版图中的

所有原子核进发, 但是具有复杂结构的原子核是第一性原理计算的“拦路虎”, 尤其是弱束缚或非束缚的奇特核以及具有大的内禀形变或者具有形状共存的原子核. 本文介绍了介质相似重整化群理论的两个最新发展, 以实现对这类具有复杂结构原子核的高精度计算. 我们将继续发展这两种方法, 以实现对电弱跃迁等物理量的计算. 毋庸置疑, 随着理论模型的发展, 原子核物理研究已经被推向新的阶段, 第一性原理计算使得我们从基础理论(量子色动力学)出发描述复杂原子核的图像成为了可能. 机遇与挑战共存, 已知与未知交织, 原子核物理崭新的未来正等着我们大刀阔斧地去开辟.

参考文献

- 1 Machleidt R, Entem D R. Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys Rep*, 2011, 503: 1–75
- 2 Machleidt R. High-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential. *Phys Rev C*, 2001, 63: 024001
- 3 Wiringa R B, Stoks V G J, Schiavilla R. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking. *Phys Rev C*, 1995, 51: 38–51
- 4 Bogner S K, Kuo T T S, Schwenk A. Model-independent low momentum nucleon interaction from phase shift equivalence. *Phys Rep*, 2003, 386: 1–27
- 5 Bogner S K, Furnstahl R J, Perry R J. Similarity renormalization group for nucleon-nucleon interactions. *Phys Rev C*, 2007, 75: 061001
- 6 Hergert H, Roth R. Unitary correlation operator method from a similarity renormalization group perspective. *Phys Rev C*, 2007, 75: 051001

- 7 Navrátil P, Vary J P, Barrett B R. Properties of ^{12}C in the *ab initio* nuclear shell model. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 5728–5731
- 8 Roth R, Neff T, Feldmeier H. Nuclear structure in the framework of the unitary correlation operator method. *Prog Part Nucl Phys*, 2010, 65: 50–93
- 9 Jurgenson E D, Navrátil P, Furnstahl R J. Evolution of nuclear many-body forces with the similarity renormalization group. *Phys Rev Lett*, 2009, 103: 082501
- 10 Anderson E R, Bogner S K, Furnstahl R J, et al. Operator evolution via the similarity renormalization group: The deuteron. *Phys Rev C*, 2010, 82: 054001
- 11 Barrett B R, Navrátil P, Vary J P. *Ab initio* no core shell model. *Prog Part Nucl Phys*, 2013, 69: 131–181
- 12 Carlson J, Gandolfi S, Pederiva F, et al. Quantum Monte Carlo methods for nuclear physics. *Rev Mod Phys*, 2015, 87: 1067–1118
- 13 Lee D. Lattice simulations for few- and many-body systems. *Prog Part Nucl Phys*, 2009, 63: 117–154
- 14 Coraggio L, Covello A, Gargano A, et al. Shell-model calculations and realistic effective interactions. *Prog Part Nucl Phys*, 2009, 62: 135–182
- 15 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, 等. 原子核的第一性原理计算. 科学通报, 2021, 66: 3570–3580]
- 16 Hagen G, Papenbrock T, Hjorth-Jensen M, et al. Coupled-cluster computations of atomic nuclei. *Rep Prog Phys*, 2014, 77: 096302
- 17 Somà V. Self-consistent Green's function theory for atomic nuclei. *Front Phys*, 2020, 8: 340
- 18 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
- 19 Hu B, Jiang W, Miyagi T, et al. *Ab initio* predictions link the neutron skin of ^{208}Pb to nuclear forces. *Nat Phys*, 2022, 18: 1196–1200
- 20 Wegner F. Flow-equations for Hamiltonians. *Ann Phys*, 1994, 506: 77–91
- 21 Glazek S D, Wilson K G. Renormalization of hamiltonians. *Phys Rev D*, 1993, 48: 5863–5872
- 22 Tsukiyama K, Bogner S K, Schwenk A. In-medium similarity renormalization group for nuclei. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 222502
- 23 Tsukiyama K, Bogner S K, Schwenk A. In-medium similarity renormalization group for open-shell nuclei. *Phys Rev C*, 2012, 85: 061304
- 24 Stroberg S R, Calci A, Hergert H, et al. Nucleus-dependent valence-space approach to nuclear structure. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 032502
- 25 Hergert H, Binder S, Calci A, et al. *Ab initio* calculations of even oxygen isotopes with chiral two-plus-three-nucleon interactions. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 242501
- 26 Yao J, Bally B, Engel J, et al. *Ab initio* treatment of collective correlations and the neutrinoless double beta decay of ^{48}Ca . *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 232501
- 27 Frosini M, Duguet T, Ebran J P, et al. Multi-reference many-body perturbation theory for nuclei. *Eur Phys J A*, 2022, 58: 64
- 28 Gebrerufael E, Vobig K, Hergert H, et al. *Ab initio* description of open-shell nuclei: Merging no-core shell model and in-medium similarity renormalization group. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 152503
- 29 Navrátil P, Quaglioni S, Hupin G, et al. Unified *ab initio* approaches to nuclear structure and reactions. *Phys Scr*, 2016, 91: 053002
- 30 Nollett K M, Pieper S C, Wiringa R B, et al. Quantum Monte Carlo calculations of neutron- α scattering. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 022502
- 31 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
- 32 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
- 33 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
- 34 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
- 35 Hagen G, Papenbrock T, Hjorth-Jensen M. *Ab initio* computation of the ^{17}F proton halo state and resonances in $A=17$ nuclei. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 182501
- 36 Hagen G, Hjorth-Jensen M, Jansen G R, et al. Evolution of shell structure in neutron-rich calcium isotopes. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 032502
- 37 Deltuva A. Tetraneutron: Rigorous continuum calculation. *Phys Lett B*, 2018, 782: 238–241
- 38 Michel N, Nazarewicz W, Płoszajczak M, et al. Shell model in the complex energy plane. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2009, 36: 013101
- 39 Berggren T. On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes. *Nucl Phys A*, 1968, 109: 265–287
- 40 Hagen G, Vaagen J S, Hjorth-Jensen M. The contour deformation method in momentum space, applied to subatomic physics. *J Phys A-Math Gen*, 2004, 37: 8991–9021
- 41 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
- 42 Togano Y, Nakamura T, Kondo Y, et al. Interaction cross section study of the two-neutron halo nucleus ^{22}C . *Phys Lett B*, 2016, 761: 412–418
- 43 Nagahisa T, Horiuchi W. Examination of the ^{22}C radius determination with interaction cross sections. *Phys Rev C*, 2018, 97: 054614
- 44 Ekström A, Baardsen G, Forssén C, et al. Optimized chiral nucleon-nucleon interaction at next-to-next-to-leading order. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 192502
- 45 Ekström A, Jansen G R, Wendt K A, et al. Accurate nuclear radii and binding energies from a chiral interaction. *Phys Rev C*, 2015, 91: 051301

- 46 Hagen G, Novario S J, Sun Z H, et al. Angular-momentum projection in coupled-cluster theory: Structure of ^{34}Mg . *Phys Rev C*, 2020, 105: 064311
- 47 Ramos-Cordoba E, Salvador P, Matito E. Separation of dynamic and nondynamic correlation. *Phys Chem Chem Phys*, 2016, 18: 24015–24023
- 48 Bai S W, Koszorús Á, Hu B S, et al. Electromagnetic moments of scandium isotopes and $N=28$ isotones in the distinctive $0f_{7/2}$ orbit. *Phys Lett B*, 2022, 829: 137064
- 49 Gysbers P, Hagen G, Holt J D, et al. Discrepancy between experimental and theoretical β -decay rates resolved from first principles. *Nat Phys*, 2019, 15: 428–431
- 50 Henderson J, Hackman G, Ruotsalainen P, et al. Testing microscopically derived descriptions of nuclear collectivity: Coulomb excitation of ^{22}Mg . *Phys Lett B*, 2018, 782: 468–473
- 51 Duguet T. Symmetry broken and restored coupled-cluster theory: I. Rotational symmetry and angular momentum. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2015, 42: 025107
- 52 Novario S J, Hagen G, Jansen G R, et al. Charge radii of exotic neon and magnesium isotopes. *Phys Rev C*, 2020, 102: 051303
- 53 Ring P, Schuck P. *The Nuclear Many-Body Problems*. Heidelberg: Springer, 1980
- 54 Yuan Q, Fan S Q, Hu B S, et al. Deformed in-medium similarity renormalization group. *Phys Rev C*, 2022, 105: L061303
- 55 Wang M, Huang W J, Kondev F G, et al. The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. *Chin Phys C*, 2021, 45: 030003
- 56 Kanungo R, Horiuchi W, Hagen G, et al. Proton distribution radii of $^{12-19}\text{C}$ illuminate features of neutron halos. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 102501
- 57 Krieger A, Nörtershäuser W, Geppert C, et al. Frequency-comb referenced collinear laser spectroscopy of Be^+ for nuclear structure investigations and many-body QED tests. *Appl Phys B*, 2017, 123: 15
- 58 Lapoux V, Somà V, Barbieri C, et al. Radii and binding energies in oxygen isotopes: A challenge for nuclear forces. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 052501
- 59 Ohayon B, Rahangdale H, Geddes A J, et al. Isotope shifts in $^{20,22}\text{Ne}$: Precision measurements and global analysis in the framework of intermediate coupling. *Phys Rev A*, 2019, 99: 042503
- 60 Yordanov D T, Bissell M L, Blaum K, et al. Nuclear charge radii of $^{21-32}\text{Mg}$. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 042504

Summary for “第一性原理介质相似重整化群理论”

Ab initio in-medium similarity renormalization group

Baishan Hu, Qi Yuan, Siqin Fan, Zhonghao Sun & Furong Xu^{*}

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

^{*} Corresponding author, E-mail: frxu@pku.edu.cn

Over the past decades, *ab initio* nuclear calculations have made dramatic progress, especially reaching the heavy mass region as ^{208}Pb recently. These advances are driven by the concomitance of different factors. First, the chiral effective field theory (EFT) provides an efficient expansion and consistent treatment of both nuclear forces and electroweak currents. Second, renormalization methods for the nucleon-nucleon potential, in particular similarity renormalization group (SRG) significantly improves the convergence of numerical calculations with respect to basis truncations. Third, novel developments of accurate and uncertainty-controlled quantum many-body methods were carried out. Finally, the availability of high-performance computing resources has tremendously been increasing.

As one of the powerful renormalization methods, the SRG has been applied to soften nuclear forces for *ab initio* calculations. Recently, the SRG method was developed as a novel many-body method in configuration space, named in-medium SRG (IMSRG). Since then, the IMSRG has been further developed, which includes multi-reference IMSRG, valence-space IMSRG, equation-of-motion IMSRG and IMSRG merging no-core shell model. The IMSRG has become one of the powerful and predictive *ab initio* methods. However, neither of these IMSRG variants can describe weakly-bound nuclei due to the use of the harmonic oscillator (HO) basis. Moreover, open-shell nuclei with strong intrinsic deformation or shape coexistence remain a challenge due to the strong static correlations.

The present paper summarizes the development history of the SRG and reviews our recent work on two IMSRG variants, named the Gamow IMSRG (G-IMSRG) and the deformed IMSRG (D-IMSRG), to include effects from the continuum coupling and the deformation within *ab initio* approaches. Weakly-bound and unbound nuclei belong to the category of open quantum systems, hence the coupling to the continuum profoundly affects their behaviors. The complex-energy Berggren basis provides an elegant framework to treat bound, resonant, and nonresonant continuum states on an equal footing. In the Berggren representation, we developed the novel *ab initio* G-IMSRG method which can describe the resonance and nonresonant continuum properties of weakly bound and unbound nuclei. Starting from chiral EFT two- and three-nucleon interactions, the Borromean halo nucleus ^{22}C has been calculated by the G-IMSRG. The halo structure is well reproduced, and low-lying resonant states are predicted for the future experiments. To capture the strong collective correlations, we developed the *ab initio* D-IMSRG approach starting from an axially deformed Hartree-Fock (HF) mean-field. Important deformed configurations are efficiently included in the deformed basis, which is more efficient for nuclei with strong intrinsic deformation or shape coexistence. The calculation under the axially deformed HF basis breaks the SU(2) rotational symmetry (particle positions and internal spin states) associated with angular momentum conservation. The broken rotation symmetry could be restored by angular momentum projection. Nevertheless, it remains a challenge for both theory and numerical computation. We estimate the contribution from the angular momentum projection by the energy gain from the projected HF. As a proof of concept, we calculated the deformed (2-alpha cluster) $^{8,10}\text{Be}$ using chiral EFT interactions. The calculated D-IMSRG energies with the estimated projection corrections agree with the “exact” results from the no-core shell model, which demonstrated the capability of this new method. After validating the new D-IMSRG, we systematically investigate the ground-state energies and charge radii of even-even nuclei from light beryllium to medium-mass magnesium isotopes.

***ab initio*, chiral effective field theory, nuclear force, in-medium similarity renormalization group, continuum coupling, deformation**

doi: [10.1360/TB-2022-1001](https://doi.org/10.1360/TB-2022-1001)