



原子核相对论密度泛函理论

王亚坤, 许方方, 黄天行, 赵鹏巍*

北京大学物理学院, 北京 100871

* 联系人, E-mail: pwzhao@pku.edu.cn

2022-09-20 收稿, 2022-11-17 修回, 2022-11-18 接受, 2022-11-21 网络版发表

国家重点研发计划(2018YFA0404400, 2017YFE0116700)、国家自然科学基金(11621131001, 11875075, 11935003, 11975031, 12141501, 12105004)、北京大学核物理与核技术国家重点实验室(NPT2020ZZ01)、科技部高端外国专家引进计划和北京大学高性能计算平台资助

摘要 随着世界范围内稀有同位素束流装置的发展, 人们对原子核的认识从稳定核拓展至不稳定核. 在不稳定原子核中涌现出许多新奇的物理现象, 而研究这些现象是核物理领域的重要课题. 过去几十年中, 原子核相对论密度泛函理论取得了长足的发展, 在描述和解释原子核各种性质方面取得了很大成功. 本文介绍原子核物理中相对论密度泛函理论的基本概念, 简要回顾相对论密度泛函的发展历史, 阐述相对论密度泛函理论在描述原子核性质方面的优势和特点, 主要讨论相对论密度泛函理论在原子核质量、手征进动以及裂变动力学方面的最新应用. 最后, 文章简要综述原子核相对论第一性原理计算的最新成果, 这些成果为进一步构建微观普适的第一性原理相对论密度泛函奠定了基础.

关键词 原子核物理, 原子核动力学, 相对论密度泛函理论, 相对论第一性原理计算

在过去的几十年里, 世界范围内稀有同位素束流装置的发展使人们对核物理的认识逐渐从稳定核扩展到不稳定核. 特别是在丰中子不稳定原子核中, 实验上发现了许多新奇的物理特征和现象. 在理论方面, 原子核密度泛函理论(density functional theory, DFT)在对这些新奇现象的微观描述和预言中发挥了重要的作用. 原子核DFT包括满足伽利略对称性的非相对论DFT和满足洛伦兹对称性的相对论(亦称协变)DFT, 即CDFT(covariant density functional theory). CDFT在相关研究中取得了很多成功, 受到了许多关注. 例如, 文献[1]详细介绍了CDFT的发展及其在原子核基态和激发态性质中的应用.

众所周知, 原子核多体问题的直接求解是非常困难的, 特别是对于重核. 第一性原理计算方法从高精度的现实核力出发, 求解原子核多体哈密顿量[2,3]. 这种方法的计算开销巨大, 通常只适用于非常轻的原子核. 近

年来, 随着高性能超级计算机的快速发展, 将第一性原理计算扩展到更重原子核性质的研究也取得了许多进展[4]. 组态相互作用壳模型[5]通过引入有限的组态空间以及组态间的有效相互作用, 在给定的组态空间中求解哈密顿量. 这种方法受到组态空间大小的限制, 通常适用于中等质量的原子核. 在原子核DFT中, 原子核的基态能量表示为核子密度的普适泛函, 从能量密度泛函出发, 复杂的多体问题通过变分原理可处理为简单的单体问题, 从而变得相对容易求解. DFT适用于核素图中所有原子核的基态, 而要描述原子核的各种激发态性质, 则须在原子核DFT的基础上进行适当的扩展.

CDFT自洽地考虑了洛伦兹对称性, 其相对论性体现在量级约为几百MeV(核子质量约为1000 MeV)的标量和矢量平均势场. 这两个势场分别提供很大的吸引和排斥相互作用, 可有效地描述原子核的自束缚性质. 在非相对论DFT中, 这些涉及量级很大的平均势场的

引用格式: 王亚坤, 许方方, 黄天行, 等. 原子核相对论密度泛函理论. 科学通报, 2023, 68: 1074–1081

Wang Y K, Xu F F, Huang T X, et al. Relativistic density functional theory in nuclear physics (in Chinese). Chin Sci Bull, 2023, 68: 1074–1081, doi: [10.1360/TB-2022-0950](https://doi.org/10.1360/TB-2022-0950)

自由度被隐藏起来,只体现其相互抵消之后的结果,这样做的代价是需要人为引入自旋轨道相互作用来描述原子核中很大的自旋轨道劈裂.这一点可以通过利用相似重整化群方法对CDFT进行非相对论约化得以清楚地看到.值得一提的是,相似重整化群方法也是连接相对论和非相对论DFT的一种有效途径^[6].在CDFT中,核子由Dirac旋量场描述,这自动提供了自旋自由度.此外,在相对论框架下,只考虑两核子相互作用,采用Brueckner方法可以较好地描述核物质和有限核的基态性质^[7].在CDFT中,势场的奇时间部分由核子流决定,即由矢量场的类空分量决定.在协变表述下,由于洛伦兹对称性,类空分量与类时分量具有相同的耦合常数,因此,考虑奇时间场时不需要引入额外的参数,这种对奇时间场的自洽处理对描述原子核的转动性质具有重要意义^[8,9].

由于这些优势,CDFT在过去的几十年里受到了广泛的关注,已成功地应用于描述从有限原子核到核物质、从稳定原子核到不稳定原子核、从球形原子核到形变原子核、从原子核基态到激发态、从通常的核物质到具有奇异自由度的超核物质等多种原子核现象^[1].此外,CDFT还被广泛用于研究致密星体的状态方程^[10,11],并为天体环境中的核合成提供了重要的核物理论输入量.

1 协变密度泛函理论

DFT的基础是Hohenberg-Kohn定理^[12],该定理证明了对于一个多粒子系统,体系的所有性质,特别是基态能量,可以写成基态密度的普适泛函,而基态密度可以通过将能量密度泛函关于密度做变分得到.

DFT的实用性取决于能否找到一个精确的能量密度泛函.Kohn-Sham DFT^[13]提供了一个构建能量密度泛函的有效方法.该方法引入一个具有真实基态密度的无相互作用辅助系统,并对该无相互作用系统应用Hohenberg-Kohn定理,通过变分导出一个单粒子运动方程,即Kohn-Sham方程.形式上,Kohn-Sham DFT的求解与Hartree-Fock方法类似,但是,前者仅需处理局域项,避免了复杂的非局域Fock项.迄今为止,DFT的大多数实际应用都使用Kohn-Sham方案,因为它可以很好地包含壳效应.值得一提的是,最近基于机器学习构建的原子核无轨道密度泛函,无须引入辅助系统,直接应用Hohenberg-Kohn定理对能量变分,即可得到体系准确的包含壳效应的基态密度^[14].

人们通常使用两种方法构建多体系统的能量密度泛函:一种是从所谓的第一性原理出发,例如对于库仑系统,由于库仑相互作用已知,第一性原理方法构造能量密度泛函取得了很大的成功.然而,对于原子核系统,核子间的相互作用是非常复杂的,因此人们通常采用另一种方法,即构建一个唯象的能量密度泛函,其参数通过拟合部分实验数据得到.事实上,类似方法在早期的库仑系统研究中也得到了应用.

原子核CDFT可以追溯到20世纪70年代Serot和Walecka^[15]构建的相对论 σ - ω 模型,在该模型中,原子核由一定数量的Dirac核子组成,核子之间通过交换标量 σ 介子和矢量 ω 介子发生相互作用.为了区分质子和中子,Serot在 σ - ω 模型中引入了同位旋矢量 ρ 介子^[16].此外,合理地处理核物质及其表面性质需要考虑介子-核子有效相互作用顶点的密度依赖性,这可以通过在拉氏量中引入非线性介子自相互作用或者对耦合常数引入显式的密度依赖来实现.Boguta和Bodmer^[17]考虑了标量 σ 介子的非线性耦合;Sugahara和Toki^[18]考虑了矢量 ω 介子的非线性自耦合;Long等人^[19]考虑了同位旋矢量 ρ 介子的非线性自耦合.显式地引入密度依赖耦合常数的工作可参见文献^[19~21].此外,在介子交换图像下,包含交换项的相对论Hartree-Fock理论也广泛地用于研究有限核和核物质的性质^[22,23].目前,点耦合密度泛函由于其形式简单、计算方便等优势,被广泛应用于许多实际计算中.原子核CDFT的核心是相对论Kohn-Sham方程,即Dirac方程:

$$[\alpha \cdot (-i\nabla - V) + V + \beta(m + S)]\psi_k = \varepsilon_k \psi_k, \quad (1)$$

其中,自洽场中标量势 $S(\mathbf{r})$ 、矢量势的类空分量 $V(\mathbf{r})$,以及矢量势的类时分量 $V(\mathbf{r})$ 是各种密度和流的函数.

原子核是自束缚系统,并不存在所谓的外场,这是库仑系统和原子核系统的一个重要区别.需要指出的是,Hohenberg-Kohn定理是针对受外场约束的系统给出的,由于自束缚系统满足平移不变性,实验室参考系中的精确密度必须是一个常数,对应的Hohenberg-Kohn定理显然是平庸的.文献^[24]利用波包密度泛函的概念对自束缚体系的DFT进行了诠释.由于质心运动和内禀运动是完全解耦的,可以证明Hohenberg-Kohn定理对分离质心运动后给出的内禀坐标系中内禀密度是成立的.

利用Runge-Gross定理^[25],可以将定态DFT推广到时间依赖的DFT,用于描述原子核动力学过程.该定理

将时间依赖的多体问题处理为时间依赖的单体问题. 在原子核动力学的研究中, 为了不对系统密度分布的演化引入人为的对称性限制, 在三维格点空间中求解CDFT变得十分重要. 不同于非相对论中的Schrödinger方程, 在相对论框架下, 这意味着需要在三维格点空间求解Dirac方程. 然而, 由于反核子谱的存在, 一般的迭代法会导致严重的变分塌缩问题. 最近, 这一问题得到了有效的解决, 在此基础上, 文献[26]首次发展了三维格点空间中的含时协变密度泛函理论(time-dependent covariant density functional theory, TDCDFT).

2 原子核质量的整体描述

质量是原子核的基本性质之一, 在原子核结构演化等研究中扮演着重要的角色. 原子核质量也是研究天体核合成, 特别是快中子俘获过程的重要核物理输入量, 对理解重元素起源这一基本科学问题具有重要意义[27,28]. 尽管目前实验上已经测得约3000种原子核的质量, 但研究快中子俘获过程需要大量丰中子核的质量数据, 这些数据在短期内尚无法通过实验测量确定, 因此依赖于理论预言.

原子核DFT是迄今唯一能够微观自洽地描述核素图上几乎所有原子核质量的理论方法. 目前, 人们已经利用非相对论和相对论DFT对原子核质量等基态性质进行了系统深入的研究[29,30]. 其中, 北京大学团队[31]发展的PC-PK1点耦合协变密度泛函, 在描述和预言原子核质量方面取得了很好的效果, 是目前对原子核质量描述精度最高的密度泛函之一.

文献[32]基于PC-PK1密度泛函, 结合五维集体哈密顿量方法[33,34]考虑超越平均场的动力学关联效应, 对当时实验已知质量的偶偶原子核进行了微观自洽的研究. 图1给出了PC-PK1密度泛函所预言的575个偶偶原子核的质量与实验数据的差异. 结果表明, PC-PK1对原子核质量预言的均方根偏差为1.14 MeV. 在此基础上, 文献[35]预言了质子数 $8 \leq Z \leq 104$ 范围内所有偶偶原子核的质量, 并对原子核的半径、形变和低激发谱等性质进行了系统研究.

鉴于PC-PK1密度泛函在描述原子核质量方面所取得的成功, 文献[36]基于PC-PK1密度泛函, 通过求解球形的相对论连续谱Hartree-Bogoliubov方程, 恰当考虑对于描述丰中子原子核很重要的连续谱效应, 预言了质子数 $8 \leq Z \leq 120$, 从质子滴线到 neutron 滴线的所有原子核质量, 并探索了核版图的边界. 为了考虑原子核轴

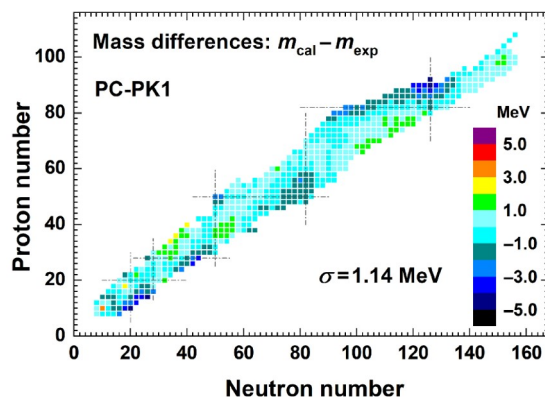


图1 PC-PK1密度泛函预言的575个偶偶原子核质量与实验结果的差异[32]. σ 代表理论值和实验值间的均方根偏差. Copyright © 2015, American Physical Society

Figure 1 Mass differences between the PC-PK1 predictions and the data for 575 even-even nuclei[32]. The σ value represents the root-mean-square deviations between the theoretical predictions and data. Copyright © 2015, American Physical Society

对称形变及其与连续谱的耦合效应[37], 文献[38]基于PC-PK1密度泛函, 通过求解轴对称形变的相对论连续谱Hartree-Bogoliubov方程, 在质子数 $8 \leq Z \leq 120$ 范围内, 研究了2583个偶偶原子核的质量、半径等性质. 对于已知质量的637个原子核, 理论预言的均方根偏差为1.518 MeV. 考虑原子核三轴形变和动力学关联能后, 可进一步降低理论预言的均方根偏差[35].

3 原子核的手征进动

手征对称性广泛存在于自然界中, 如人的左右手、海螺壳的螺旋性、化学分子的手性等. 1997年, Frauendorf和Meng[39]预言了原子核层次的手征对称性, 并指出其实验信号为手征双重带, 即宇称相同且能量近简并的一对转动带. 2001年, 实验上首次在原子核 ^{130}Cs 、 ^{132}La 、 ^{134}Pr 和 ^{136}Pm 中观测到了理论所预言的手征双重带, 从而证实了原子核手征对称性的存在[40]. 截至目前, 人们已在 $A=80$ 、100、130和190质量区中发现了50多例手性原子核[41].

在理论研究方面, 粒子转子模型[42]、广义相干态模型[43]、相互作用玻色费米-费米模型[44]、投影壳模型[45]等是研究原子核手征对称性的常用方法, 但这些理论方法都需引入一些唯象参数, 这限制了模型的预言能力. 原子核CDFT从微观的核子自由度出发, 在不引入额外可调参数的情况下, 能够自洽包含价核子与核芯的极化效应, 为描述原子核手征对称性提供了重要的微观理论工具.

文献[46]基于形变约束和组态固定的CDFT, 研究了原子核 ^{106}Rh 中的三轴形状共存和可能存在的手征双重带. 该研究指出, 在 ^{106}Rh 中存在两个以上具有三轴形变的能量极小, 且它们具有适合建立手征双带的粒子空穴组态, 因此原子核中可能存在多重手征双带(multiple chiral doublet, $M\chi D$). 这一预言在2013年得到了实验的证实. 文献[47]首次利用三维倾斜轴推转CDFT, 微观自洽地研究了 ^{106}Rh 中的 $M\chi D$ 现象, 理论计算准确再现了 ^{106}Rh 中负宇称手征晕带的能谱以及跃迁的实验值, 预言了正宇称手征双带的存在, 并通过研究不同转动频率下总角动量方位角的变化, 给出了 ^{106}Rh 中手征转动的角动量几何图像, 进一步提供了原子核 $M\chi D$ 存在的微观理论基础.

为了微观自洽地描述手征激发所导致的双带之间的能量差, 最近, 三维格点空间的TDCDFT成功应用于描述原子核的手征双重带[48]. 通过分析手征转动原子核波函数随时间的演化, 相关研究揭示了原子核手征转动的动力学机制: 对于手征双重带中能量较低的转动带, 原子核绕角动量方向做定轴转动; 对于能量较高的转动带, 原子核绕角动量方向做周期性进动, 即手征进动, 进动的频率对应于手征激发能. 在原子核的本体系中, 手征进动的微观示意图如图2所示. 与一般的进动现象不同, 这里的进动轴并不沿任何的惯量主轴.

4 原子核的裂变

原子核裂变是重原子核分裂成两个或多个质量较小原子核的衰变过程, 是一个复杂的量子多体动力学过程. 理解原子核裂变过程的微观机制是核物理的长期挑战之一. 原子核DFT是研究原子核裂变的重要微观理论基础. 目前, 基于DFT研究裂变的微观方法主要有时间依赖的生成坐标方法(time-dependent generator coordinate method, TDGCM)和TDCDFT. 前者将原子核的波函数表示成依赖于集体坐标的生成函数叠加, 能够绝热地、量子化地描述整个裂变过程, 但是没有包含裂变过程中的耗散效应. 后者能够自动包含耗散效应, 更适合描述从裂变外垒到断裂点的裂变过程, 但没有包含裂变过程中的全部量子效应. 最近, 文献[49]基于PC-PK1密度泛函, 通过结合完全量子化的TDGCM和能够合理考虑耗散的TDCDFT, 对 ^{240}Pu 诱发裂变的动力学过程进行了微观自洽研究. 通过计算诱发裂变电荷产额和碎片的总动能分布, 并与实验结果比较, 揭示了原子核的量子涨落以及耗散效应对描述

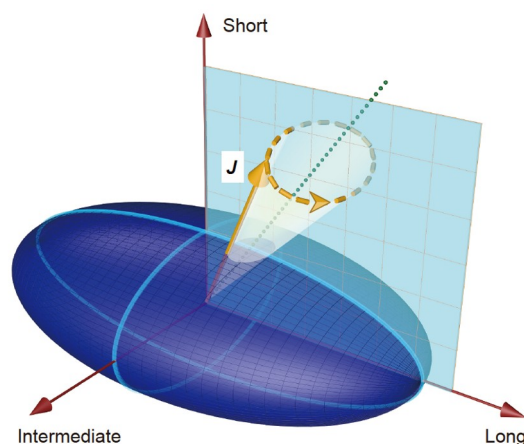


图2 本体系中三轴原子核手征进动示意图[48]. Short、intermediate和long分别表示三轴原子核的短轴、中间轴和长轴. 原子核的总角动量 J 绕着本体系中点虚线所示的轴进动. Copyright © 2022, American Physical Society

Figure 2 A schematic picture for the “chiral precession” of a triaxial nucleus in the body-fixed frame, where the short, intermediate, and long axes are shown explicitly[48]. The total angular momentum J of the nucleus is rotating about an axis (dotted line) in the body-fixed frame. Copyright © 2022, American Physical Society

原子核裂变的重要作用, 从而为发展微观描述原子核裂变的理论方法指明了方向.

文献[50]基于PC-PK1密度泛函, 在TDCDFT框架下, 研究了 ^{240}Pu 诱发裂变最后阶段的“脖子”形成与断裂的动力学问题. 图3展示了 ^{240}Pu 的质子局域化函数分布和总密度分布随时间 $t=1150, 1200, 1250$ fm/c的变化, 其中, 1150 fm/c对应裂变碎片即将断裂之前的时刻, 1200 fm/c对应断裂时刻, 1250 fm/c对应裂变碎片受到库仑排斥开始加速分离的时刻. 在这3个时刻, “脖子”处的局域化函数值接近于1, 而阴影区域左右两侧核子数均在4附近, 这表明原子核在断裂点附近出现两个 α 结团. 随着时间的演化, 两个 α 结团受库仑排斥而逐渐分开, 最终被两个新生成的碎片吸收. 需要指出的是, 这一原子核的断裂机制也为原子核的三分裂、四分裂现象提供了可能的微观解释.

5 相对论第一性原理计算

近年来, 发展基于现实核子-核子相互作用的CDFT已成为原子核理论研究的重要前沿课题. 作为强相互作用的基本理论, 量子色动力学(quantum chromodynamics, QCD)在描述低能核物理时存在难以处理的非微扰特性. 因此, 基于手征微扰理论的现实核力在低能原子核物理研究中扮演着重要的角色. 对于核力的

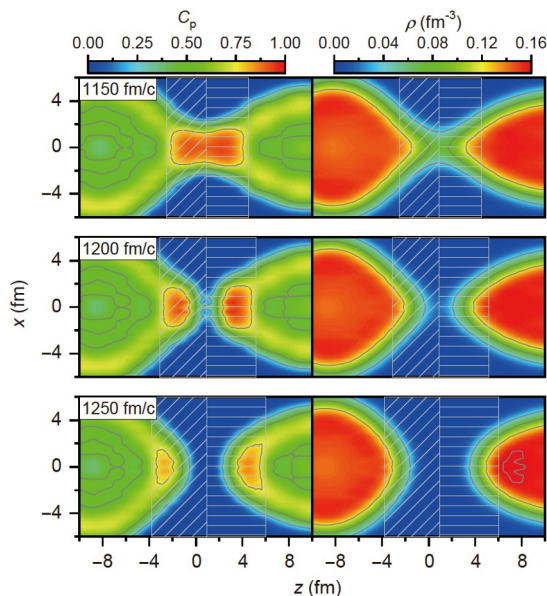


图3 原子核 ^{240}Pu 裂变过程中质子局域化函数 C_p (左)和总密度(右)在时间 $t=1150, 1200, 1250$ fm/c的分布^[50]. 以 z 轴方向上密度最低的点为原点, 向左和向右的阴影区域都恰好包含两个质子. Copyright © 2022, American Physical Society

Figure 3 The proton localization function C_p (left) and total density (right), at $t=1150, 1200$, and 1250 fm/c for a specific fission trajectory of ^{240}Pu ^[50]. Starting from the point of lowest density along the z axis, the shaded areas on the left and on the right denote regions that contain exactly two protons each. Copyright © 2022, American Physical Society

长程和中程部分, 手征对称性破缺产生的 π 介子交换起主要作用, 而对于短程部分, 则需引入重整化参数来表示, 目前这些参数一般通过拟合核子-核子散射的实验数据来确定. 人们已经发展了许多方法来求解基于手征核力的原子核量子多体问题, 并对比较轻的原子核进行了研究, 但结果并不完全令人满意, 因为只有再进一步引入包含额外唯象参数的三体核力之后, 才能给出与实验相符的结合能、半径等性质^[51].

最近, 基于完全自洽的相对论Brueckner-Hartree-Fock(relativistic Brueckner-Hartree-Fock, RBHF)理论, 在不包含三体力的情况下, 对轻原子核的结合能和半径给出了很好的描述. 图4展示了RBHF理论计算得到的 ^{16}O 每核子能量和电荷半径的计算结果, 及其与非相对论BHF和相对论有效密度近似(relativistic effective density approximation, EDA)计算结果的比较. 结果表明, 相对论效应能够显著改善 ^{16}O 每核子能量和电荷半径的理论描述. 对比EDA的计算结果可以发现, RBHF的自洽性对改善理论描述也非常重要.

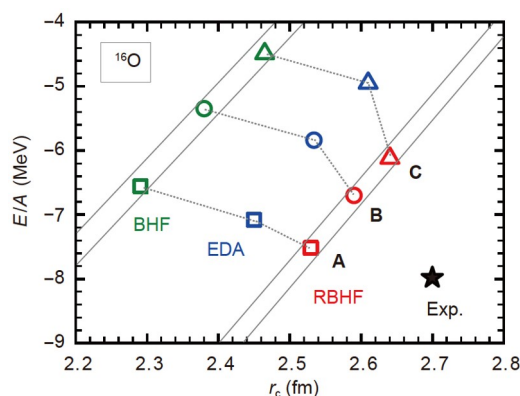


图4 基于Bonn A、B、C相互作用, 相对论Brueckner-Hartree-Fock (RBHF)理论计算得到的 ^{16}O 每核子能量 E/A 和电荷半径 r_c , 及其与非相对论Brueckner-Hartree-Fock(BHF)以及相对论有效密度近似(EDA)结果的对比^[7]. Copyright © 2019, Elsevier

Figure 4 Energy per nucleon E/A for ^{16}O as a function of the charge radius r_c calculated by the relativistic Brueckner-Hartree-Fock (RBHF) using the interactions Bonn A, B, and C, in comparison with the results given by the Brueckner-Hartree-Fock (BHF) and the relativistic effective density approximation (EDA)^[7]. Copyright © 2019, Elsevier

最近, 文献[52]通过神经网络表示原子核的多体波函数, 发展了一种新的相对论第一性原理计算方法, 即相对论变分蒙特卡洛方法, 并从协变的无 π 介子有效场论出发, 求解了核子数小于等于4的原子核基态. 结果表明, 相对论效应可以解决非相对论计算中只考虑两体力时的Thomas塌缩(Thomas collapse)问题, 即 $A \geq 3$ 的原子核结合能会随着动量截断的增大趋于发散. 此外, 相对论效应也可以压低三体力对结合能的贡献. 该研究为原子核中相对论效应和三体力的研究开辟了一条新的途径.

6 总结和展望

在过去的几十年里, 原子核相对论密度泛函理论得到了很大的发展, 并被广泛应用于研究原子核的各种现象和性质. 本文简要介绍了相对论密度泛函理论的基本概念, 及其在描述原子核质量、手征进动以及核裂变动力学过程中的一些应用. 目前, 这一领域仍有许多重要的问题亟待解决, 如何在协变密度泛函理论中考虑张量力效应便是一例. 在相对论Hartree-Fock框架下, 关于该问题已经有一些研究^[23,53,54], 但即使仅关注基态, 形变的相对论Hartree-Fock计算也非常复杂和耗时. 另一个重要的问题是如何确定张量力的强度. 一般来讲, 通过实验数据确定密度泛函中的张量项是困难的, 这是因为张量项与其他项之间有很强的耦合. 相

对论第一性原理计算可以为协变密度泛函的构建提供必要的信息。此外,在构建协变密度泛函时,除了实验数据外,也许还需要考虑在过饱和密度和亚饱和密度

下第一性原理计算的结果。从这些意义上讲,相对论第一性原理计算对构建一个普适的相对论密度泛函是至关重要的。

参考文献

- Meng J. Relativistic Density Functional for Nuclear Structure. Singapore: Word Scientific, 2016
- Barrett B R, Navrátil P, Vary J P. *Ab initio* no core shell model. *Prog Part Nucl Phys*, 2013, 69: 131–181
- Carlson J, Gandolfi S, Pederiva F, et al. Quantum Monte Carlo methods for nuclear physics. *Rev Mod Phys*, 2015, 87: 1067–1118
- Coraggio L, Pastore S, Barbieri C. The future of nuclear structure: Challenges and opportunities in the microscopic description of nuclei. *Front Phys*, 2021, 8: 626976
- Caurier E, Martínez-Pinedo G, Nowacki F, et al. The shell model as a unified view of nuclear structure. *Rev Mod Phys*, 2005, 77: 427–488
- Ren Z X, Zhao P W. Toward a bridge between relativistic and nonrelativistic density functional theories for nuclei. *Phys Rev C*, 2020, 102: 021301
- Shen S H, Liang H Z, Long W H, et al. Towards an *ab initio* covariant density functional theory for nuclear structure. *Prog Part Nucl Phys*, 2019, 109: 103713
- Meng J, Peng J, Zhang S Q, et al. Progress on tilted axis cranking covariant density functional theory for nuclear magnetic and antimagnetic rotation. *Front Phys*, 2013, 8: 55–79
- Vretenar D, Afanasjev A V, Lalazissis G A, et al. Relativistic Hartree-Bogoliubov theory: Static and dynamic aspects of exotic nuclear structure. *Phys Rep*, 2005, 409: 101–259
- Sun B Y, Long W H, Meng J, et al. Neutron star properties in density-dependent relativistic Hartree-Fock theory. *Phys Rev C*, 2008, 78: 065805
- Yang J J, Piekarewicz J. Covariant density functional theory in nuclear physics and astrophysics. *Annu Rev Nucl Part Sci*, 2020, 70: 21–41
- Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys Rev*, 1964, 136: B864–B871
- Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys Rev*, 1965, 140: A1133–A1138
- Wu X H, Ren Z X, Zhao P W. Nuclear energy density functionals from machine learning. *Phys Rev C*, 2022, 105: L031303
- Serot B D, Walecka J D. The relativistic nuclear many-body problem. In: Negele J W, Vogt E, eds. *Advances in Nuclear Physics*. New York: Plenum Press, 1986
- Serot B D. A relativistic nuclear field theory with π and ρ mesons. *Phys Lett B*, 1979, 86: 146–150
- Boguta J, Bodmer A R. Relativistic calculation of nuclear matter and the nuclear surface. *Nucl Phys A*, 1977, 292: 413–428
- Sugahara Y, Toki H. Relativistic mean-field theory for unstable nuclei with non-linear σ and ω terms. *Nucl Phys A*, 1994, 579: 557–572
- Long W H, Meng J, Giai N V, et al. New effective interactions in relativistic mean field theory with nonlinear terms and density-dependent meson-nucleon coupling. *Phys Rev C*, 2004, 69: 034319
- Nikšić T, Vretenar D, Finelli P, et al. Relativistic Hartree-Bogoliubov model with density-dependent meson-nucleon couplings. *Phys Rev C*, 2002, 66: 024306
- Lalazissis G A, Nikšić T, Vretenar D, et al. New relativistic mean-field interaction with density-dependent meson-nucleon couplings. *Phys Rev C*, 2005, 71: 024312
- Long W H, Van Giai N, Meng J. Density-dependent relativistic Hartree-Fock approach. *Phys Lett B*, 2006, 640: 150–154
- Long W H, Sagawa H, Giai N V, et al. Shell structure and ρ -tensor correlations in density dependent relativistic Hartree-Fock theory. *Phys Rev C*, 2007, 76: 034314
- Nakatsukasa T, Matsuyanagi K, Matsuo M, et al. Time-dependent density-functional description of nuclear dynamics. *Rev Mod Phys*, 2016, 88: 045004
- Runge E, Gross E K U. Density-functional theory for time-dependent systems. *Phys Rev Lett*, 1984, 52: 997–1000
- Ren Z X, Zhao P W, Meng J. Dynamics of the linear-chain alpha cluster in microscopic time-dependent relativistic density functional theory. *Phys Lett B*, 2020, 801: 135194
- Mumpower M R, Surman R, McLaughlin G C, et al. The impact of individual nuclear properties on r -process nucleosynthesis. *Prog Part Nucl Phys*, 2016, 86: 86–126
- Jiang X F, Wu X H, Zhao P W. Sensitivity study of r -process abundances to nuclear masses. *Astrophys J*, 2021, 915: 29
- Erler J, Birge N, Kortelainen M, et al. The limits of the nuclear landscape. *Nature*, 2012, 486: 509–512
- Afanasjev A V, Agbemava S E, Ray D, et al. Nuclear landscape in covariant density functional theory. *Phys Lett B*, 2013, 726: 680–684
- Zhao P W, Li Z P, Yao J M, et al. New parametrization for the nuclear covariant energy density functional with a point-coupling interaction. *Phys Rev C*, 2010, 82: 054319

- 32 Lu K Q, Li Z X, Li Z P, et al. Global study of beyond-mean-field correlation energies in covariant energy density functional theory using a collective Hamiltonian method. *Phys Rev C*, 2015, 91: 027304
- 33 Nikšić T, Li Z P, Vretenar D, et al. Beyond the relativistic mean-field approximation. III. Collective Hamiltonian in five dimensions. *Phys Rev C*, 2009, 79: 034303
- 34 Li Z P, Nikšić T, Vretenar D, et al. Microscopic analysis of nuclear quantum phase transitions in the $N \approx 90$ region. *Phys Rev C*, 2009, 79: 054301
- 35 Yang Y L, Wang Y K, Zhao P W, et al. Nuclear landscape in a mapped collective Hamiltonian from covariant density functional theory. *Phys Rev C*, 2021, 104: 054312
- 36 Xia X W, Lim Y, Zhao P W, et al. The limits of the nuclear landscape explored by the relativistic continuum Hartree-Bogoliubov theory. *Atomic Data Nucl Data Tables*, 2018, 121-122: 1–215
- 37 Zhang K Y, Pan C, Zhang S Q, et al. Towards a high-precision nuclear mass table with deformed relativistic Hartree-Bogoliubov theory in continuum (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2021, 66: 3561–3569 [张开元, 潘琮, 张双全, 等. 基于形变相对论连续谱理论构建高精度原子核质量表. *科学通报*, 2021, 66: 3561–3569]
- 38 Zhang K, Cheoun M K, Choi Y B, et al. Nuclear mass table in deformed relativistic Hartree-Bogoliubov theory in continuum, I: Even-even nuclei. *Atomic Data Nucl Data Tables*, 2022, 144: 101488
- 39 Frauendorf S, Meng J. Tilted rotation of triaxial nuclei. *Nucl Phys A*, 1997, 617: 131–147
- 40 Starosta K, Koike T, Chiara C J, et al. Chiral doublet structures in odd-odd $N=75$ isotones: Chiral vibrations. *Phys Rev Lett*, 2001, 86: 971–974
- 41 Xiong B W, Wang Y Y. Nuclear chiral doublet bands data tables. *Atomic Data Nucl Data Tables*, 2019, 125: 193–225
- 42 Qi B, Zhang S Q, Meng J, et al. Chirality in odd- A nucleus ^{135}Nd in particle rotor model. *Phys Lett B*, 2009, 675: 175–180
- 43 Raduta A A, Raduta A H, Petrache C M. New type of chiral motion in even-even nuclei: The ^{138}Nd case. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2016, 43: 095107
- 44 Brant S, Tonev D, de Angelis G, et al. Dynamic chirality in the interacting boson fermion-fermion model. *Phys Rev C*, 2008, 78: 034301
- 45 Chen F Q, Chen Q B, Luo Y A, et al. Chiral geometry in symmetry-restored states: Chiral doublet bands in ^{128}Cs . *Phys Rev C*, 2017, 96: 051303(R)
- 46 Meng J, Peng J, Zhang S Q, et al. Possible existence of multiple chiral doublets in ^{106}Rh . *Phys Rev C*, 2006, 73: 037303
- 47 Zhao P W. Multiple chirality in nuclear rotation: A microscopic view. *Phys Lett B*, 2017, 773: 1–5
- 48 Ren Z X, Zhao P W, Meng J. Dynamics of rotation in chiral nuclei. *Phys Rev C*, 2022, 105: L011301
- 49 Ren Z X, Zhao J, Vretenar D, et al. Microscopic analysis of induced nuclear fission dynamics. *Phys Rev C*, 2022, 105: 044313
- 50 Ren Z X, Vretenar D, Nikšić T, et al. Dynamical synthesis of ^4He in the scission phase of nuclear fission. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 172501
- 51 Hebeler K. Three-nucleon forces: Implementation and applications to atomic nuclei and dense matter. *Phys Rep*, 2021, 890: 1–116
- 52 Yang Y L, Zhao P W. A consistent description of the relativistic effects and three-body interactions in atomic nuclei. *Phys Lett B*, 2022, 835: 137587
- 53 Jiang L J, Yang S, Sun B Y, et al. Nuclear tensor interaction in a covariant energy density functional. *Phys Rev C*, 2015, 91: 034326
- 54 Wang Z H, Zhao Q, Liang H Z, et al. Quantitative analysis of tensor effects in the relativistic Hartree-Fock theory. *Phys Rev C*, 2018, 98: 034313

Summary for “原子核相对论密度泛函理论”

Relativistic density functional theory in nuclear physics

Yakun Wang, Fangfang Xu, Tianxing Huang & Pengwei Zhao^{*}

School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China

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

The development of rare isotope beam facilities worldwide has extended our knowledge of nuclear physics from stable nuclei to unstable nuclei. The description of properties emerged from these unstable nuclei is one of the major goals for the nuclear community. However, it is known that the nuclear many-body problem is rather difficult to solve, especially for heavy nuclei. To have a comprehensive understanding of nuclear systems, one should in principle solve the nuclear many-body problem in a fully microscopic way.

Over the past decades, nuclear density functional theories have been greatly developed and successfully applied to describe and explain many nuclear phenomena. In particular, the relativistic density functional theory based on the relativistic quantum field theory and the density functional theory has received wide attention due to its attractive advantages. In the nuclear relativistic density functional theory, nucleons are described by Dirac spinors and the Lorentz symmetry is considered in constructing the nucleonic densities and currents. As a result, the spin degrees of freedom for nucleons are automatically taken into account and the pseudospin symmetry could be naturally explained. In addition, due to the consideration of Lorentz symmetry, the nuclear currents induced by the spatial parts of nuclear vector self-energies are included naturally, which have been proven to be very important for the description of nuclear excitations.

In this paper, we briefly introduce the basic concepts and ideas of the nuclear relativistic density functional theory and emphasize its advantages in the description of nuclear properties for the ground states and excited ones. After a short review on its historical development, the recent applications of the relativistic density functional theory to nuclear masses, nuclear chiral precession, and nuclear fission dynamics based on the well-known PC-PK1 relativistic density functional are illustrated. By taking into account the triaxial degree of freedom and the dynamical correlation energy, which is given by a five-dimensional collective Hamiltonian based on the microscopic relativistic density functional, the masses for all even-even nuclei have been discussed. In comparison with the data available, the calculated results well reproduce the data globally with an accuracy of about 1 MeV. The relativistic density functional theory has recently been extended to the time-dependent case in three-dimensional lattice space, and successfully applied to nuclear scattering, fusion, chirality, and fission. In this paper, the chiral precession in rotating triaxial nuclei is particularly discussed. Moreover, the study of nuclear fission dynamics based on the time-dependent relativistic density functional theory has also been discussed, where the formation of α clusters in the fission neck is mainly emphasized.

The recent results given by relativistic *ab initio* calculations including those from the relativistic Brueckner-Hartree-Fock theory and those based on the leading-order covariant pionless chiral effective theory are also briefly mentioned. These pieces of work have laid a foundation for an *ab initio* nuclear relativistic density functional theory, and together with the rapidly growing large-scale super computers, we believe that there will be more exciting work in the near future.

nuclear physics, nuclear dynamics, relativistic density functional theory, relativistic *ab initio* calculations

doi: [10.1360/TB-2022-0950](https://doi.org/10.1360/TB-2022-0950)