原子核的第一性原理计算

胡柏山, 马远卓, 李健国, 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

2020-12-18 收稿, 2021-02-02 修回, 2021-02-08 接受, 2021-02-09 网络版发表

国家重点研发计划(2018YFA0404401)、国家自然科学基金(11835001, 11921006, 12035001)、核物理与核技术国家重点实验室(北京大学)(NPT2020ZZ01)和中国博士后科学基金(2020M682747, BX20200136)资助

摘要 最近十余年, 由于手征有效场论和量子多体理论的发展以及计算机能力的提升, 原子核的第一性原理计算取得了较大的进展. 另外, 由于加速器设备和探测技术的发展, 实验研究接近越来越多的滴线核, 观测到一些新现象、新规律. 这些实验新结果为理论模型的发展提供了很好的机遇, 但也带来了巨大的挑战. 本文回顾我们利用第一性原理计算的原子核结构, 概述我们发展的手征有效场论三体力、含共振与连续态的第一性原理Gamow量子多体理论方法, 讨论滴线位置、滴线区原子核壳演化以及三体力在滴线核区的作用.

关键词 第一性原理, 手征有效场论, 三体力, 连续态和共振态, 滴线区原子核

原子核物理第一性原理(*ab initio*, first principles)计算是从最基本的现实核力出发, 用“严格”的量子多体理论计算原子核物理问题. 现实核力指可以重复两核子散射相移以及少体原子核性质的基本核力, 比如Bonn势^[1]、Argonne势^[2]和最近发展的手征有效场论核力^[3]. 量子多体方法包括无核芯壳模型(no-core shell model, NCSM)^[4]、耦合簇理论(coupled cluster, CC)^[5,6]、介质中相似重整化群(in-medium similarity renormalization group, IM-SRG)^[7]、量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo, QMC)^[8-10]、蒙特卡罗壳模型(Monte Carlo shell model)^[11,12]等. 在第一性原理计算中, 除了现实核力中的一些描述核力耦合强度的参数需要通过核子两体散射相移以及²H和³He实验数据确定外, 应该避免额外参数的引入和对称性的破坏, 这样才能可靠地揭示自然界物理规律. 第一性原理计算是人们长期追求的目标, 但由于其复杂性以及对计算资源的巨大需求, 在核物理领域开展第一性原理计算依然面临巨大的挑战. 重要的转折点出现于物理学家史蒂芬·温伯格

(Steven Weinberg)在20世纪90年代提出用手征有效场论构建核力, 成功地建立了以核子为自由度的多体原子核系统与底层理论(量子色动力学)的桥梁. 在此基础上, 经过人们的不懈努力, 手征有效核力与先进的量子多体方法终于在近些年相继发展起来. 与此同时, 超级计算机的飞速发展也使得原子核物理的第一性原理计算成为可能. 值得一提的是, 国内学者在现实核力的研究领域已经取得了丰硕的成果^[13-15].

通常, 原子核被认为是封闭的强相互作用体系, 但随着中子数(或质子数)的增加, 原子核会变得越来越弱束缚, 当增加到核子结合能为零时, 称为滴线核. 滴线外, 原子核不能被束缚, 只能以共振态的形式存在. 这些弱束缚或非束缚的原子核体系称为开放量子体系, 内部的核子可以与外界环境有较强的关联, 即应该考虑外界的连续谱效应. 自然界中存在的大多数开放系统是很难用薛定谔方程加上初始条件就可以描述的, 会受到外部环境严重影响. 这些开放系统的演化是非么正、不可逆的耗散过程, 相对于封闭系统的么正、

引用格式: 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

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, doi: 10.1360/TB-2020-1619

非耗散演化,其具有非常不同的行为规律,因此需要发展和拓展基础理论来描述这些开放量子系统.近20多年来,伴随着放射性核束物理、量子计算、量子通信、纳米物理等的兴起和发展,研究开放量子系统的演化成为量子力学基础理论发展的主要方向之一.在核物理领域,滴线附近原子核的最大特点是弱束缚,它受到周围环境中核衰变道和散射连续态的影响,是一个开放的量子多体系统,具有与稳定原子核很不一样的奇特结构和动力学性质,例如,核芯之外可能会存在很低的密度分布(晕现象)、奇异的集体运动模式(如矮共振等)、内禀共振、与连续态可以发生很强的耦合以及传统幻数的消失与新幻数的产生等.这些现象预示着在极端同位旋条件下,原子核的结构和相互作用方式将发生系统性演变,会出现以新结构自由度和有效相互作用为表征的新物理.研究远离稳定线的核又与平稳和爆发性天体过程以及核物质状态方程密切相关,涉及当今国际上重要的前沿交叉科学问题.随着新一代放射性核束装置的建成和使用,如北京串列加速器国家实验室的低能放射性核束线GIRAFFE、兰州重离子加速器国家实验室的RIBLL2(second Radioactive Ion Beam Line in Lanzhou)、美国的FRIB(Facility for Rare Isotope Beams)、日本理化学研究所(Rikagaku Kenkyusho/Institute of Physical and Chemical Research, RIKEN)的Big RIPS、德国重离子研究中心(GSI)的Super FRS(Superconducting FRagment Separator)以及法国国家重离子加速器(GANIL)的SPIRAL(Production System of Radioactive Ion and Acceleration On-Line)等,越来越多的滴线区原子核将会被生成,这将给核物理研究带来非常大的机遇和挑战,尤其是对理论模型提出了非常高的要求.

从第一性原理出发,统一描述稳定原子核和弱束缚原子核是核物理领域最前沿的研究方向之一.由于第一性原理计算具有很强的预测性,它对原子核实验的解释及预言、核天体环境下元素合成过程的理解以及中子星结构等研究都至关重要.它不仅能够提供可靠的理论预言,而且能够在有效场论的基础上,建立起与底层基本理论联系的桥梁.第一性原理计算通常包含两个方面——高精度的现实核力与先进的量子多体方法.本文也将讨论这两个方面的发展.

基于有效场论的手征有效核力,是原子核第一性原理方法中最为重要的“输入量”.手征有效核力有两个显著的特点:(1)随着手征微扰的逐阶展开,核力的

精度显著提高;(2)三体力以及多体力会随着阶数的升高而自然出现.目前,到次次次领头阶(next-to-next-to-next-to-leading order, $N^3\text{LO}$)的两体力已经发展得较为成熟.三体力首次出现在次次领头阶(next-to-next-to-leading order, $N^2\text{LO}$),相较于两体力,其处理起来更加复杂,也是近些年才成功地引入到原子核第一性原理计算中.手征三体力对原子核的结合能、核物质的状态方程以及原子核的低激发谱都有至关重要的影响.因此,对滴线区原子核的计算,三体力的引入非常必要.

绝大多数第一性原理方法都是基于谐振子基进行计算的,虽然取得了极大的成功,但是存在的缺陷也非常明显:对于弱束缚核特别是晕核,很难在谐振子基矢空间给出与实验符合的谱学性质以及半径等信息.这是由于弱束缚核具有很低的单中子或质子发射阈值,核表面的密度在空间弥散很大,使得它与散射连续态以及核的一些衰变道之间有很强的耦合,而谐振子势是一种无限深势阱,它的波函数都是束缚的,有很强的局域性.为正确描述弱束缚原子核的结构和激发性质,需要理论计算中严格考虑束缚态、共振态和非共振连续态在此开放量子系统中的影响.

目前,可以包含连续态耦合效应的第一性原理方法主要有无核芯壳模型结合共振群方法(resonating group method, RGM)的连续态无核芯壳模型(no-core shell model with continuum, NCSMC)^[16,17]、格林函数蒙特卡罗(Green's function Monte Carlo, GFMC)^[8,9]以及在Gamow-Berggren基矢下的无核芯Gamow壳模型(no-core Gamow shell model, NCGSM)^[18,19]和复数耦合簇理论(complex coupled cluster, CC)^[5,6].此外,还有一些少体方法^[20].其中,NCSMC是可以同时处理结构和反应的第一性原理方法.理论上,NCSMC可以实现原子核体系的精确解,但由于其对计算资源的巨大需求,目前这种方法还局限在比较轻质量的核区(比如核子数 $A < 16$).NCGSM是NCSM在复动量空间的Gamow-Berggren基下的全组态混合计算方法,由于采用了Gamow-Berggren基矢,它可以统一处理束缚态、共振态以及非共振的连续态.但是,由于NCGSM是一种全组态混合计算方法,而Gamow-Berggren基的数目通常要远大于谐振子基矢,因此NCGSM的计算能力也比较有限,目前可以对核子数 $A < 6$ 的系统进行很好地描述.CC能包含连续态耦合效应处理中等质量区的原子核,但也只局限于闭壳原子核或闭壳核加减一两个核子的体系.在此研究背景下,我们课题组发展了在Gamow-

Berggren基下的多体微扰理论^[21~27],它是目前唯一一种可以处理轻质量和重质量的束缚、弱束缚以及非束缚原子核的第一性原理方法,可以自洽地计算弱束缚原子核的低激发谱、共振宽度或衰变寿命以及其他跃迁物理量。

与通常使用的Hilbert空间不同,在装备希尔伯特(rigged Hilbert)空间中Gamow-Berggren基下进行多体计算可以同时处理束缚核、弱束缚核和非束缚核。Gamow-Berggren基是将薛定谔方程的解推广到复动量平面上形成的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。关于Berggren基的具体理论框架可以参考文献^[28~32]。本文从现实核力出发,将哈密顿量表达在Gamow-Berggren基矢下,然后通过多体微扰理论,即拓展的 Q -box折叠图方法^[21~27,33~35],将维度巨大的rigged Hilbert空间的哈密顿量进行一种保本征值的相似变换,使得此哈密顿量对选定的闭壳核芯组态、价空间以及其他的空间进行退耦合,从而得到价空间的现实有效哈密顿量(valence-space realistic effective Hamiltonians)。与之类似,可以得到价空间的有效算符,进而对其他可观测量进行计算。在得到价空间现实有效哈密顿量后,用Gamow壳模型对复的价空间哈密顿量进行对角化,得到体系的本征值与波函数,进而对原子核体系给出理论描述。由于这种方法是从第一性原理出发得到现实有效哈密顿量,为了与采用拟合实验数据得到价空间唯象相互作用的Gamow壳模型^[36,37]做出区分,将Gamow-Berggren基下的多体微扰理论求得现实有效哈密顿量的方法命名为有核芯Gamow壳模型(core Gamow shell model, CGSM)。本文将以前述核力出发的可以包含连续态效应的CGSM为视角,对滴线核区最新的理论进展进行以下几方面的阐述:滴线位置与壳演化、三体力在滴线核区的角色、晕核的描述。

1 原子核存在的极限与壳演化

发现和理解原子核存在的极限是物理研究中最前沿的科学问题之一。具有一定数目质子的原子核中,可以加入的中子数是有限的,超出极限后,原子核将不能保持束缚状态,中子就会“滴落”。这种极限被称为中子滴线。反之,中子数目一定、不能加入更多质子的情况,被称为质子滴线。滴线外的原子核,单核子或双核子分离能为负,因此原子核将以发射核子的方式进行衰变。在非稳定核区的壳演化是放射性束物理中发现的另一

个重要的新现象,对于理解非稳定核区原子核的结构具有重要意义。本节将对近期观测到的氧(O)、氟(F)同位素滴线,正在寻找的钙(Ca)同位素滴线,以及相关的壳演化问题进行第一性原理的计算与讨论。

1.1 氧和氟同位素链

著名的“氧反常”(oxygen anomaly)是指氧同位素的中子滴线位于 $^{24}\text{O}(N=16)$ 处^[38,39],而仅增加一个质子的氟同位素的滴线却可以具有22个中子^[40,41],比氧多出6个中子。这一反常对理论模型提出了很大的挑战。虽然一些理论通过引入三体力来解释氧的滴线位置^[42],但更细致、自洽的解释需要综合考虑三体力、连续态以及pf壳的闯入态。此外, ^{28}O 是另一个很有趣的核:传统幻数 $Z=8$ 和 $N=20$ 预示着 ^{28}O 是双幻核。双幻核通常表现出比较稳定的结构。但是,目前的实验结果^[40,43,44]证实, ^{28}O 是非束缚核。由于目前的实验测量精度有限,还无法完全确定 ^{28}O 中是否存在 $N=20$ 的壳。

图1展示了几种不同的多体方法对氧和氟同位素链的基态能量及单中子分离能的计算^[25]。“This work”给出了用手征有效场论核力 NNLO_{opt} ^[46]在Berggren基下的CGSM计算结果。在CGSM计算中,价空间的单体和两体哈密顿量都是由多体微扰理论自洽得到,即壳模型术语中的单粒子能也由多体微扰理论自洽得到。此外,在CGSM计算中,Berggren基也由手征 NNLO_{opt} 核力通过求解复数空间的Gamow Hartree-Fock得到。因此,在CGSM计算中,除了输入手征有效场论核力外,没有引入其他的参数。由于我们最终是在价空间sdpf壳中进行组态混合的Gamow壳模型计算,因此也没有任何对称性被破坏(例如角动量或粒子数)。计算细节可以参考文献^[25]。图1还对比了以下几种多体方法的计算结果:复数空间的第一性原理coupled-cluster(complex CC)结果^[47]、唯象相互作用的GSM结果^[48]、第一性原理价空间介质中相似重整化群(valence-space in-medium similarity renormalization group, VS-IMSRG)结果^[49]以及采用唯象相互作用USDB^[50]和SDPF-M^[51]的壳模型(shell model, SM)计算。此外,有效相互作用壳模型经过优化有效相互作用矩阵元后也可以对丰中子^[52]和丰质子^[53]核给出很好的描述。

从图1可以看到,包含连续态效应的CGSM计算整体上很好地重复了存在的实验数据。在CGSM计算中可以自然地不包含连续态效应,即在谐振子基下,用多体微扰理论退耦合出价空间的有效相互作用。还可以

图1 (网络版彩色)理论计算的氧和氟同位素链的基态能量((a), (b))和单中子分离能((c), (d)). 实验数据取自文献[45]. 其中, “This work”给出了采用手征有效场论 NNLO_{opt} 核力的CGSM计算结果. 摘自文献[25]

Figure 1 (Color online) Calculated ground-state energies ((a), (b)) and one-neutron separation energies ((c), (d)) for oxygen and fluorine isotopes, compared with experimental data [45]. “This work” gives the CGSM result with chiral NNLO_{opt} interaction. Taken from Ref. [25]

看到, 包含连续态效应后, 基态能量会被拉低1 MeV左右. 物理解释是, 由于滴线区原子核与连续态的耦合较强, Berggren基矢可以同时包含束缚态、共振态以及连续态之间的耦合, 而利用谐振子基矢无法包含连续态耦合. 采用相同核力在Berggren基下的计算由于包含了连续态耦合自由度, 给出的能量较谐振子基矢下的结果更束缚. 从CGSM的单核子分离能结果中可以看到, ^{28}O 处于单核子分离能为0 MeV的临界点, 而双中子分离能略大于0 MeV. 此外, CGSM计算也很好重复了氟的实验结果. 可以看到, CGSM计算很好地给出了“氧反常”现象. 在我们的计算中, 氧链滴线附近的有效单粒子能(effective single-particle energy, ESPE)的中子 $0d_{3/2}$ 轨道是非束缚的, 但在氟滴线附近, 中子 $0d_{3/2}$ 轨道变成了束缚的轨道, 这使得氟滴线至少后移到 ^{29}F . 这里的有效单粒子能是在壳模型框架下通过单极哈密顿量得到的, 具体细节参考文献[25].

在CGSM计算中, 尽管采用了内禀哈密顿量, 但单粒子基是表达在实验室系中的, 当进行跨壳计算时需要考虑质心激发带来的影响. 然而, 表达在Berggren基下的多体哈密顿量与谐振子质心哈密顿量不对易, 无法使用通常壳模型计算中的Lawson质心修正方法. 我们通过在谐振子基下的相同计算, 测试了质心激发带来的影响, 发现其对低激发态的影响不是很大[21,54]. 因此, 本文中CGSM计算都没有考虑质心修正.

除了上述氧和氟同位素链的基态能量外, 低激发谱的研究也很有趣. 在氧链中, 许多实验和理论确定了中子数 $N=14$ 和 $N=16$ 为新的幻数. 图2显示了基于现实核力CD-Bonn的CGSM计算的激发谱. 可以看到, ^{24}O 具有较高的 2^+ 激发能, 支持了 $N=16$ 这个新幻数. 此外, 我们给出 ^{26}O 的基态具有0.23 MeV的共振宽度, 与 ^{26}O 是非束缚核一致. CGSM计算中, 由于采用了包含束缚态、共振态和散射连续态的Berggren基矢, 最后得到的多体计算结果中, 共振态往往镶嵌在散射连续态中. 图2中与CGSM计算的 ^{25}O 第2个 $3/2^+$ 激发态相连的阴影展示了一个连续态的例子. 关于更多谱的研究细节, 可以参考文献[21,25].

1.2 钙同位素链

除了氧同位素链外, 钙链是滴线核区物理研究的另一个热点. 钙链的中子滴线位于何处, 是一个非常具有挑战的问题. 同时, 钙链中有着丰富的壳演化现象: ^{40}Ca 和 ^{48}Ca 是双幻核. 此外, 实验和理论发现了 $N=32$ 和 $N=34$ 的新幻数[56,57], 而处于 $Z=20$, $N=50$ 的 ^{70}Ca 被期望是另一个双幻核. 目前, 实验已经证实了 ^{60}Ca 的存在[58]. 同中子素 ^{68}Ni 中确定了幻数 $N=40$ 的存在[59], 但 ^{64}Cr 和 ^{66}Fe 中 $N=40$ 的壳消失了[60–63], 而 $N=40$ 的壳是否在钙链中存在还没有定论. 此外, 如果钙中的 $N=50$ 壳存在, 类似于 ^{28}O 中 $N=20$ 的壳, 那么壳演化也许可以为研究滴线位

图2 (网络版彩色)CGSM计算的 $^{24-26}\text{O}$ 激发谱. 实验数据取自文献[38,55]. 共振态用短实线附近的阴影示意, 共振位置用短线表示, 共振宽度在共振位置附近用单位为MeV的数字给出. 最长的阴影示意 ^{25}O 中 $3/2^+$ 连续态. 在此计算中, 我们采用了 $V_{\text{low-k}}$ 软化的CD-Bonn现实核力. 摘自文献[21]

Figure 2 (Color online) Calculated excitation spectra of $^{24-26}\text{O}$ by CGSM, compared with available experimental data [38,55]. The resonant states are indicated by shading, and their widths (in MeV) are given by the numbers above or below the levels indicated by dashes. The longest shading indicates the ^{25}O scattering states of the $3/2^+$ channel. CD-Bonn interaction softened by $V_{\text{low-k}}$ is used in this calculation. Taken from Ref. [21]

置提供更多的物理信息. 我们以从现实核力CD-Bonn和手征有效场论 N^3LO 核力出发的CGSM, 对钙链进行了理论描述.

图3是文献[24]中CGSM基态能量和中子分离能的计算结果. 在计算中采用了 ^{48}Ca 为冻结核芯、中子 $\{1p_{3/2}, 1p_{1/2}, 0f_{5/2}, 0g_{9/2}\}$ -共振态+连续态, $1d_{5/2}$ -共振态+连续态的价空间. 而对于比 ^{60}Ca 重的同位素, 采用了 ^{54}Ca 为冻结核芯、中子 $\{0f_{5/2}, 0g_{9/2}\}$ -共振态+连续态, $1d_{5/2}$ -共振态+连续态的价空间, 以此来减少计算代价. CGSM计算对不同价空间的依赖性比较弱[24]. 从单中子分离能的结果中可以看到, CGSM预言的奇 A 核滴线位于 ^{57}Ca . 在我们的计算中, ^{59}Ca 的单中子分离能仅有 -326 keV . 同时, 为了验证计算结果对核力的敏感性, 利用 $V_{\text{low-k}}$ 重整化参数为 2.3 fm^{-1} 的CD-Bonn核力与手征核力 N^3LO 进行计算. 结果显示, CGSM计算对核力的敏感性不是非常强, 结合能变化约 $0.4\sim 2.9\text{ MeV}$. 然而, 利用手征核力 N^3LO 计算给出 ^{59}Ca 的单中子分离能为 80 keV . 综合考虑不同核力的计算结果, CGSM给出的 ^{59}Ca 单中子分离能处于 0 keV 附近. 图3也给出了能量密度泛函理论(density functional theory, DFT)结果[65]. 最近贝叶斯统计修正的DFT[66]预言, ^{59}Ca 是束缚核, 而 ^{61}Ca 以约50%的概率为束缚核. 第一性原理介质中相似重整化群

图3 (网络版彩色)CGSM计算的钙链的单中子分离能(a)、双中子分离能(b)以及基态能量(c). 实验数据取自文献[50,64]. 图中还给出了能量密度泛函SV-min[65]和介质中相似重整化群[7]的计算结果. 由于超过 ^{60}Ca 的奇核子数原子核在CGSM计算中变为非束缚核, 图中单中子分离能 S_n 只给到 ^{60}Ca . 文献[24]中的GSM表示本文的CGSM计算. 摘自文献[24]

Figure 3 (Color online) Calculated one- (a) and two-neutron (b) separation energies, and ground-state energy (c) by CGSM, compared with data [50,64] and calculations by SV-min DFT [65] and multi-reference IM-SRG [7]. The S_n calculations stop at ^{60}Ca because odd isotopes heavier than ^{60}Ca become unbound in calculations. Note: The label “GSM” in Ref. [24] refers to CGSM calculation in this paper. Taken from Ref. [24]

的计算则预言, 奇 A 核的滴线可能位于 $^{53-59}\text{Ca}$ [7]. 钙链的奇 A 核滴线位置还有待实验检验. 对于偶 A 核的滴线位置, CGSM的双中子分离能计算结果显示位于 ^{70}Ca . 我们的结果与DFT的预言一致[65].

关于钙链中丰富的壳演化物理, 通过计算第一个

2^+ 激发谱和有效单粒子能来举例分析. 文献[24]给出了CGSM计算的第一个 2^+ 激发谱能量. 其中, $N=32$ 和 $N=34$ 的 2^+ 激发能明显高于附近的同位素, 这也支持了 $N=32$ 和 34 出现新幻数的结论. 此外, CGSM给出 $N=40$ 的 2^+ 激发能比 $N=32$ 和 $N=34$ 的低很多, 暗示着 $N=40$ 壳的减弱. 从图4可以明显地看到这些壳演化规律. 其中, $0g_{9/2}$ 轨道的闯入会减弱 $N=40$ 壳, 而当 $N>40$ 时, $0g_{9/2}$ 将变为束缚态, 这也是钙链稳定性在 ^{60}Ca 以后会被增强, 而滴线延伸到 ^{70}Ca 的原因. 更多内容可以参考文献[24].

2 滴线区原子核中的手征三体力与连续谱

手征有效三体力首次出现在 $N^2\text{LO}$ 阶, 它包含有 2π 交换项、单 π 交换项和接触项, 会新出现两个低能耦合常数 c_D 和 c_E . 不同于两体相互作用的低能耦合常数可以通过两体散射相移确定, 由于缺乏三体散射数据, c_D 和 c_E 需要少体($A>2$)的实验数据确定. 相较于两体核力在谐振子基矢下表达的矩阵元, 计算手征有效三体核力的矩阵元要复杂得多, 计算量也随模型空间的增加呈指数增长. 由于复杂的计算、巨大的计算资源消耗, 目前国际上只有少数课题组拥有处理三体力的能力. 然而, 三体力的引入对第一性原理计算有着非常重要的影响. 因此, 将手征三体力与连续谱自由度联合起来对滴线区原子核进行第一性原理计算的意义也就凸显了出来. 本节将对滴线区原子核中的手征三体力与连续谱进行详细讨论.

图4 (网络版彩色)在CGSM框架下, 相对于 ^{48}Ca 作为冻结核芯的中子有效单粒子能(effective single-particle energies, ESPE)随核子数增加的变化. 摘自文献[24]

Figure 4 (Color online) Calculated effective single-particle energies (ESPE) with respect to the ^{48}Ca core, as a function of neutron number by CGSM. Taken from Ref. [24]

采用我们课题组发展的手征有效三体力[67,68], 结合CGSM对氧链进行了系统的理论研究. 图5给出了同时考虑三体力、连续态效应的CGSM计算结果, 具体细节可参考文献[26]. 在此计算中采用 ^{16}O 为冻结核芯、中子 $\{0d_{5/2}, 1s_{1/2}, d_{3/2}\}$ -共振态+连续态}的价空间. 图中的GSM是用 $N^3\text{LO}$ 两体力加上 $N^2\text{LO}$ 手征三体力的计算结果. SM(HO)表示用相同的多体微扰理论退耦合价空间相互作用, 但计算在谐振子基下进行, 即没有包含连续态效应. SM(WS)则表示在Woods-Saxon基下的计算, 而单粒子Woods-Saxon基矢是使用谐振子基矢展开的, 也没有包含连续态效应. CGSM则采用Berggren基矢, 很好地处理了束缚态、共振态与连续态的耦合. 对比包含(with 3N)和不包含(without 3N)三体力的结果, 可以看到, 不包含三体力时, ^{24}O 之后的同位素随中子数的增加基态能量一直在下降, 当加入三体力后, 能够成功解释“氧反常”的现象, 即 ^{25}O 开始变成非束缚核. 从图5可以看到, 三体力表现出较强的排斥效应, 且随

图5 (网络版彩色) $^{18-28}\text{O}$ 结合能的理论计算与实验结果[45]. 其中, “this work”代表CGSM理论计算结果, 包括: 纯两体(NN)、两体加三体(NN+3N), 以及Woods-Saxon基下的壳模型计算结果; SM(HO)与Continuum CC分别代表谐振子基下含有三体力的壳模型计算[42]和连续谱coupled cluster[47]的结果. 子图展现了手征三体力中两 π 交换项、单 π 交换项和接触项的贡献, 分别由 2π 、 1π 和contact表示. 文献[26]中的GSM表示本文的CGSM计算. 摘自文献[26]

Figure 5 (Color online) Calculated $^{18-28}\text{O}$ ground-state energies, compared with experimental data[45]. “this work” gives CGSM results: NN calculations, NN+3N calculations and the shell-model calculations performed in the Woods-Saxon bases. Other calculations: Conventional SM(HO) with 3N but without continuum[42] and continuum coupled cluster (CC)[47]. The inset shows the 3N contributions from two-pion exchange indicated by “ 2π ”, one-pion exchange plus contact indicated by “ 1π ” and contact term indicated by “contact”. Note: The label “GSM” in Ref. [26] refers to CGSM calculation in this paper. Taken from Ref. [26]

着核子数的增加而增强. 为了研究三体力中三项组成部分的贡献, 我们画出了图5中的插图. 可以看到, 两 π 项与接触项表现为排斥力而单 π 项为吸引力, 同时单 π 项和接触项的贡献近乎正好抵消, 最终由两 π 项提供主要贡献.

3 晕核的描述

由于弱束缚的特性, 在滴线区的原子核往往会与连续谱有较强的耦合, 同时表现出一些奇特的结构, 比如Borromean结构和晕. 在这些弱束缚核中, ^{17}Ne 是一个非常独特的例子, 它不仅具有Borromean结构, 而且非常有可能是唯一的双质子晕核^[69]. Borromean名字来源于Borromean环. Borromean环的特点是3个环相扣, 无法彼此分开, 但对于只有两个环的子系统, 都不是相扣在一起的, 可以彼此分开. 具体地, 对于束缚的 ^{17}Ne , 其子系统(^{16}F , p-p)都不是束缚的. 对于这样的体系, 三体力与连续谱的耦合都非常关键. 图6给出了纯两体核力以及两体加三体力的计算结果(相对于 ^{15}O 的结合能). 在此计算中采用了 ^{14}O 为冻结核芯、中子 $\{0p_{1/2}, 0d_{5/2}, 1s_{1/2}, 0d_{3/2}\}$ 、质子 $\{s_{1/2}$ -共振态+连续态, $d_{5/2}$ -共振态+连续态 $\}$ 的价空间. 可以看出, 只有正确考虑三体力的贡献, 才能给出与实验相一致的结论, 即 ^{16}F 非束缚、 ^{17}Ne 束缚. 因此, 三体力对于 ^{17}Ne 的Borromean结构形成至关重要.

关于 ^{17}Ne , 更有趣的讨论在于其密度分布. 图7给出了CGSM计算的 ^{17}Ne 价核子密度. 可以看到, 当自洽地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(晕结构), 而不考虑连续谱效应的计算结果则表明, 密度在大于10 fm区域几乎没有分布. 结合图6和7我们认为, 三体力与连续谱效应对 ^{17}Ne 的结构都有非常重要的影响: 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.

为了进一步探究 ^{17}Ne 密度分布的内部结构, 图8给出了CGSM计算的关联密度与关联密度的角分布. 通过质子-质子和质子-中子的关联密度对比, 可以看出 ^{17}Ne 中双质子晕结构的存在. 对于激发态, 其密度分布的中心位置则更“靠外”, 暗示了可能存在双质子发射的过程. 更多的讨论可以参考文献^[27].

4 总结与展望

先进技术与高水平实验设备的建成使用、理论模

图6 (网络版彩色)CGSM计算的 ^{17}Ne 和 ^{16}F 相对于 ^{15}O 基态的能量. 左边的两列实线给出了只有两体手征有效场论 N^3LO 核力的结果. 中间的第3和第4列实线表示同时采用手征两体 N^3LO 核力和手征三体 N^2LO 核力的结果. 最右边部分给出了实验结果^[45,69]. 摘自文献^[27]

图7 (网络版彩色)CGSM框架下的 ^{17}Ne 价核子密度计算结果. 图例中自上到下计算结果依次为两体力加三体力包含连续谱、两体力包含连续谱、两体力加三体力无连续谱, 以及两体力无连续谱. 为了对比, 图中 ^{15}O 箭头指示的虚线为 ^{15}O 的价核子密度. 文献^[27]中GSM表示本文的CGSM计算. 摘自文献^[27]

Figure 7 (Color online) The ^{17}Ne density in the valence space calculated by CGSM. The results from top to bottom are as follows: 2NF+3NF with continuum, 2NF only with continuum, 2NF+3NF without continuum, and 2NF only without continuum. The ^{15}O density (dash line) in valence space is also displayed for comparison. Note: The label “GSM” in Ref. ^[27] refers to CGSM calculation in this paper. Taken from Ref. ^[27]

型的飞速发展、计算机资源的日新月异, 我们正在目睹着原子核结构研究的革命性变化. 原子核的第一性原理

图 8 (网络版彩色)CGSM框架下计算的 ^{17}Ne 质子-质子和质子-中子关联密度. (a) 点划线、实线和点线分别代表角度 $\theta_{12}=30^\circ$ 、 90° 和 120° 的结果. 二维的 $1/2^-$ 基态(b)和 $3/2^-$ 激发态(c)的质子-质子关联密度 $\rho(r, \theta_{12})/\rho_0$ (用 ρ_0 的最大值作了归一). 摘自文献[27]

Figure 8 (Color online) Calculated proton-proton and proton-neutron correlation densities of the ^{17}Ne by CGSM. (a) Results with θ_{12} equal to 30° , 90° , 120° by dot-dashed, solid and dot lines, respectively. The two-dimension proton-proton correlation density $\rho(r, \theta_{12})/\rho_0$ (normalized with the maximum value ρ_0 of the correlation density) for the $1/2^-$ ground state (b) and $3/2^-$ excited state (c). Taken from Ref. [27]

计算使得我们从底层理论(量子色动力学)出发描述复杂原子核的图像成为可能, 并取得了令人瞩目的进展. 但是, 原子核的第一性原理计算面临的挑战也逐渐变多,

比如, 手征有效核力的不确定性、介子效应的影响、多体方法的更高阶修正、向重核发起冲锋等. 总之, 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

- Machleidt R. High-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential. *Phys Rev C*, 2001, 63: 024001
- Wiringa R B, Stoks V G J, Schiavilla R. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking. *Phys Rev C*, 1995, 51: 38–51
- Entem D R, Machleidt R. Accurate charge-dependent nucleon-nucleon potential at fourth order of chiral perturbation theory. *Phys Rev C*, 2003, 68: 041001
- Barrett B R, Navrátil P, Vary J P. *Ab initio* no core shell model. *Prog Part Nucl Phys*, 2013, 69: 131–181
- 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
- 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
- Stroberg S R, Calci A, Hergert H, et al. Nucleus-dependent valence-space approach to nuclear structure. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 032502
- 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
- Nollett K M. *Ab initio* calculations of nuclear widths via an integral relation. *Phys Rev C*, 2012, 86: 044330
- Wang X B, Hayes A C, Carlson J, et al. Comparison between variational Monte Carlo and shell model calculations of neutrinoless double beta decay matrix elements in light nuclei. *Phys Lett B*, 2019, 798: 134974
- Liu L, Otsuka T, Shimizu N, et al. No-core Monte Carlo shell-model calculation for ^{10}Be and ^{12}Be low-lying spectra. *Phys Rev C*, 2012, 86: 014302
- Abe T, Maris P, Otsuka T, et al. Monte Carlo shell model for *ab initio* nuclear structure. *EPJ Web Conf*, 2014, 66: 02001
- Ren X L, Li K W, Geng L S, et al. Leading order relativistic chiral nucleon-nucleon interaction. *Chin Phys C*, 2018, 42: 014103
- Wu S, Long B. Perturbative NN scattering in chiral effective field theory. *Phys Rev C*, 2019, 99: 024003
- Wang C, Hu J, Zhang Y, et al. The charge-dependent Bonn potentials with pseudovector pion-nucleon coupling. *Chin Phys C*, 2019, 43: 114107
- Quaglioni S, Navrátil P. *Ab initio* many-body calculations of nucleon-nucleus scattering. *Phys Rev C*, 2009, 79: 044606
- Baroni S, Navrátil P, Quaglioni S. *Ab initio* description of the exotic unbound ^7He nucleus. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 022505
- 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
- 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
- Deltuva A. Tetraneutron: Rigorous continuum calculation. *Phys Lett B*, 2018, 782: 238–241
- 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

- 22 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
- 23 Wu Q, Xu F R, Hu B S, et al. Perturbation calculations of nucleon–nucleon effective interactions in the Hartree–Fock basis. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2019, 46: 055104
- 24 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
- 25 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
- 26 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
- 27 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
- 28 Michel N, Nazarewicz W, Płoszajczak M, et al. Shell model in the complex energy plane. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2009, 36: 013101
- 29 Calvin J, Kristina L, Auerbach N, et al. White paper: From bound states to the continuum. *J Phys G: Nucl Part Phys*, 2020, 47: 123001
- 30 Berggren T. On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes. *Nucl Phys A*, 1968, 109: 265–287
- 31 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
- 32 Hagen G, Hjorth-Jensen M, Michel N. Gamow shell model and realistic nucleon-nucleon interactions. *Phys Rev C*, 2006, 73: 064307
- 33 Takayanagi K. Effective interaction in non-degenerate model space. *Nucl Phys A*, 2011, 852: 61
- 34 Tsunoda N, Takayanagi K, Hjorth-Jensen M, et al. Multi-shell effective interactions. *Phys Rev C*, 2014, 89: 024313
- 35 Tsunoda N, Otsuka T, Shimizu N, et al. Exotic neutron-rich medium-mass nuclei with realistic nuclear forces. *Phys Rev C*, 2017, 95: 021304
- 36 Betan R I, Liotta R J, Sandulescu N, et al. Two-particle resonant states in a many-body mean field. *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 042501
- 37 Michel N, Nazarewicz W, Płoszajczak M, et al. Gamow shell model description of neutron-rich nuclei. *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 042502
- 38 Hoffman C R, Baumann T, Bazin D, et al. Evidence for a doubly magic ^{24}O . *Phys Lett B*, 2009, 672: 17–21
- 39 Kanungo R, Nociforo C, Prochazka A, et al. One-neutron removal measurement reveals ^{24}O as a new doubly magic nucleus. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 152501
- 40 Sakurai H, Lukyanov S M, Notani M, et al. Evidence for particle stability of F and particle instability of N and O. *Phys Lett B*, 1999, 448: 180–184
- 41 Lukyanov S M, Penionzhkevich Y E, Astabaty R, et al. Experimental evidence for the particle stability of ^{34}Ne and ^{37}Na . *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2002, 28: L41–L45
- 42 Otsuka T, Suzuki T, Holt J D, et al. Three-body forces and the limit of oxygen isotopes. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 032501
- 43 Tarasov O, Allatt R, Angélique J C, et al. Search for ^{28}O and study of neutron-rich nuclei near the $N=20$ shell closure. *Phys Lett B*, 1997, 409: 64–70
- 44 Doornenbal P, Scheit H, Takeuchi S, et al. Low- Z shore of the “island of inversion” and the reduced neutron magicity toward ^{28}O . *Phys Rev C*, 2017, 95: 041301
- 45 Wang M, Audi G, Kondev F G, et al. The AME2016 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references. *Chin Phys C*, 2017, 41: 030003
- 46 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
- 47 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
- 48 Fossez K, Rotureau J, Michel N, et al. Continuum effects in neutron-drip-line oxygen isotopes. *Phys Rev C*, 2017, 96: 024308
- 49 Stroberg S R, Hergert H, Holt J D, et al. Ground and excited states of doubly open-shell nuclei from *ab initio* valence-space Hamiltonians. *Phys Rev C*, 2016, 93: 051301
- 50 Brown B A, Richter W A. New “USD” Hamiltonians for the sd shell. *Phys Rev C*, 2006, 74: 034315
- 51 Utsuno Y, Otsuka T, Mizusaki T, et al. Varying shell gap and deformation in $N\sim 20$ unstable nuclei studied by the Monte Carlo shell model. *Phys Rev C*, 1999, 60: 054315
- 52 Yuan C, Suzuki T, Otsuka T, et al. Shell-model study of boron, carbon, nitrogen, and oxygen isotopes with a monopole-based universal interaction. *Phys Rev C*, 2012, 85: 064324
- 53 Yuan C, Qi C, Xu F, et al. Mirror energy difference and the structure of loosely bound proton-rich nuclei around $A=20$. *Phys Rev C*, 2014, 89: 044327
- 54 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
- 55 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
- 56 Wienholtz F, Beck D, Blaum K, et al. Masses of exotic calcium isotopes pin down nuclear forces. *Nature*, 2013, 498: 346–349
- 57 Steppenbeck D, Takeuchi S, Aoi N, et al. Evidence for a new nuclear ‘magic number’ from the level structure of ^{54}Ca . *Nature*, 2013, 502: 207–210
- 58 Tarasov O B, Ahn D S, Bazin D, et al. Discovery of ^{60}Ca and implications for the stability of ^{70}Ca . *Phys Rev Lett*, 2018, 121: 022501

- 59 Sorlin O, Leenhardt S, Donzaud C, et al. $^{68}_{28}\text{Ni}_{40}$: Magicity versus superfluidity. *Phys Rev Lett*, 2002, 88: 092501
- 60 Adrich P, Amthor A M, Bazin D, et al. In-beam γ -ray spectroscopy and inclusive two-proton knockout cross section measurements at $N\approx 40$. *Phys Rev C*, 2008, 77: 054306
- 61 Ljungvall J, G3rgen A, Obertelli A, et al. Onset of collectivity in neutron-rich Fe isotopes: Toward a new island of inversion? *Phys Rev C*, 2010, 81: 061301(R)
- 62 Rother W, Dewald A, Iwasaki H, et al. Enhanced quadrupole collectivity at $N=40$: The case of neutron-rich Fe isotopes. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 022502
- 63 Baugher T, Gade A, Janssens R V F, et al. Intermediate-energy Coulomb excitation of $^{58,60,62}\text{Cr}$: The onset of collectivity toward $N=40$. *Phys Rev C*, 2012, 86: 011305
- 64 Michimasa S, Kobayashi M, Kiyokawa Y, et al. Magic nature of neutrons in ^{54}Ca : First mass measurements of $^{55-57}\text{Ca}$. *Phys Rev Lett*, 2018, 121: 022506
- 65 Kl3pfel P, Reinhard P G, B3rvenich T J, et al. Variations on a theme by Skyrme: A systematic study of adjustments of model parameters. *Phys Rev C*, 2009, 79: 034310
- 66 Neufcourt L, Cao Y, Nazarewicz W, et al. Neutron drip line in the Ca region from Bayesian model averaging. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 062502
- 67 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
- 68 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
- 69 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

Summary for “原子核的第一性原理计算”

Ab initio calculations of nuclear systems

Baishan Hu, Yuanzhuo Ma, Jianguo Li, 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

Thanks to the advanced radioactive beam facilities, weakly-bound and unbound nuclei have been explored in an unprecedented way. Most of these exotic nuclei belong to the category of open quantum systems, hence coupling to the particle continuum profoundly affects their behaviors. Many novel phenomena have been observed or predicted in the exotic nuclei, such as genuine intrinsic resonances, halos and shell evolutions. They provide ideal laboratories to test advanced many-body methods. In particular, due to the low particle-emission threshold, the continuum coupling should be properly treated in the description of weakly-bound and unbound nuclei.

In the meanwhile, with the development of chiral effective field theory and quantum many-body theory, nuclear *ab initio* calculations have made great progress in the past decade. Conventionally, *ab initio* calculations are usually performed in the harmonic-oscillator (HO) or HO-based Hartree-Fock (HF) basis. However, the HO basis is bound and localized, which is isolated from the environment of scattering states and cannot describe the exotic properties of drip-line nuclei properly. Hence, it is still a challenge to describe open quantum systems efficiently, especially for *ab initio* methods. The main difficulty focuses on how to include the coupling to the scattering continuum. Among several approaches, Berggren basis is a very elegant choice, since it generalizes the one-body Schrödinger equation to a complex-momentum plane and then treats bound, resonant and continuum states on an equal footing. Besides, a lot of theoretical work has shown the three-nucleon force could play an important role, especially in nuclei around the drip lines. Thus, this kind of *ab initio* method for weakly-bound or unbound nuclei should properly treat continuum effects, three-nucleon force and many-nucleon correlations.

The present paper reviews our recent work on the realistic Gamow shell model with a core (CGSM) to study the location of the nuclear drip lines, the role of three-nucleon force and the halo structure. Starting from the chiral two- and three-nucleon forces, the CGSM takes advantage of the *ab initio* many-body perturbation theory (called nondegenerate *Q*-box folded-diagram renormalization) within the Berggren basis to derive an effective Hamiltonian in a valence model space. Then the effective Hamiltonian is diagonalized by the complex Gamow shell model. Resonance and continuum properties of loosely-bound or unbound nuclear systems can be well studied by this kind of calculation. We have presented the results of oxygen isotopes carried out by CGSM, in which the weakly-bound and resonant properties are obtained. The calculations indicate that continuum coupling and three-nucleon force are both important for the oxygen isotopes around drip-line region. For the frontier calcium chain, CGSM gives the drip line of calcium locates at ^{70}Ca . Furthermore, the exotic properties of the shell evolutions in the long calcium chain have been investigated. Our calculations show good agreements with experimental data within $N=32$ and $N=34$ closure shells, and predict the weakness of $N=40$ shell in calcium chain. At last, the two-proton halo structure of ^{17}Ne is suggested in CGSM calculations, and both the continuum effect and the three-nucleon force are shown to be essential for the halo property of ^{17}Ne .

***ab initio*, chiral effective field theory, three-nucleon force, resonance and continuum, drip-line nuclei**doi: [10.1360/TB-2020-1619](https://doi.org/10.1360/TB-2020-1619)