



含手征三体力的第一性原理Gamow壳模型计算 ^{14}O 同中子素

张爽, 程泽华, 李健国, 许志成, 许甫荣*

北京大学物理学院, 北京 100871

* 联系人, E-mail: frxu@pku.edu.cn

2022-04-16 收稿, 2022-05-27 修回, 2022-05-30 接受, 2022-05-30 网络版发表

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

摘要 从手征有效场论 N^3LO 两体核力和 N^2LO 三体核力出发, 利用第一性原理Gamow壳模型计算研究了质子滴线附近原子核 ^{15}F ~ ^{18}Mg 的基态和低激发态性质. 通过计算 $1s_{1/2}$ 和 $0d_{5/2}$ 轨道的有效单粒子能与占据概率, 分析了 ^{18}Mg 及其镜像核 ^{18}C 基态中的连续态耦合效应. 同时考虑手征三体力、连续态耦合和多体关联, 计算了 ^{18}Mg 及其镜像核 ^{18}C 2^+ 态的能量, 其镜像能差异相比实空间计算结果得到显著改善. 计算给出 ^{18}Mg 2^+ 激发态比 ^{20}Mg 2^+ 态高这一现象, 分析了其中的机理. 基于实空间第一性原理壳模型, 预言了 ^{20}Si 和 ^{22}Si 能谱中的 2^+ 态位置, 为今后实验提供了有用信息.

关键词 第一性原理计算, Gamow壳模型, 共振和连续态, 丰质子核, 手征三体力

质子滴线附近原子核展现出很多新奇的现象, 例如质子发射^[1]、质子晕^[2,3]、Thomas-Ehrman位移^[4-6]等. 一方面, 由于库仑力的作用, 最外层质子具有较低的分层阈值, 与连续态具有强烈的耦合, 称为开放量子体系; 另一方面, 库仑位垒限制了质子波函数的空间弥散^[7], 导致质子滴线附近的非束缚核也可以具有一定的寿命^[1,8]. 连续态耦合和库仑力的混合效应在质子滴线附近原子核中产生了复杂的模式, 使之蕴含着丰富又独特的结构和动力学信息, 为理解原子核内多体关联和核力提供了理想平台.

近年来质子滴线原子核中的双质子发射陆续被发现, 如 ^{19}Mg ^[9]、 ^{45}Fe ^[10,11]、 ^{48}Ni ^[12-14]、 ^{54}Zn ^[15,16]、 ^{67}Kr ^[17]和 ^{18}Mg ^[18]. 最近的实验^[18]探索了 ^{18}Mg 中四质子发射的可能性, 观测到了经过 ^{16}Ne 基态的级联两质子衰变. 它首次测得了 ^{18}Mg 的基态和可能的第一个 2^+ 态的激发能, 其中 2^+ 态激发能相比镜像核 ^{18}C 中的 2^+ 态显著偏高, 具有明显的镜像不对称现象. 并且, 这一激发能超过 ^{20}Mg

中 2^+ 态激发能, 目前唯象Gamow壳模型不能给出合理描述^[19].

对丰质子区域原子核结构性质的第一性原理计算研究, 有助于更深入地理解丰质子原子核的核子发射特性和镜像不对称现象. 得益于手征有效场论^[20]、相似重整化群^[21,22]以及量子多体方法^[23-28]的发展, 近些年原子核的第一性原理计算已经能够达到中重质量的原子核区域^[29,30], 同时手征三体力^[31-38]的加入使得第一性原理计算在解释实验现象和理论预言方面取得很大成功, 例如重现氧同位素滴线位置^[26,34,35,39]、钙同位素链中壳演化^[40,41]、解释电弱性质^[31,42]以及镜像原子核中对称性破坏^[6]等. 文献^[36]从手征两体力和三体力出发, 计算了丰质子中质量区域原子核的基态和激发态, 较好地符合了实验结果, 包括对 ^{20}Mg ^[43]、 ^{22}Si ^[44]最新实验结果的预测. 虽然第一性原理的多体计算已经达到了相当的精度和广度, 但这些多体方法通常基于谐振子基进行展开, 没有合适地处理共振态等的单粒

引用格式: 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

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, doi: 10.1360/TB-2022-0432

子远渐近特性以及引入连续谱自由度. 尽管其在 β 稳定线附近的原子核计算中取得了很大的进展, 但是对滴线附近原子核这种开放量子系统的描述仍旧缺乏. 滴线附近原子核具有较低的分离阈值, 外层核子弱束缚在原子核周围, 相互作用相对比较弱, 因此核子在远渐近处的渐近行为、原子核中的多体关联、连续态耦合效应在这一开放量子体系中都很重要. 而且, 这些复杂的多体关联以及强的连续态耦合导致了这些核与 β 稳定线附近原子核的区别, 产生了许多新奇的现象. 为了描述这些新奇现象, 我们一般采用Berggren基矢^[45], 通过同时包含束缚态、共振态和散射连续态, 可以精确地描述弱束缚和非束缚原子核的奇异特性.

本文从手征两体核力和三体核力出发, 使用Gamow Hartree-Fock方法^[46]产生Berggren基, 利用多体微扰理论中 $\hat{S}$ -box和 $\hat{Q}$ -box折叠图^[47,48]构建模型空间内的有效哈密顿量. 通过Jacobi-Davison方法^[49,50]对角化模型空间的复对称哈密顿量, 可以获得原子核基态和低激发态的能量. 通过使用不同的核力, 评估了计算中由核力导致的结合能的不确定度. 计算了 ^{18}Mg 和 ^{18}C 基态中价核子的占据概率和有效单粒子能, 分析了连续态耦合的影响. 并且计算了 ^{18}Mg 以及 ^{18}C 和 ^{20}Mg 的 2^+ 态, 研究了镜像核间的对称性破坏以及 $Z=12$ 原子核中 2^+ 态的趋势, 预言了 ^{20}Si 和 ^{22}Si 中 2^+ 态的激发能.

1 模型

质量为 A 的原子核内禀哈密顿量 H 可写成:

$$H = \sum_{i=1}^A \left(1 - \frac{1}{A} \right) \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j}^A \left(v_{ij}^{\text{NN}} - \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{mA} \right) + \sum_{i < j < k}^A v_{ijk}^{3\text{N}}, \quad (1)$$

其中, $\mathbf{p}_i$ 是实验室系的核子动量, m 是核子质量, v^{NN} 和 $v^{3\text{N}}$ 分别表示手征有效场论两体力和三体力. 本文中, 两体相互作用 v^{NN} 使用至 N^3LO 阶的两体核力^[51], 并用自由空间的相似重整化群^[21,22]软化到相应的动量截断尺度 λ . 对于三体相互作用 $v^{3\text{N}}$, 我们采用文献^[32]中的手征截断标度 Λ 、非局域的正规化子(regulator)、低能耦合常数 c_D 与 c_E 生成了至 N^2LO 阶的三体力. 至此, 我们得到了 $\lambda/\Lambda(\text{EM})$ 系列的核力^[32], 可以很好地描述中重质量区原子核的结合能和激发谱. 通常多体计算在基矢空间执行, 两体和三体力表示在谐振子基下. 一般壳模型计算对谐振子的频率参数有较大的依赖, 本文使用了Hartree-Fock基矢进行计算, 它对频率参数的依赖较小, 并

且按照计算中能量极小选取频率参数 $\hbar\omega=16 \text{ MeV}$ ^[32]. 此外, 基矢空间截断到 $N_{\text{max}}=2n+l=12$, 同时由于三体矩阵元维度的急剧增长, 三体矩阵元额外截断到 $e_{3\text{max}} = \sum_{i=1}^3 2n_i + l_i \leq 12$. 在这些截断下, 足够保证最终的结合能收敛.

由于严格求解全空间的多体哈密顿量非常困难, 通常我们利用相似变换的方法, 实现哈密顿量从全空间到价核子模型空间的脱耦, 如开壳原子核多体微扰理论(many-body perturbation theory, MBPT)^[27]、价空间-介质相似重整化群(valence-space in-medium similarity renormalization group, VS-IMSRG)^[52]和耦合簇壳模型(shell-model coupled cluster, SMCC)^[53]等. 最终得到退耦合的模型空间哈密顿量, 从而能够实现原子核结构性质的计算. 本文采用开壳原子核多体微扰理论, 利用 $\hat{S}$ -box和 $\hat{Q}$ -box分别构建模型空间的单粒子能和两体相互作用矩阵元. 首先, 在谐振子基下选取 ^{14}O 或者 ^{14}C 作为参考态求解Hartree-Fock方程:

$$h_{pq}^{\text{HF}} = t_{pq} + \sum_i V_{piqi}^{\text{NN}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} W_{piqij}^{3\text{N}}, \quad (2)$$

其中, t_{pq} 表示包含质心运动产生的单体项后的动能部分, V^{NN} 是包含质心反冲项 $-\frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{mA}$ 的两体部分, $W^{3\text{N}}$ 是三者部分. 为了描述开放量子系统中的连续态耦合, 对部分分波使用Gamow Hartree-Fock基处理. 利用定义在复动量空间围道 L^+ 上的平面波, 得到复动量空间的Gamow Hartree-Fock方程:

$$h_{kk'}^{\text{GHF}} = \left(1 - \frac{1}{A} \right) \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \delta_{kk'} + \sum_{a\beta} U_{a\beta} C_{ka}^* C_{k'\beta}, \quad (3)$$

其中, $U_{a\beta}$ 表示单体Hartree-Fock势场, C_{ka}^* 表示复动量空间中的谐振子波函数, 具体细节可以参考文献^[6,28]. 选取对角化Gamow Hartree-Fock方程得到的基态Slater行列式为参考态, 可以得到正规乘积后两体近似^[54]的哈密顿量:

$$\begin{aligned} H^{\text{NO2B}} = & \sum_i t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ijij}^{\text{NN}} + \frac{1}{6} \sum_{ijk} W_{ijkijk}^{3\text{N}} \\ & + \sum_{pq} \left(t_{pq} + \sum_i V_{piqi}^{\text{NN}} + \frac{1}{2} \sum_{ij} W_{piqij}^{3\text{N}} \right) : a_p^+ a_q : \\ & + \frac{1}{4} \sum_{pqrs} \left(V_{piqi}^{\text{NN}} + \sum_i W_{pqirsi}^{3\text{N}} \right) : a_p^+ a_q^+ a_s a_r :, \end{aligned} \quad (4)$$

其中零体部分为常数项, 单体和两体部分作为后续多体微扰理论的起始输入量. 在实空间的 $\bar{S}$ -box和 $\bar{Q}$ -box计算中, 分别构建以 ^{14}O 为核芯的模型空间 $\{\pi 1s_{1/2}, \pi 0d_{5/2}, \pi 0d_{3/2}, \nu 0p_{1/2}, \nu 1s_{1/2}, \nu 0d_{5/2}, \nu 0d_{3/2}\}$, 以 ^{14}C 为核芯的模型空间 $\{\pi 1p_{1/2}, \pi 1s_{1/2}, \pi 0d_{5/2}, \pi 0d_{3/2}, \nu 1s_{1/2}, \nu 0d_{5/2}, \nu 0d_{3/2}\}$. 在复空间的 $\bar{S}$ -box和 $\bar{Q}$ -box计算中, 以 ^{14}O 为核芯的模型空间中 $\pi s_{1/2}$ 分波、 $\pi d_{5/2}$ 分波和以 ^{14}C 为核芯的模型空间中 $\nu s_{1/2}$ 分波、 $\nu d_{5/2}$ 分波使用Gamow Hartree-Fock基处理, 模型空间中包含这些分波的共振态和散射连续态. 由于本文研究的原子核中 $d_{3/2}$ 分波的贡献很小, 为了减少计算量, 把 $0d_{3/2}$ 当作束缚态处理, 其余分波也与实空间保持一致. 通过计算至3阶的 $\bar{S}$ -box和2阶的 $\bar{Q}$ -box折叠图, 得到模型空间的单粒子能和两体相互作用矩阵元. 由于模型空间中包含连续态导致矩阵维数急剧增加, 我们在计算中限制至多两个粒子激发到连续态上, 这在先前的计算中已被证明足够保证收敛^[27,46]. 最终, 使用Gamow壳模型程序^[50]对角化复对称的哈密顿量.

2 计算结果与讨论

图1展示了以 ^{14}C 为核芯计算的质子数 $Z=6$ 的原子核 $^{15-18}\text{C}$ 和以 ^{14}O 为核芯计算的中子数 $N=6$ 的原子核 $^{15}\text{F}\sim^{18}\text{Mg}$ 的结合能, 并与现有实验数据^[18,55]进行比较. 首先, 基于1.6/2.0(EM)和1.8/2.0(EM)核力, 分别在实空间进行了壳模型计算, 来检验结合能对手征核力重整化参数的敏感性. 可以看到, 基于1.6/2.0(EM)的计算更接近于实验值. 随着价核子的增多, 实空间壳模型计算的 $^{15}\text{F}\sim^{18}\text{Mg}$ 的基态相比于实验值变得越来越非束缚, 逐渐偏离实验结果. 这是由于实空间壳模型计算中没有考虑连续态自由度, 而随着价质子的增加, 体系变得越来越不稳定, 与连续态的耦合也愈加强烈. 我们进一步进行了包含连续态耦合的Gamow壳模型计算, 可以看到, 使用1.6/2.0(EM)的计算很好地解释了实验结果. 并且, 从图1中实空间和Gamow壳模型计算结果的差异可以看出, 随着核子数增多, 连续态耦合的贡献逐渐增强. 此外, 相比于实空间壳模型计算, 包含连续态耦合的Gamow壳模型计算结果对核力重整化参数的依赖减弱. 在 ^{18}Mg 的计算中, 实验给出的基态能量为4.87 MeV^[18], 基于1.6/2.0(EM)的Gamow壳模型计算的能量为5.73 MeV, 而不考虑连续态耦合的实空间壳模型的计算结果为7.16 MeV. 在碳的同位素链的计算中, 由于

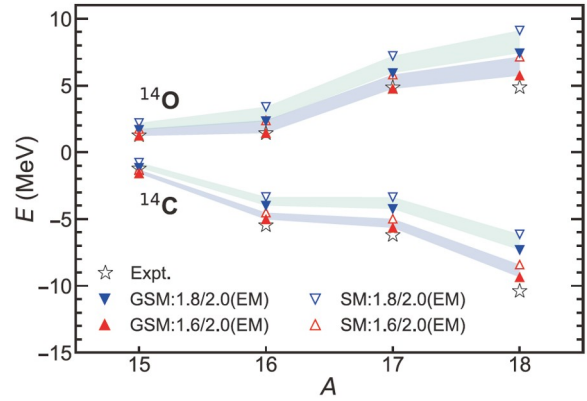


图1 (网络版彩色)基于1.6/2.0(EM)、1.8/2.0(EM)的现实核力, 分别用实空间壳模型和Gamow壳模型计算了 $^{15-18}\text{C}$ (以 ^{14}C 为核芯)和 $^{15}\text{F}\sim^{18}\text{Mg}$ (以 ^{14}O 为核芯)的结合能, 并与实验结果和AME评估值^[18,55]

进行比较. 空心三角和实心三角分别代表实空间壳模型和复空间Gamow壳模型计算结果. 阴影区域分别表示基于上述两种核力的计算中连续态耦合的影响

Figure 1 (Color online) Based on the nuclear forces of 1.6/2.0 (EM) and 1.8/2.0 (EM), the binding energies of $^{15-18}\text{C}$ with ^{14}C as the core and $^{15}\text{F}\sim^{18}\text{Mg}$ with ^{14}O as the core were calculated using the real-energy shell model and the Gamow shell model, respectively, and compared with experimental data or AME evaluations. The hollow and solid triangles in the figure represent the results of the real-energy shell model and the Gamow shell model calculations. The shaded areas represent the effects of continuum coupling in the calculations based on the 1.6/2.0 (EM) and 1.8/2.0 (EM) nuclear forces, respectively

$\nu 1s_{1/2}$ 的占据, 同样也存在较强的连续态耦合效应. 但是, 碳的同位素链中连续态耦合强度明显弱于它的丰质子镜像核, 体现了连续态耦合在镜像原子核基态中的贡献不同.

此外, 我们分析了 ^{18}C 和 ^{18}Mg 基态中连续态耦合的贡献. 图2展示了基于1.6/2.0(EM)分别使用实空间和Gamow壳模型计算的有效单粒子能和占据概率. 结果显示, 实空间壳模型计算的 ^{18}Mg 基态中 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的占据相比于 ^{18}C 基态中 $\nu 1s_{1/2}$ 轨道的占据更多, 占据概率分别为43.2%和36.5%, 且考虑连续态耦合后, Gamow壳模型计算中 ^{18}C 基态各轨道的占据概率相比于实空间几乎不变, 而 ^{18}Mg 基态中 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的占据略微增大. 并且, Gamow壳模型计算的 ^{18}C 基态中 $\nu 1s_{1/2}$ 轨道和 ^{18}Mg 基态中 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的有效单粒子能相比于实空间计算结果显著降低, 而 ^{18}C 基态中 $\nu 0d_{5/2}$ 轨道和 ^{18}Mg 基态中 $\pi 0d_{5/2}$ 轨道的有效单粒子能变化较小. 这是由于s分波无离心位垒, 导致s分波单粒子波函数相比于其他具有较高轨道角动量的单粒子波函数具有较大的空间展宽, 展现出强烈的连续态耦合现象. 而且可以注意到, 由于 ^{18}Mg 中 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道是非束缚的, 连续态耦合较为显著, 而 ^{18}C 中

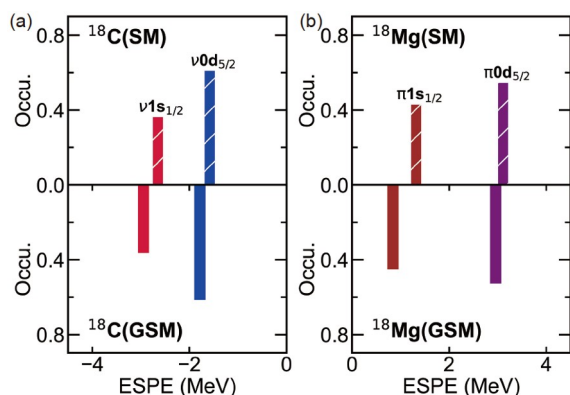


图 2 (网络版彩色)基于1.6/2.0(EM)的核力, 分别用实空间和Gamow壳模型计算了 ^{18}C (a)和 ^{18}Mg (b)基态中的有效单粒子能和占据概率。图的上半部分表示实空间壳模型计算的结果, 用SM标记, 下半部分表示Gamow壳模型计算结果, 用GSM标记。纵轴表示占据概率, 横轴表示有效单粒子能

Figure 2 (Color online) Based on the nuclear force of 1.6/2.0 (EM), the effective single-particle energies and occupation probability in the ground states of ^{18}C (a) and ^{18}Mg (b) were calculated using the real-energy shell model and the Gamow shell model, respectively. The upper part of the figure represents the results of the real-energy shell model calculation, marked with SM, and the lower part represents the results of the Gamow shell model calculation, marked with GSM. The vertical axis represents the occupation probability, and the horizontal axis represents the effective single-particle energy

$\nu 1s_{1/2}$ 轨道虽然是弱束缚的, 但是由于其缺少离心位垒和库仑位垒, 同样表现出一定程度的连续态耦合效应^[28]。

实验中还观测到了 ^{18}Mg 的第一个 2^+ 态, 对应激发能为1.84 MeV, 相比于它的镜像核 ^{18}C 中 2^+ 态高了约250 keV。同时, 新发现的这一 2^+ 态激发能超出 ^{20}Mg 中 2^+ 态的激发能, 目前的唯象Gamow壳模型计算^[19]不能够解释。基于手征两体和三体核力, 使用实空间和Gamow壳模型系统地计算了 ^{18}Mg 以及 ^{18}C 和 ^{20}Mg 中的 2^+ 态。基于1.6/2.0(EM), 实空间计算的 ^{18}Mg 、 ^{18}C 和 ^{20}Mg 的 2^+ 态的激发能分别为1.31、1.47和1.15 MeV。而基于1.8/2.0(EM), 实空间计算的 ^{18}Mg 、 ^{18}C 和 ^{20}Mg 的 2^+ 态的激发能分别为1.23、1.37和1.08 MeV。与文献^[56]中关于 ^{20}Mg 的第一性原理计算结果类似, 相比于实验值, 我们计算的 2^+ 态偏低。实空间壳模型的计算中, ^{18}Mg 的 2^+ 态激发能高于 ^{20}Mg 中的 2^+ 态, 这与实验观测到的 $Z=12$ 的同位素中 2^+ 态激发能的趋势一致。但是在镜像核 ^{18}Mg 和 ^{18}C 的 2^+ 态计算中, 计算结果显示, ^{18}C 中 2^+ 态激发能更高。为了分析连续态耦合效应, 使用相同的核力进行了Gamow壳模型计算。由于 2^+ 态中存在不同分波的连续态间的耦合, 导致Gamow壳模型的计算收敛

很慢。同时考虑到 $s_{1/2}$ 分波带来的连续态耦合比较显著, 文中进行了只把 $s_{1/2}$ 分波作为Berggren基处理的Gamow壳模型计算, 基于1.6/2.0(EM)计算得到 ^{18}Mg 、 ^{18}C 和 ^{20}Mg 的 2^+ 态的激发能分别为1.40、1.47和1.16 MeV, 而基于1.8/2.0(EM)计算得到 ^{18}Mg 、 ^{18}C 和 ^{20}Mg 的 2^+ 态的激发能分别为1.28、1.37和1.08 MeV。可以看到, 实空间和Gamow壳模型计算中, 选择不同的核力对 ^{18}Mg 、 ^{18}C 和 ^{20}Mg 的激发能谱影响较小。虽然包含连续态耦合的Gamow壳模型计算仍然没有给出正确的 ^{18}Mg 和 ^{18}C 中 2^+ 态的镜像能差异, 但是通过比较实空间和Gamow壳模型的计算结果, 可以看到连续态耦合使得 ^{18}Mg 能谱中 2^+ 态位置显著抬高, 改善了理论计算的镜像能差异与实验的符合程度。Gamow壳模型计算同样给出了 ^{18}Mg 中的 2^+ 态激发能比 ^{20}Mg 中的 2^+ 态激发能高的趋势。

目前实验上还没有测得 $Z=14$ 的原子核 ^{20}Si 和 ^{22}Si 的数据, 我们使用实空间壳模型计算了它们的基态和 2^+ 态, 以及其价质子轨道的有效单粒子能和占据概率。基于1.6/2.0(EM)计算的 ^{20}Si 和 ^{22}Si 中 2^+ 态激发能分别为1.39和1.58 MeV。增加两个质子的 $Z=14$ 同位素中 2^+ 态的趋势与 $Z=12$ 同位素趋势不一致, ^{22}Si 中 2^+ 态激发能高于 ^{20}Si 中的 2^+ 态激发能。我们进一步分析了 ^{18}Mg 、 ^{20}Mg 、 ^{20}Si 和 ^{22}Si 中基态和 2^+ 态中价质子轨道的有效单粒子能和占据概率, 如表1所示, $N=8$ 的同中子素中 $\pi 0d_{5/2}$ 和 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的有效单粒子能的顺序相比于 $N=6$ 的同中子素中发生了反转。为了提取三体力在其中的影响, 我们基于一系列SRG软化标度的手征两体核力 $N^3\text{LO}$ 进

表 1 基于1.6/2.0(EM)核力, 利用实空间壳模型计算的 ^{18}Mg 、 ^{20}Mg 、 ^{20}Si 和 ^{22}Si 中价质子轨道的有效单粒子能(MeV)和占据概率

Table 1 Based on 1.6/2.0 (EM), effective single-particle energies (MeV) and occupation probabilities of valence proton orbitals in ^{18}Mg , ^{20}Mg , ^{20}Si , and ^{22}Si are calculated using the real-energy shell model

原子核	轨道	有效单粒子能		占据概率	
		0^+	2^+	0^+	2^+
^{18}Mg	$1s_{1/2}$	1.32	1.33	0.43	0.43
	$0d_{5/2}$	3.11	3.10	0.55	0.56
^{20}Mg	$1s_{1/2}$	0.35	0.34	0.07	0.08
	$0d_{5/2}$	-1.09	-1.09	0.91	0.91
^{20}Si	$1s_{1/2}$	1.33	1.35	0.31	0.30
	$0d_{5/2}$	2.94	2.93	0.66	0.68
^{22}Si	$1s_{1/2}$	0.35	0.15	0.08	0.19
	$0d_{5/2}$	-1.27	-1.19	0.91	0.80

行了实空间壳模型计算. 计算结果同样给出了有效单粒子能顺序的反转, 表明三体力对反转没有决定性影响. 而且图2中 ^{18}Mg 的实空间和Gamow壳模型计算结果展示了连续态耦合对有效单粒子能的影响, 可以看到, 连续态耦合的贡献相比于顺序反转所需的能量差较小. 由于价空间中增加了两个中子, 价中子和质子不同轨道间的单极相互作用差异导致了有效单粒子能的顺序反转, 类似的现象可以在 ^{15}C 和 ^{17}O 中看到^[57]. 并且在 $N=6$ 的同中子素中, $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的有效单粒子能几乎保持不变, 同时 $\pi 0d_{5/2}$ 轨道的有效单粒子能降低, 使得它们的能隙减小. 同样的现象($\pi 0d_{5/2}$ 轨道的有效单粒子能降低)可以在 $N=8$ 的同中子素中看到, 但由于 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道和 $\pi 0d_{5/2}$ 轨道有效单粒子能的反转, 导致它们的能隙增加. 但在 ^{22}Si 的 2^+ 态中, 计算结果显示, $\pi 1s_{1/2}$ 轨道和 $\pi 0d_{5/2}$ 轨道间能隙减小, 并且 2^+ 态中 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的占据显著增加, 与文献[6]中关于 ^{22}Si 的计算一致. 此外, 第一性原理实空间壳模型计算给出 $N=6$ 的同中子素中基态和 2^+ 态中具有较强的组态混合, 而 $N=8$ 的同中子素主要占

据在 $\pi 0d_{5/2}$ 轨道, 且 2^+ 态中表现出较弱的 $\pi 0d_{5/2}$ 到 $\pi 1s_{1/2}$ 轨道的单粒子激发行为.

3 结论

从手征两体力和三体力出发, 使用多体微扰论中计算到3阶的 $\bar{S}$ -box和2阶的 $\bar{Q}$ -box折叠图, 构建了Gamow-Hartree-Fock基下模型空间有效单粒子能和两体相互作用矩阵元, 计算了 ^{14}O 的同中子素 ^{15}F ~ ^{18}Mg 以及它的镜像核 ^{14}C 的同位素链 $^{15-18}\text{C}$. 考虑连续态耦合和三体力, 对最近新测得的 ^{18}Mg 进行了细致的研究. 含连续态耦合的第一性原理计算很好地解释了实验结合能. 对于实验上观测到的 ^{18}Mg 能谱中 2^+ 态激发能高于 ^{20}Mg 中 2^+ 态的现象, 基于现实核力的第一性原理计算给出 2^+ 激发能的变化趋势与实验一致. 同时, 利用第一性原理实空间壳模型系统计算了 ^{18}Mg 与 ^{20}Mg 的 0^+ 态和 2^+ 态的能量、占有数和有效单粒子能, 并预测了 ^{20}Si 和 ^{22}Si 的 2^+ 态激发能, 分析了这些原子核中 0^+ 态和 2^+ 态的有效单粒子能演化趋势以及粒子数占据情况.

参考文献

- 1 Pfützner M, Karny M, Grigorenko L V, et al. Radioactive decays at limits of nuclear stability. *Rev Mod Phys*, 2012, 84: 567–619
- 2 Lehr C, Wamers F, Aksouh F, et al. Unveiling the two-proton halo character of ^{17}Ne : Exclusive measurement of quasi-free proton-knockout reactions. *Phys Lett B*, 2022, 827: 136957
- 3 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
- 4 Thomas R G. An analysis of the energy levels of the mirror nuclei, ^{13}C and ^{13}N . *Phys Rev*, 1952, 88: 1109–1125
- 5 Ehrman J B. On the displacement of corresponding energy levels of ^{13}C and ^{13}N . *Phys Rev*, 1951, 81: 412–416
- 6 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
- 7 Michel N, Li J G, Xu F R, et al. Description of proton-rich nuclei in the $A \approx 20$ region within the Gamow shell model. *Phys Rev C*, 2019, 100: 064303
- 8 Wang S M, Nazarewicz W. Puzzling two-proton decay of ^{67}Kr . *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 212502
- 9 Mukha I, Sümmerer K, Acosta L, et al. Observation of two-proton radioactivity of ^{19}Mg by tracking the decay products. *Phys Rev Lett*, 2007, 99: 182501
- 10 Pfützner M, Badura E, Bingham C, et al. First evidence for the two-proton decay of ^{45}Fe . *Eur Phys J A*, 2002, 14: 279–285
- 11 Giovinazzo J, Blank B, Chartier M, et al. Two-proton radioactivity of ^{45}Fe . *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 102501
- 12 Dossat C, Bey A, Blank B, et al. Two-proton radioactivity studies with ^{45}Fe and ^{48}Ni . *Phys Rev C*, 2005, 72: 054315
- 13 Pomorski M, Pfützner M, Dominik W, et al. First observation of two-proton radioactivity in ^{48}Ni . *Phys Rev C*, 2011, 83: 061303
- 14 Pomorski M, Pfützner M, Dominik W, et al. Proton spectroscopy of ^{48}Ni , ^{46}Fe , and ^{44}Cr . *Phys Rev C*, 2014, 90: 014311
- 15 Blank B, Bey A, Canchel G, et al. First observation of ^{54}Zn and its decay by two-proton emission. *Phys Rev Lett*, 2005, 94: 232501
- 16 Ascher P, Audirac L, Adimi N, et al. Direct observation of two protons in the decay of ^{54}Zn . *Phys Rev Lett*, 2011, 107: 102502
- 17 Goigoux T, Ascher P, Blank B, et al. Two-proton radioactivity of ^{67}Kr . *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 162501
- 18 Jin Y, Niu C Y, Brown K W, et al. First observation of the four-proton unbound nucleus ^{18}Mg . *Phys Rev Lett*, 2021, 127: 262502
- 19 Michel N, Li J G, Xu F R, et al. Proton decays in ^{16}Ne and ^{18}Mg and isospin-symmetry breaking in carbon isotopes and isotones. *Phys Rev C*, 2021, 103: 044319
- 20 Machleidt R, Entem D R. Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys Rep*, 2011, 503: 1–75
- 21 Bogner S K, Furnstahl R J, Perry R J. Similarity renormalization group for nucleon-nucleon interactions. *Phys Rev C*, 2007, 75: 061001

- 22 Bogner S K, Furnstahl R J, Schwenk A. From low-momentum interactions to nuclear structure. *Prog Part Nucl Phys*, 2010, 65: 94–147
- 23 Hagen G, Papenbrock T, Dean D J, et al. *Ab initio* coupled-cluster approach to nuclear structure with modern nucleon-nucleon interactions. *Phys Rev C*, 2010, 82: 034330
- 24 Tsukiyama K, Bogner S K, Schwenk A. In-medium similarity renormalization group for nuclei. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 222502
- 25 Hagen G, Papenbrock T, Hjorth-Jensen M, et al. Coupled-cluster computations of atomic nuclei. *Rep Prog Phys*, 2014, 77: 096302
- 26 Bogner S K, Hergert H, Holt J D, et al. Nonperturbative shell-model interactions from the in-medium similarity renormalization group. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 142501
- 27 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
- 28 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
- 29 Hagen G, Jansen G R, Papenbrock T. Structure of ^{78}Ni from first-principles computations. *Phys Rev Lett*, 2016, 117: 172501
- 30 Stroberg S R, Holt J D, Schwenk A, et al. *Ab initio* limits of atomic nuclei. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 022501
- 31 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
- 32 Simonis J, Stroberg S R, Hebeler K, et al. Saturation with chiral interactions and consequences for finite nuclei. *Phys Rev C*, 2017, 96: 014303
- 33 Jiang W G, Ekström A, Forssén C, et al. Accurate bulk properties of nuclei from $A=2$ to ∞ from potentials with Δ isobars. *Phys Rev C*, 2020, 102: 054301
- 34 Otsuka T, Suzuki T, Holt J D, et al. Three-body forces and the limit of oxygen isotopes. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 032501
- 35 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
- 36 Holt J D, Menéndez J, Schwenk A. Three-body forces and proton-rich nuclei. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 022502
- 37 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
- 38 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
- 39 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
- 40 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
- 41 Holt J D, Otsuka T, Schwenk A, et al. Three-body forces and shell structure in calcium isotopes. *J Phys G-Nucl Part Phys*, 2012, 39: 085111
- 42 Maris P, Vary J P, Navrátil P, et al. Origin of the anomalous long lifetime of ^{14}C . *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 202502
- 43 Gallant A T, Brodeur M, Andreoiu C, et al. Breakdown of the isobaric multiplet mass equation for the $A=20$ and 21 multiplets. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 082501
- 44 Xu X X, Lin C J, Sun L J, et al. Observation of β -delayed two-proton emission in the decay of ^{22}Si . *Phys Lett B*, 2017, 766: 312–316
- 45 Berggren T. On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes. *Nucl Phys A*, 1968, 109: 265–287
- 46 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
- 47 Hjorth-Jensen M, Kuo T T S, Osnes E. Realistic effective interactions for nuclear systems. *Phys Rep*, 1995, 261: 125–270
- 48 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
- 49 Michel N, Płoszajczak M. Gamow Shell Model: The Unified Theory of Nuclear Structure and Reactions. Berlin: Springer, 2021
- 50 Michel N, Aktulga H M, Jaganathan Y. Toward scalable many-body calculations for nuclear open quantum systems using the Gamow Shell Model. *Comput Phys Commun*, 2020, 247: 106978
- 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
- 52 Stroberg S R, Calci A, Hergert H, et al. Nucleus-dependent valence-space approach to nuclear structure. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 032502
- 53 Sun Z H, Morris T D, Hagen G, et al. Shell-model coupled-cluster method for open-shell nuclei. *Phys Rev C*, 2018, 98: 054320
- 54 Roth R, Binder S, Vobig K, et al. Medium-mass nuclei with normal-ordered chiral NN+3N interactions. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 052501
- 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 Randhawa J S, Kanungo R, Holl M, et al. Observation of excited states in ^{20}Mg sheds light on nuclear forces and shell evolution. *Phys Rev C*, 2019, 99: 021301
- 57 Otsuka T, Gade A, Sorlin O, et al. Evolution of shell structure in exotic nuclei. *Rev Mod Phys*, 2020, 92: 015002

Summary for “含手征三体力的第一性原理Gamow壳模型计算 ^{14}O 同中子素”

***Ab initio* Gamow shell model with chiral three-nucleon force for ^{14}O isotones**

Shuang Zhang, Zehua Cheng, Jianguo Li, Zhicheng Xu & Furong Xu*

School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China

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

Proton-rich nuclei exhibit many novel phenomena, such as proton emission, proton halo, and Thomas-Ehrman shift. On one hand, due to the Coulomb force, outer protons have a lower nuclear separation threshold and are strongly coupled to the continuum. Such weakly bound nuclei are called the open quantum system. On the other hand, the Coulomb barrier restricts the spatial spread of the weakly-bound outer protons, resulting in that unbound resonance nuclei beyond the proton drip line may have certain lifetimes, e.g., a millisecond lifetime. The interplay of the continuum coupling and Coulomb forces produces a complex pattern in nuclei near the proton-rich drip line, which contains rich and unique structures and dynamic information. These properties lead to new insights into nuclear forces, symmetry breaking between mirror nuclei and many-body correlations.

Recent experiment observed the ground state of ^{18}Mg via its decay into $4\text{p}+^{14}\text{O}$. The decay of the ground state of this nucleus is consistent with two sequential steps of 2p decay passing through the ground state of ^{16}Ne . And another excited state at 1.84 MeV was also observed, which may be the first 2^+ excited state. The excitation energy of this 2^+ state is significantly higher than that in ^{18}C , which shows a typical Thomas-Ehrman shift. In addition, this 2^+ excitation energy of ^{18}Mg exceeds that of ^{20}Mg . It is meaningful to study these novel phenomena through *ab initio* calculations. However, continuum coupling is important in these proton-rich nuclei, so the continuum degrees of freedom should be treated properly. Using the Berggren basis, the Gamow shell model provides a good description of the interplay between bound state, resonance, and continuum in a self-consistent many-body framework.

In the present paper, we employ two- and three-nucleon forces from chiral effective theory, perform the Gamow shell model calculations of $^{15-18}\text{C}$ and $^{15}\text{F}-^{18}\text{Mg}$ with continuum coupling included. The Gamow Hartree-Fock method with three-body force included was used to generate the Berggren basis, it can give a good description of the bound, resonant, and scattering states. The Hamiltonian is then normal ordered with respect to the Gamow Hartree-Fock reference state, and the normal ordered two-body approximation is adopted. We use the many-body perturbation theory to construct the effective Hamiltonian for the psd model space with $s_{1/2}$ and $d_{5/2}$ partial waves treated in Berggren basis. We calculate the $\hat{S}$ -box up to the third order and $\hat{Q}$ -box up to the second order. We use the Jacobi-Davidson method to diagonalize the complex-symmetric model-space Hamiltonian, and allow at most two valence particles in the continuum.

The energies of the ground and first 2^+ excited states are calculated for $^{15-18}\text{C}$ and $^{15}\text{F}-^{18}\text{Mg}$. The calculated energies agree well with experimental data or evaluations. By calculating occupation probabilities and effective single-particle energies of the $\pi 1s_{1/2}$ and $\pi 0d_{5/2}$ orbitals, we analyze the continuum-coupling effect in the ground state of ^{18}Mg . The calculation of the mirror energy difference between the 2^+ states of ^{18}C and ^{18}Mg is improved with continuum coupling included. We have systematically calculated the first 2^+ states in $Z=12$ isotopes, supporting the experimental observation that the 2^+ excitation energy in ^{18}Mg is slightly higher than that in ^{20}Mg . There have been no experimental data for ^{20}Si and ^{22}Si . We predict that the 2^+ excitation energy in ^{20}Si is lower than that in ^{22}Si with the real-energy shell-model calculation.

***ab initio* calculations, Gamow shell model, resonance and continuum, proton-rich nuclei, chiral three-nucleon force**

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