



第一性原理多体微扰理论

孟子颜¹, 许甫荣^{1,2*}

1. 北京大学物理学院, 核物理与核技术全国重点实验室, 北京 100871

2. 中国科学院近代物理研究所, 南方核科学中心, 惠州 516000

* 联系人, E-mail: frxu@pku.edu.cn

2025-09-25收稿, 2025-11-03修回, 2025-11-05接受, 2025-11-06网络版发表

国家重点研发计划(2023YFA1606401, 2024YFA1610900)和国家自然科学基金(12335007, 12035001, 12535008)资助

摘要 原子核的第一性原理(*ab initio*)计算已成为核理论研究的前沿. 第一性原理计算从重现核子-核子散射相移的现实核力出发, 使用严格的量子多体方法实现了核结构的精确描述. 相比唯象核模型, 第一性原理计算不依赖于额外参数, 能提供更基础、更可靠的理论分析与预言. 本文回顾了我国课题组在第一性原理多体微扰理论方面的进展, 计算了 $N = 20$ 反转岛原子核 ^{28}F 与 ^{29}Ne 的低激发谱, 研究了手征三体力对反转岛原子核奇特结构的影响, 以及通过第一性原理多体微扰理论构建有效算符, 研究了中子幻数 $N = 50$ 附近同核异能素的电磁跃迁与 β 衰变.

关键词 第一性原理, 多体微扰理论, 反转岛, 同核异能素

原子核是物质结构的重要层次, 自1896年贝克勒尔发现天然放射性现象以来, 核物理始终处于物质科学的前沿. 当今核物理发展依然充满活力, 既对认知物质世界的基本组成与规律发挥重要作用, 也对人类生存发展产生重大影响.

作为由质子与中子构成的复杂量子多体系统, 原子核的理论研究面临两方面的艰巨挑战. 其一是核力的形式尚不明确, 核力是夸克、胶子之间强相互作用的剩余相互作用, 但强相互作用的底层理论量子色动力学(quantum chromodynamics, QCD)在低能标下是非微扰的, 从QCD出发描述核力非常困难. 其二是核多体问题的复杂性, 由于原子核中核子数目有限, 统计方法的适用性受限, 而严格求解核多体薛定谔方程仍极具挑战, 计算量也极其庞大. 在核物理120余年的发展, 理论研究虽然大多建立在现象学的基础上, 但唯象模型仍需要通过核结构或核反应数据拟合模型参数, 外推至缺少实验数据的核区时, 理论预言有很大的不确定性, 且难以给出微观解释. 因此, 不依赖于额外参数

的第一性原理(*ab initio*)计算越来越受重视, 已成为核理论的前沿方向.

第一性原理计算以手征有效场论核力^[1]等现实核力为出发点, 通过可系统改进的量子多体方法求解核多体问题, 从而更好地揭示核结构与底层强相互作用理论的联系. 相比唯象核模型, 第一性原理计算不引入额外参数, 能够对核素图给出统一的描述. 第一性原理计算的两个关键问题是现实核力与严格的量子多体方法, 这也正是核理论研究的两个主要课题.

现实核力能够重现核子-核子散射相移及少体原子核的性质, 且不引入多体核结构的参数. 目前第一性原理计算应用最广泛的现实核力是手征有效场论(chiral effective field theory, χ EFT)核力^[1], 简称为手征核力. 手征核力从低能QCD的基本对称性(尤其是手征对称性及其破缺)出发, 构建低能QCD的有效理论, 能够逐阶考虑高阶贡献并系统分析不确定度, 且多体力随着微扰展开自然出现. 相比唯象现实核力AV18势^[2]、CD-Bonn势^[3]等, 扎根于QCD的手征核力是目前核力的主

引用格式: 孟子颜, 许甫荣. 第一性原理多体微扰理论. 科学通报, 2026, 71: 942–952
Meng Z, Xu F. *Ab initio* many-body perturbation theory (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 942–952, doi: 10.1360/CSB-2025-5588

要发展方向.

由于现实核力具有强的排斥芯与张量力成分, 会产生很强的短程关联, 在动量空间中表现为高低动量的耦合. 这导致核结构多体计算的收敛非常慢. 因此, 核物理领域发展了一系列核力重整化方法, 包括 Okubo-Lee-Suzuki (OLS)^[4]、 $V_{\text{low-}k}$ ^[5]、相似重整化群(similarity renormalization group, SRG)^[6]等, 在保持低能可观测量不变的前提下, 将高低动量退耦合, 实现了核力的“软化”, 加速了计算收敛, 使中重核的第一性原理计算成为可能.

第一性原理计算向更重核区推进, 既得益于手征核力与重整化方法的发展, 也离不开量子多体理论的进步与高性能计算能力的提升. 求解核多体问题的多体方法可以分为两类, 一类不对多体薛定谔方程的解施加任何近似, 比如无核芯壳模型(no-core shell model, NCSM)^[7]、量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo, QMC)^[8]、格点有效场论(lattice effective field theory, LEFT)^[9]等. 这类方法的计算量随核子数呈指数增加, 在现有计算能力的限制下只能计算较轻的原子核($A \leq 16$). 另一类方法系统地近似求解多体薛定谔方程, 且这种近似可以逐级改进, 最终恢复到精确解. 这类多体方法包括多体微扰理论(many-body perturbation theory, MBPT)^[10]、耦合簇方法(coupled cluster, CC)^[11]、介质相似重整化群(in-medium similarity renormalization group, IMSRG)^[12]、自洽格林函数(self-consistent Green's function, SCGF)^[13]等. 通过近似使计算量降到模型空间大小的多项式量级, 可计算中重质量闭壳核基态, 于2022年实现了重双幻核 ^{208}Pb 的第一性原理计算^[14].

组态相互作用壳模型(configuration interaction shell model, CISM)^[15]是第一性原理计算中重质量开壳核的主流途径之一. 作为理解核结构的重要理论图像, CISM将核子分为冻结的核芯与少量价核子, 并在核芯上选取价空间, 限制价核子只能填充在价空间轨道, 随后在组态空间对角化维数小很多的价空间哈密顿量. CISM的优点包括能够同等地处理偶数与奇数核子系统, 容易计算激发态与开壳核等. 但唯象的CISM使用拟合实验数据的壳模型哈密顿量, 比如适用于 sd 壳的USD哈密顿量^[16], 对不同模型空间需要分别拟合, 无法统一计算整个核素图. 而第一性原理

壳模型通过相似变换将全空间的哈密顿量重整化为价空间有效哈密顿量, 并保证其本征值与全空间哈密顿量相同, 在尽可能多地包含多体关联的同时降低了多体薛定谔方程的维数. 目前导出壳模型有效哈密顿量的方法有MBPT^[17,18], 以及非微扰的价空间介质相似重整化群(valence-space in-medium similarity renormalization group, VS-IMSRG)^[19]、耦合簇有效相互作用(coupled cluster effective interaction, CCEI)^[20]、壳模型耦合簇(shell model coupled cluster, SMCC)^[21]等.

过去二十余年, 手征核力、核力重整化、量子多体方法迅速发展, 高性能计算资源不断升级, 推动了第一性原理计算取得重大突破, 走上了核物理舞台的中央. 国内学者在第一性原理计算领域也获得了丰硕成果. 本文将综述我们课题组在第一性原理多体微扰理论中的进展, 首先介绍多体微扰理论有效哈密顿量与有效算符的理论框架, 随后介绍三体力对 $N = 20$ 反转岛区域原子核性质的影响以及幻数 $N = 50$ 附近同核异能素的结构与衰变性质, 最后是总结与展望.

1 理论方法

质量数为 A 的原子核内禀哈密顿量为

$$H = \sum_{i < j}^A \frac{(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2}{2mA} + \sum_{i < j}^A V_{ij}^{2N} + \sum_{i < j < k}^A V_{ijk}^{3N}, \quad (1)$$

其中 $\mathbf{p}_i$ 为实验室系中的核子动量, m 为核子质量, V^{2N} 与 V^{3N} 分别为两体力与三体力. 由于直接处理三体力过于复杂, 通常将 H 对某个参考态进行正规排序(normal order). 在零体、一体与两体中包含三体核力的主要贡献, 忽略正规排序后的剩余三体核力, 这被称为正规排序两体近似(normal-ordered two-body, NO2B)^[22], 在第一性原理计算中广泛使用.

核多体问题的本质是求解多体薛定谔方程:

$$H|\Psi_v\rangle = E_v|\Psi_v\rangle, \quad (2)$$

MBPT将难以直接对角化的哈密顿量 H 分为本征态已知的零阶部分 H_0 与微扰部分 H_1 :

$$H = H_0 + (H - H_0) = H_0 + H_1, \quad (3)$$

H_0 的本征方程为

$$H_0|\Phi_v\rangle = E_v^{(0)}|\Phi_v\rangle, \quad (4)$$

$|\Phi_\nu\rangle$ 是一组正交归一的基矢,在这组基矢下用 H_1 逐阶计算能量与波函数的修正,以避免对角化的巨大计算量. MBPT的收敛性必须进行仔细研究,近年来使用SRG软化后的核力,于Hartree-Fock(HF)基下进行MBPT(HF-MBPT)的收敛性已得到证明^[23]. HF-MBPT收敛比谐振子基下的MBPT(HO-MBPT)更快,是因为HF解是体系精确波函数的良好近似. 在二次量子化形式下, HF-MBPT将零阶哈密顿量取为

$$H_0 = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i, \quad (5)$$

其中 ϵ_i 为HF单粒子能, $c_i^\dagger$ 与 c_i 为单粒子产生与湮灭算符.

定义投影算符 P ,从完整的希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中投影出低维度的模型空间 $\mathcal{H}_{\text{model}}$:

$$P = \sum_{\nu \in \mathcal{H}_{\text{model}}} |\Phi_\nu\rangle\langle\Phi_\nu|, \quad (6)$$

其补算符为 $Q = 1 - P$. 模型空间也可称为 P 空间,补空间称为 Q 空间. 对于闭壳MBPT, P 空间只有一维,就是填满的闭壳Slater行列式;对于开壳核, P 空间即为CISM选取的价空间.

以 ^{18}O 的计算为例,选取 ^{16}O 为核芯,所有可能的组态包含 $|2p\rangle, |3p1h\rangle, |4p2h\rangle$ 等, p 与 h 代表相对 ^{16}O 的粒子空穴激发. 对于包含13个主壳的核力,单粒子轨道有1820条,式(2)的维数达到 10^{42} 以上,严格对角化是不可能的. 在CISM框架内, ^{16}O 是惰性的,不会激发,并限制两个价核子填充在 sd 壳内,这样的组态记为 $|2\nu\rangle$,由 $|2\nu\rangle$ 张成的 P 空间维数就只有66了. 因此,第一性原理多体微扰理论的主要任务就是不依赖实验数据地从输入的手征核力式(1)自洽地推导出作用于壳模型价空间的哈密顿量.

1.1 有效哈密顿量

记完整的希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 维数为 D ,模型空间 $\mathcal{H}_{\text{model}}$ 维数为 d ,且 $d \ll D$,有效哈密顿量理论目标是找到一个作用在 $\mathcal{H}_{\text{model}}$ 的哈密顿量 H_{eff} ,满足

$$H_{\text{eff}}P|\Psi_\nu\rangle = E_\nu P|\Psi_\nu\rangle, \quad \nu = 1, \dots, d, \quad (7)$$

由于相似变换能保矩阵的本征值不变,对 H 进行相似变换:

$$\mathcal{H} = X^{-1}HX, \quad (8)$$

再投影到 P 空间,获得有效哈密顿量:

$$H_{\text{eff}} = P\mathcal{H}P. \quad (9)$$

需要具体确定 X 以满足式(7). 为此,可限定 $X = e^\omega$ 为Lee-Suzuki变换^[24],即 ω 满足

$$P\omega P = P\omega Q = Q\omega Q = 0, \quad Q\omega P = \omega, \quad (10)$$

由此, $X = e^\omega = 1 + \omega$. 考虑 $\mathcal{H}$ 的本征方程:

$$\mathcal{H}X^{-1}|\Psi_\nu\rangle = E_\nu X^{-1}|\Psi_\nu\rangle, \quad (11)$$

并注意到相似变换后的本征态 $X^{-1}|\Psi_\nu\rangle$ 的 P 空间分量为

$$PX^{-1}|\Psi_\nu\rangle = P(1 - \omega)|\Psi_\nu\rangle = P|\Psi_\nu\rangle, \quad (12)$$

因此,如果

$$QH P = 0 \quad (13)$$

就能保证式(7)成立. 这称为退耦条件. 值得注意的是,VS-IMSRG, SMCC这两个有效哈密顿量方法同样要求退耦条件成立^[21,25],不过VS-IMSRG是么正变换而Lee-Suzuki变换不是. 非么正变换需要对 H_{eff} 进行保持本征值不变的厄米化,优势是公式形式更简单.

用式(10)化简式(13),可得到

$$QH_1 P + QH Q\omega - \omega PHP - \omega PH_1 Q\omega = 0, \quad (14)$$

其中用到了 H_0 对角, $PH_0 Q = QH_0 P = 0$ 的条件. 有效哈密顿量也可写为

$$H_{\text{eff}} = PHP + PH_1 Q\omega. \quad (15)$$

以 ^{18}O 为例,有效哈密顿量相似变换的过程如图1所示. 表示在完整组态空间中的哈密顿量 H 经过相似变换 X 的作用,得到只作用在价空间 sd 壳的有效哈密顿量 H_{eff} . 使用大型壳模型程序将其对角化,即可得到能谱与价空间内的波函数.

有效哈密顿量理论发展初期是在简并模型空间构建的,也就是 $PH_0 P = \epsilon_0 P$,这限制了该理论的应用. 为此,发展了适用于非简并模型空间的extended Kreniglowa - Kuo(EKK)方法^[26]. 将式(15)代入式(14),并引入参数 E ,称为能量起点,解出

$$\omega = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{(E - QH Q)^{k+1}} QH_1 P (H_{\text{eff}} - E)^k, \quad (16)$$

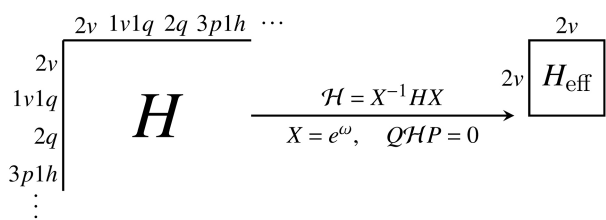


图1 ^{18}O 有效哈密顿量相似变换的示意图. p, h 分别为相对 ^{16}O 核芯的粒子与空穴激发, v 为填充在 sd 壳的粒子, q 为填充在 sd 壳以上的粒子

Figure 1 Schematic view of similarity transformation into effective Hamiltonian for ^{18}O . The labels p and h denote the particle and hole excitations of the core ^{16}O , v is a particle in the sd -shell and q is a non-valence particle above the sd -shell

代入式(15), 得到

$$H_{\text{eff}} = PH_0P + \sum_{k=0}^{\infty} \hat{Q}_k(E)(H_{\text{eff}} - E)^k. \quad (17)$$

这里定义了一个顶点函数 $\hat{Q}$ -box及其导数:

$$\hat{Q}(\epsilon) = \hat{Q}_0(\epsilon) = PH_1P + PH_1Q \frac{1}{\epsilon - QH_0Q} QH_1P, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \hat{Q}_k(\epsilon) &= \frac{1}{k!} \frac{d^k \hat{Q}(\epsilon)}{d\epsilon^k} \\ &= (-1)^k PH_1Q \frac{1}{(\epsilon - QH_0Q)^{k+1}} QH_1P. \end{aligned} \quad (19)$$

迭代地求解式(17):

$$H_{\text{eff}}^{(n)} = PH_0P + \sum_{k=0}^{\infty} \hat{Q}_k(E)(H_{\text{eff}}^{(n-1)} - E)^k, \quad (20)$$

迭代收敛时即可得到 $\lim_{n \rightarrow \infty} H_{\text{eff}}^{(n)} = H_{\text{eff}}$ 满足式(7). EKK方法得到的有效哈密顿量应该与引入的参数 E 无关, 这已经得到了验证^[27]. 为了加速迭代的收敛, 通常将 E 取在模型空间能谱的中间^[26]. 另外, 选取 E 等于模型空间的简并能量 ϵ_0 , 就退化为简并模型空间的Krenciglowa - Kuo(KK)方法.

EKK方法的一个典型应用就是构建跨壳的有效哈密顿量, 比如 $sdpf$ 壳. 另外, HF基的单粒子轨道是非简并的, 我们课题组使用EKK方法在HF基下构建有效哈密顿量, 其优势之一是能自洽获得单粒子能^[28].

1.2 $\hat{Q}$ -box的计算

计算 $\hat{Q}$ -box是获得有效哈密顿量的核心步骤. 式(18)涉及求矩阵 $(\epsilon - QH_0Q)$ 的逆, 其维数为 $D - d \approx D$,

计算代价与直接进行全空间的对角化类似, 因此通常以微扰的方式将 $(\epsilon - QH_0Q)^{-1}$ 展开, 得到

$$\begin{aligned} \hat{Q}(\epsilon) &= PH_1P + PH_1Q \frac{1}{\epsilon - QH_0Q} QH_1P \\ &\quad + PH_1Q \frac{1}{\epsilon - QH_0Q} QH_1Q \frac{1}{\epsilon - QH_0Q} QH_1P + \dots, \end{aligned} \quad (21)$$

这就只要求对角矩阵的逆. 式(21)中插入的投影算符 Q 说明MBPT的计算实际是对 Q 空间的组态进行循环, 进而将 Q 空间的多体关联“拉入” P 空间内. 但多体基的维数巨大, 对组态循环的计算量是指数量级. 在二次量子化形式下, 可以将所有组态用相对于核芯的粒子-空穴激发表示, 通过Wick定理对产生湮灭算符进行收缩, 把对组态的求和转化为对单粒子轨道的求和, 计算量就降低到了多项式量级.

对于更多粒子-空穴激发的组态, 收缩非常繁琐, 而图解法可以系统地实现这个过程, 简化公式推导, 只需预先确定计算图的规则, 并生成所有可能的图即可. 通常将Goldstone图计算到三阶就足以收敛, 这些图由文献^[29]给出, 计算规则可参考文献^[17]. 使用HF基计算还可以消去大量包含单体插入项的Goldstone图^[30], 进一步简化计算.

由于原子核的角动量守恒, 计算Goldstone图时对 m 量子数的求和是不必要的. 在角动量耦合表象下用 m 量子数无关的矩阵元计算Goldstone图可极大节省计算时间与内存. Kuo等人发展了计算角动量耦合矩阵元的简洁方法^[31], 我们课题组在此基础上重新定义文献^[31]中的交叉耦合矩阵元, 更有效地利用了图的对称性, 简化了公式推导^[32]. 良好的对称性还有助于矩阵元的存储与访问, 通过缓存交叉耦合矩阵元能显著提高计算效率.

1.3 有效算符

除能量之外的其他可观测量也携带了核结构的重要信息. 有效哈密顿量对角化只能得到相似变换后的模型空间波函数 $|\psi_v\rangle = P|\Psi_v\rangle$, 而可观测量算符 Θ 作用于全空间 $\mathcal{H}$, 不能直接用于计算可观测量的期望值与跃迁矩阵元. 以 ^{18}O 的电四极跃迁 $E2$ 为例, 壳模型计算得到的是两个价中子填充在 sd 壳的波函数, 由于中子不带电, 原则上 ^{18}O 的 $E2$ 跃迁应为零. 然而, 实验中发现了

非零的 $E2$ 跃迁. 这说明需要同时将 Θ 重整化到价空间, 才能用 H_{eff} 的本征波函数 $|\psi_v\rangle$ 计算可观测量的期望值与矩阵元. 重整化后的有效算符 Θ_{eff} 需满足^[33]

$$\langle \tilde{\Psi}_\mu | \Theta | \Psi_v \rangle = \langle \tilde{\Psi}_\mu | \Theta_{\text{eff}} | \psi_v \rangle, \quad (22)$$

这里 $\langle \tilde{\Psi}_\mu | \Psi_v \rangle = \langle \tilde{\Psi}_\mu | \psi_v \rangle = \delta_{\mu\nu}$. 有效算符 Θ_{eff} 作用于 P 空间, 因此 $\Theta_{\text{eff}} = P\Theta_{\text{eff}}P$, 将式(6)代入, 得到

$$\Theta_{\text{eff}} = \sum_{\mu\nu} |\psi_\mu\rangle \langle \tilde{\Psi}_\mu | \Theta | \Psi_v \rangle \langle \tilde{\Psi}_\nu|. \quad (23)$$

在 Lee-Suzuki 变换下,

$$|\Psi_v\rangle = (1 + \omega)|\psi_\alpha\rangle = (P + \omega)|\psi_v\rangle, \quad (24)$$

与之正交的 $\langle \tilde{\Psi}_v |$ 为

$$\langle \tilde{\Psi}_v | = \langle \tilde{\Psi}_v | (P + \omega^\dagger \omega)^{-1} (P + \omega^\dagger), \quad (25)$$

因此

$$\Theta_{\text{eff}} = (P + \omega^\dagger \omega)^{-1} (P + \omega^\dagger) \Theta (P + \omega), \quad (26)$$

定义 $\hat{\Theta} = (P + \omega^\dagger) \Theta (P + \omega)$, 接下来的任务就是计算 $(P + \omega^\dagger \omega)^{-1}$ 与 $\hat{\Theta}$. 计算 H_{eff} 时已经由式(16)确定了 ω , 因此

$$\omega^\dagger \omega = - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} ((\tilde{H}_{\text{eff}})^\dagger)^n \hat{Q}_{n+m+1}(E) (\tilde{H}_{\text{eff}})^m, \quad (27)$$

其中 $\tilde{H}_{\text{eff}} = H_{\text{eff}} - E$. 而 $\hat{\Theta}$ 可表示为

$$\hat{\Theta} = \hat{\Theta}_{PP} + (\hat{\Theta}_{PQ} + \text{h.c.}) + \hat{\Theta}_{QQ}, \quad (28)$$

其中

$$\hat{\Theta}_{PP} = P\Theta P, \quad (29)$$

$$\hat{\Theta}_{PQ} = P\Theta Q\omega = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\Theta}_n (\tilde{H}_{\text{eff}})^n, \quad (30)$$

$$\hat{\Theta}_{QQ} = \omega^\dagger Q\Theta Q\omega = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} ((\tilde{H}_{\text{eff}})^\dagger)^n \hat{\Theta}_{nm} (\tilde{H}_{\text{eff}})^m, \quad (31)$$

$\hat{\Theta}_m$ 与 $\hat{\Theta}_{nm}$ 由

$$\hat{\Theta}_m = \frac{1}{m!} \frac{d^m \hat{\Theta}(\epsilon)}{d\epsilon^m} \Big|_{\epsilon=E}, \quad (32)$$

$$\hat{\Theta}_{mn} = \frac{1}{m!n!} \frac{d^m}{d\epsilon_1^m} \frac{d^n}{d\epsilon_2^n} \hat{\Theta}(\epsilon_1; \epsilon_2) \Big|_{\epsilon_1=\epsilon_2=E}, \quad (33)$$

给出, 是 $\hat{\Theta}$ -box 的导数. $\hat{\Theta}$ -box 类似 $\hat{Q}$ -box, 定义为

$$\hat{\Theta}(\epsilon) = P\Theta Q \frac{1}{\epsilon - QHQ} QH_1 P, \quad (34)$$

$$\hat{\Theta}(\epsilon_1; \epsilon_2) = PH_1 Q \frac{1}{\epsilon_1 - QHQ} Q\Theta Q \frac{1}{\epsilon_2 - QHQ} QH_1 P. \quad (35)$$

Θ -box 同样可通过计算 Goldstone 图得到, 图的拓扑结构与文献[29]给出的只包含相互作用顶点的图是一致的, 将单体插入项换为单体算符, 相互作用线换为两体算符即可获得计算 Θ -box 的图. 张量算符的角动量耦合规则与标量算符(如哈密顿量)不同, 我们课题组发展的计算方法能够统一、高效地计算包含相互作用、单体算符与两体算符的 Goldstone 图^[32].

注意到从式(17)出发, $\tilde{H}_{\text{eff}}$ 可展开为 $\hat{Q}$ -box 及其导数的幂次, 因此有效算符可用 $\hat{Q}$ -box 与 $\hat{\Theta}$ -box 表示为^[33]

$$\begin{aligned} \Theta_{\text{eff}} &= (P + \hat{Q}_1 + \hat{Q}_1 \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2 \hat{Q}' + \hat{Q}' \hat{Q}_2 + \dots) \\ &\quad \times (\chi_0 + \chi_1 + \chi_2 + \dots), \end{aligned} \quad (36)$$

其中

$$\chi_0 = P\Theta P + (\hat{\Theta}_0 + \text{h.c.}) + \hat{\Theta}_{00}, \quad (37)$$

$$\chi_1 = (\hat{\Theta}_1 \hat{Q}' + \text{h.c.}) + (\hat{\Theta}_{01} \hat{Q}' + \text{h.c.}), \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \chi_2 &= (\hat{\Theta}_1 \hat{Q}_1 \hat{Q}' + \text{h.c.}) + (\hat{\Theta}_2 \hat{Q}' \hat{Q}' + \text{h.c.}) \\ &\quad + (\hat{\Theta}_{02} \hat{Q}' \hat{Q}' + \text{h.c.}) + \hat{Q}' \hat{\Theta}_{11} \hat{Q}'. \end{aligned} \quad (39)$$

为方便起见, $\hat{Q}$ -box 与 $\hat{\Theta}$ -box 省略自变量 E . 另外, 文献[33]在简并模型空间导出有效算符, 而在 EKK 方法框架内需用 $\hat{Q}' = PH_0 P - E + \hat{Q}$ 代替 $\hat{Q}$ 以得到非简并模型空间的有效算符. 已经证明, 将 χ_n 展开截断到 $n = 2$ 即可获得收敛的结果^[34].

2 $N = 20$ 反转岛原子核

原子核的质子数或中子数等于幻数(2、8、20、28、50等)时原子核特别稳定, 这是原子核中存在壳层结构的重要证据, 壳模型很好地解释了幻数. 然而随着实验技术的进步, 发现在远离 β 稳定线区域, 壳演化可能导致闭合壳层效应减弱甚至消失, 导致单粒子能级或组态的排序不符合常规, 这些区域称为反转岛(island of inversion, IOI)^[35,36]. 第一个反转岛于传统幻数 $N = 20$ 附近的丰中子核区被发现, 实验证据为 Ne、

Mg等原子核的分离能、激发谱、电磁跃迁等不再呈现幻数特征。

对反转岛区域原子核奇特性质的解释,一直是核理论研究的热点与难点。 $N = 20$ 反转岛的形成通常被解释为中子数的增加导致 sd 壳与 pf 壳的壳能隙减小, sd 轨道到 pf 轨道的粒子-空穴激发增强. 闯入 sd 壳的 pf 轨道会对原子核结构产生重要影响,甚至是主导贡献,比如实验发现 ^{29}Ne [37]与 ^{28}F [38]这两个 $N = 19$ 的原子核基态宇称为负,表明基态由负宇称的 pf 轨道主导, ^{29}Ne 与 ^{28}F 也在 $N = 20$ 反转岛内. 该发现拓展了反转岛的“南岸”,为理论描述提供了更大的挑战。

在壳模型框架内,对 $N = 20$ 反转岛的描述需要以 ^{16}O 为核芯,构建跨越 sd 壳与 pf 壳的有效哈密顿量. 由于闯入态问题会破坏相似变换构建跨壳有效哈密顿量的收敛性,给反转岛的第一性原理计算带来很大的困难,因此该区域理论研究通常基于唯象或半微观模型. 近年来, Miyagi等人将VS-IMSRG推广至跨壳的价空间并实现了反转岛的第一性原理计算[39],而我们课题组则通过第一性原理多体微扰理论计算接近滴线区的 ^{28}F 与 ^{29}Ne 的能谱,并研究三体力对 $N = 20$ 反转岛中原子核性质的影响[40]. 计算使用的手征核力为 N^3LO 的两体力[41](记为NN)与 N^2LO 的三体力[42](记为3N),通过EKK方法可以获得收敛的 $sdpf$ 壳有效哈密顿量. 手征核力的参数取为谐振子基频率 $\hbar\omega = 14$ MeV, 包含13个主壳($e = 2n + l \leq e_{\max} = 12$), 三体力截断 $e_1 + e_2 + e_3 \leq E_{3\max} = 6$. 值得注意的是,文献[43]使用拟合实验的单粒子能,而我们的计算在HF基下进行,能够自洽给出单粒子能[28]. 随后,使用大型壳模型程序KSHELL[44]将有效哈密顿量对角化,以获得 ^{28}F 与 ^{29}Ne 的低激发谱。

只使用NN与使用NN+3N手征核力计算的 ^{28}F 低激发谱如图2所示. 仅使用两体力NN时,实验的负宇称基态 4^- 态比计算给出的正宇称基态 2^+ 态高很多,表明 sd 壳与 pf 壳有较大的能隙. 包含三体力3N后,计算结果得到了改善, 4^- 态降低到了只比 2^+ 态高约130 keV. 从有效哈密顿量的单粒子能来看,仅使用NN得到的 $0d_{3/2}$ 轨道比 $1p_{3/2}$ 轨道低,而加入3N后 $0d_{3/2}$ 与 $1p_{3/2}$ 发生反转, $1p_{3/2}$ 轨道闯入 sd 壳. 这说明三体力对滴线区原子核的壳结构有显著影响. 另外,实验上 ^{28}F 的单中子分离能为-198 keV,是非束缚核,但不包含3N的计算却得

到 ^{28}F 是束缚核,单中子分离能为2.925 MeV. 加入3N后单中子分离能变为-1.301 MeV,正确描述了 ^{28}F 的非束缚特征。

^{29}Ne 的低激发谱如图3所示. 只包含2N的计算也只能给出正宇称的基态 $3/2^+$,且与实验给出的负宇称基态 $3/2^-$ 有很大的间距. 引入3N后,给出了与实验一致的基态 $3/2^-$. 同时,第一性原理多体微扰理论给出的能谱与SDPF-U-MIX的结果也比较接近。

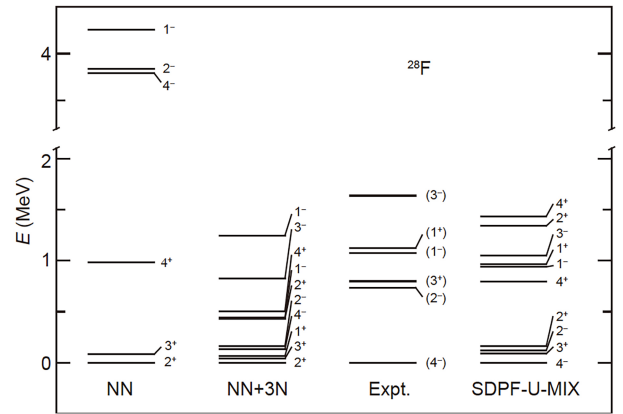


图2 使用NN与NN+3N手征核力计算的 ^{28}F 低激发谱,与实验数据[38]以及唯象相互作用SDPF-U-MIX[36]的计算结果进行比较. 图取自文献[40]

Figure 2 Calculated low-excitation spectrum for ^{28}F with the chiral interactions NN and NN+3N, compared with experimental data[38] and the calculation results with phenomenological interaction SDPF-U-MIX[36]. Figure taken from Ref. [40]

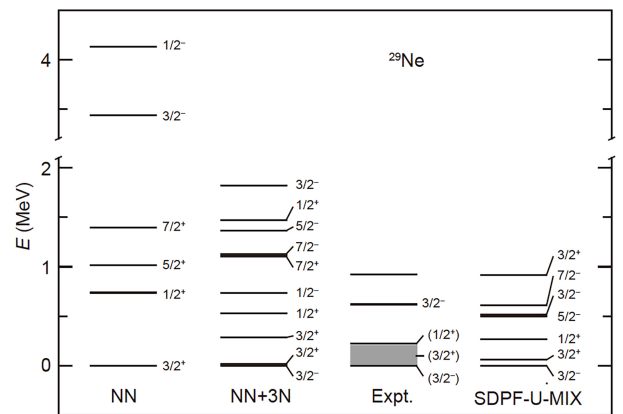


图3 使用NN与NN+3N手征核力计算的 ^{29}Ne 低激发谱,与实验数据[37]以及SDPF-U-MIX[36]的计算结果进行比较. 图取自文献[40]

Figure 3 Calculated low-excitation spectrum for ^{29}Ne with the chiral interactions NN and NN+3N, compared with experimental data[37] and the calculation results with interaction SDPF-U-MIX[36]. Figure taken from Ref. [40]

另外, 为了进一步说明跨壳激发对 $N = 20$ 反转岛核结构的影响, 计算了 ^{28}F 与 ^{29}Ne 的组态成分. 用 $n\hbar\omega$ 表示组态有 n 个价核子激发到 pf 轨道. 计算中加入 $3N$ 后, ^{28}F 第一个 2^+ 态 $0\hbar\omega$ 组态占比由92%降低到68%, $2\hbar\omega$ 组态占比为32%, ^{29}Ne 第一个 $3/2^+$ 态 $0\hbar\omega$ 组态占比由93%降低到23%, $2\hbar\omega$ 组态占比为75%. 而 ^{28}F 与 ^{29}Ne 负宇称基态的 $1\hbar\omega$ 组态为主导, 分别占比91%与92%. 这说明三体力加强了 sd 轨道与 pf 轨道的关联, 增强了跨壳激发, 对 $N = 20$ 反转岛的形成有显著影响.

包含三体力的第一性原理多体微扰理论成功给出了 ^{29}Ne 的负宇称基态, 三体力的引入也改善了 ^{28}F 的低激发谱, 但计算出的基态仍为正宇称. 这可能是因为 ^{29}Ne 为束缚核, 而 ^{28}F 为非束缚核, 与连续谱的耦合比 ^{29}Ne 更强, 而这里的计算并未考虑连续谱效应, 导致 ^{28}F 的计算结果与实验有差别. 对此, 我们课题组也将多体微扰理论拓展到了复空间, 通过EKK方法从现实核力出发构建包含共振态与连续态的价空间有效哈密顿量, 称为现实核力Gamow壳模型, 使第一性原理计算能够触及滴线区的弱束缚与不束缚原子核, 取得了一系列有国际影响力的重要成果^[45-50].

3 $N = 50$ 附近的同核异能素

同核异能素(isomer)是原子核的一种特殊的长寿命激发态. 激发态通常会迅速以电磁跃迁(γ 衰变)退激发, 典型半衰期为皮秒量级. 而同核异能素的寿命从纳秒到数百万年不等. 同核异能素不仅在核物理与天体物理基础研究中具有重要意义, 也在能量存储、核医学、核时钟、 γ 射线激光等领域有广阔的应用前景^[51].

自1917年Sobby提出同核异能素的概念, 1921年, Hahn于 ^{234}Pa 的激发态中发现首个同核异能素以来, 随着实验技术的不断进步, 到2022年已发现了2623个半衰期大于10 ns的同核异能素^[51], 它们在核素图上广泛分布. 同核异能素的形成是由于核结构效应导致激发态到低能级的电磁跃迁被强烈抑制. 跃迁初态与末态之间较大的自旋改变、 K 量子数(轴对称形变核在对称轴上的投影)改变、形状改变等导致跃迁矩阵元被压低, 分别形成spin isomer、 K -isomer与shape isomer等类型的同核异能素.

同核异能素的形成蕴含了丰富的核结构信息. 对

同核异能素的理论计算既能揭示原子核的壳层结构、集体运动、衰变性质等特征, 又能反过来为核模型提供测试与验证. 由于MBPT、VS-IMSRG等第一性原理方法具有强大的理论预言能力, 已成为研究同核异能素性质的有力工具^[52-54]. 我们课题组在第一性原理计算同核异能素结构与跃迁方面已取得重要进展.

中子数 $N = 50$ 与质子数 $Z = 40$ 附近的区域存在大量同核异能素, 大部分都是spin isomer, 形成机制为 $\nu 0g_{9/2}$ 到 $\nu 1p_{1/2}$ 的单空穴激发或 $\pi 1p_{1/2}$ 到 $\pi 0g_{9/2}$ 的单粒子激发, 导致了这些原子核的第一激发态与基态之间角动量之差非常大($\Delta j = 4$). 对该核区的同核异能素进行系统研究, 有助于增进对spin isomer形成机制的理解与闭壳核 ^{90}Zr 周围壳层结构的认识.

我们课题组使用第一性原理多体微扰理论构建价空间有效哈密顿量与有效算符, 计算中子幻数50附近 $N = 49$ 的同中子素, 包括 ^{83}Se 、 ^{85}Kr 、 ^{87}Sr 、 ^{89}Zr 、 ^{91}Mo 与 ^{93}Ru , 研究其 $J^\pi = 1/2^-$ 同核异能素的形成机制与衰变性质^[54]. 计算使用的手征核力为 $\text{NN}+3\text{N}(\text{Inl})$ ^[55], 手征核力的参数取为谐振子基频率 $\hbar\omega = 16 \text{ MeV}$, 包含15个主壳($e = 2n + l \leq e_{\text{max}} = 14$), 三体力截断 $e_1 + e_2 + e_3 \leq E_{3\text{max}} = 24$. 选取 ^{66}Ni 为核芯, $\pi(0f_{5/2}, 1p_{3/2}, 1p_{1/2}, 0g_{9/2}) \otimes \nu(1p_{1/2}, 0g_{9/2}, 0g_{7/2}, 1d_{5/2})$ 为价核子轨道, 通过EKK方法将哈密顿量与跃迁算符重整化到价空间, 随后使用KSHELL^[44]将有效哈密顿量对角化, 以获得能谱与跃迁概率.

图4给出这些原子核的第一个 $1/2^-$ 激发态相对于基态 $9/2^+$ 的能量, 除 ^{83}Se 外与实验值都符合得很好. 由于这些这几个核素的 $1/2^-$ 态都可以用 $\nu 0g_{9/2}$ 轨道上一个未配对的中子空穴激发到 $\nu 1p_{1/2}$ 轨道解释, 因此应该具有强的单粒子特征. 为了揭示它们的单粒子图像, 用重整化后的有效算符计算了这些态的磁矩, 并与实验值以及 $\nu 1p_{1/2}$ 轨道的中子单粒子磁矩, 即施密特极限^[56]进行比较, 如图5所示.

第一性原理多体微扰理论的计算很好地再现了已有的实验数据. 其中, ^{83}Se 、 ^{85}Kr 与 ^{87}Sr 的磁矩理论值与实验值都非常接近单粒子极限值, 表明这三个原子核的同核异能素具有很强的单粒子特征. 另外, 理论计算与实验数据的趋势保持一致, 说明 ^{83}Se 磁矩的实验值可能会略低于 ^{85}Kr . 而 ^{89}Zr 、 ^{91}Mo 与 ^{93}Ru 的磁矩理论值与实验值都偏离施密特极限, 这可能是因为多粒子

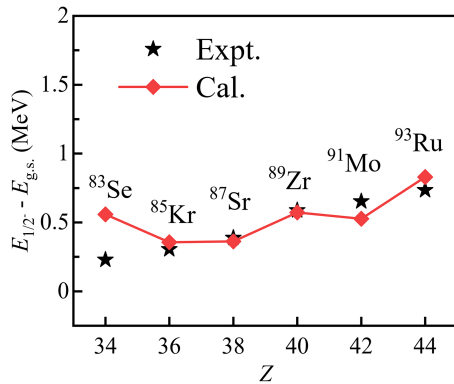


图4 (网络版彩色) $N = 49$ 同中子素的 $1/2^-$ 同核异能素相对于基态 $9/2^+$ 的能量与实验数据的比较

Figure 4 (Color online) Calculated energies of the $1/2^-$ isomers in $N = 49$ isotones with respect to the $9/2^+$ ground states, compared with experimental data

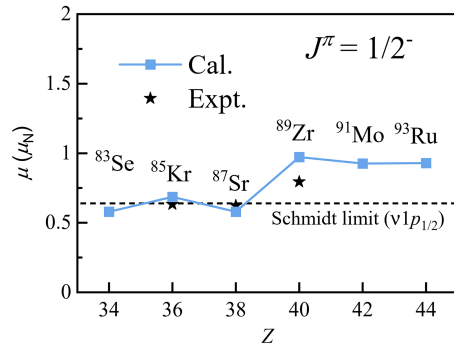


图5 (网络版彩色) $N = 49$ 同中子素的 $1/2^-$ 同核异能素的磁矩与实验数据的比较. 水平虚线表示施密特极限. 图取自文献[54]

Figure 5 (Color online) Calculated magnetic dipole moments of the $1/2^-$ isomers in $N = 49$ isotones, compared with experimental data. The dashed line represents the Schmidt limit. Figure taken from Ref. [54]

多空穴激发的组态在这三个原子核的同核异能素中权重高于 ^{83}Se 、 ^{85}Kr 与 ^{87}Sr .

为了深入理解spin isomer的形成机制,用第一性原理多体微扰理论导出 $N = 49$ 同中子素 $1/2^-$ 同核异能素到 $9/2^+$ 基态的 $M4$ 跃迁有效算符,并计算其约化跃迁概率 $B(M4)$,与实验数据进行比较,如表1所示. $B(M4)$ 理论值与实验值的偏差,可能是目前的计算中未考虑两体流[57,58]导致的. 另外,图5中,相比 ^{85}Kr 与 ^{87}Sr , ^{89}Zr 磁矩的理论值与实验值相差较大,这可能是因为多粒子多空穴激发的组态的权重增加,也可以通过在计算中包含两体流以考虑更多的多体关联来改善理论描述. 将两体流纳入计算中是我们课题组下一步准备进行的工作.

同核异能素除了能通过电磁跃迁衰变外,还能发生 β 衰变. 以第一性原理多体微扰理论计算各个跃迁分支的约化跃迁概率,具体结果见文献[54]. 考虑表1中同核异能素到基态的 $M4$ 跃迁以及各个 β 衰变分支,可得到同核异能素的半衰期,如表2所示,与实验符合得非常好,显示了第一性原理多体微扰理论描述同核异能素的可靠性非常高.

同核异能素对核天体物理核合成的影响是备受关注的热点问题. 在天体的热环境中,原子核被激发并以不同于基态的速率反应与衰变. 而同核异能素到基态的电磁跃迁被抑制,可能导致核能级的热平衡分布被破坏,对元素丰度产生影响,甚至形成新的核合成路径[59],这类对核合成有显著影响的同核异能素被称为“astromer”[60]. 比如, ^{85}Kr 是慢中子俘获过程(s -process)的分支点,此处 β 衰变与中子俘获相互竞争,使 s -过程走向两个不同的方向. 温度 $T \lesssim 21$ keV时不足以使 ^{85}Kr 能级充分达到热平衡,此时需要考虑 ^{85}Kr 的同核异能素对分支点行为的影响.

天体环境中,同核异能素会以更高激发态为中间态与基态相互转换,中间态到基态与同核异能态的跃

表1 以 $10^5 \mu_N^2 \text{ fm}^6$ 为单位的 $N = 49$ 同中子素的 $1/2^-$ 同核异能素约化跃迁概率 $B(M4)$. 表取自文献[54]

Table 1 Calculated reduced transition probabilities $B(M4)$ from the $1/2^-$ isomers in $N = 49$ isotones in units of $10^5 \mu_N^2 \text{ fm}^6$. Table taken from Ref. [54]

原子核	$J_i^\pi \rightarrow J_f^\pi$	$B(M4)(10^5 \mu_N^2 \text{ fm}^6)$	
		理论值	实验值
^{85}Kr	$\frac{1}{2}^- \rightarrow \frac{9}{2}^+$	2.54	1.41(4)
^{87}Sr		3.93	1.49(1)
^{89}Zr		4.41	1.58(1)
^{91}Mo		3.41	1.27(4)
^{93}Ru		2.77	1.18(14)

表2 $N=49$ 同中子素的 $1/2^-$ 同核异能素的半衰期. 表取自文献[54]

Table 2 Calculated half-lives of the $1/2^-$ isomers in $N = 49$ isotones. Table taken from Ref. [54]

原子核	半衰期	
	理论值	实验值
^{83}Se	1.99 min	1.17(1) min
^{85}Kr	4.173 h	4.480(8) h
^{87}Sr	5.345 h	2.815(12) h
^{89}Zr	16.580 min	4.161(12) min
^{91}Mo	47.8 s	65.0(7) s
^{93}Ru	4.8 s	10.8(3) s

迁概率对核合成计算也是必要的,但实验数据往往是不足的,亟待理论计算补充.第一性原理多体微扰理论在解释已有的同核异能素实验数据的同时,还能够补充实验尚未获得的跃迁数据.相比Weisskopf近似估计跃迁概率^[60]或唯象核模型计算,第一性原理计算跃迁概率不需要使用有效电荷^[53],对于缺乏实验数据的核区能够给出精度更高、误差可控的跃迁概率,有望为核天体物理探索提供数据驱动.

4 总结与展望

第一性原理计算已成为当前核理论发展的前沿.我们课题组发展了第一性原理多体微扰理论,在HF基下构建非简并模型空间的有效哈密顿量与有效算符,研究了手征三体力对 $N = 20$ 反转岛原子核的影响.三体力的引入极大地改善了具有奇特基态宇称的原子核 ^{28}F 与 ^{29}Ne 的正负宇称基态间距,给出了与实验接近的结果.三体力增强了跨壳激发,对描述反转岛原子核

奇特性有显著的影响,这也说明三体力对第一性原理计算是必要的.此外,我们计算了中子幻数 $N = 50$ 附近同核异能素的能量与磁矩,研究了其单粒子性质.通过 $\hat{\mathcal{O}}\text{-box}$ 方法导出了有效电磁跃迁与 β 衰变算符,研究了同核异能素的衰变性质,与实验符合得很好,验证了第一性原理多体微扰理论描述同核异能素的可靠性.同核异能素在核合成中可能扮演着不可忽视的角色,第一性原理计算能够预言实验未获得的跃迁数据,可作为核合成计算的可靠核数据输入.

随着新一代大科学装置不断建成与升级,人类对原子核的探索正向着更重、更靠近滴线的方向前进,晕核、壳演化、集团结构、同核异能素等新奇的现象不断出现.实验数据的缺乏限制了传统的唯象核模型在这些核区的适用性,而第一性原理计算对实验关心的热点核区也具有强大的理论描述与预言能力.因此,第一性原理计算正成为连接实验观测与底层理论的桥梁,在引领实验方向、解释实验数据等方面发挥着日益重要的作用.

参考文献

- Machleidt R, Entem D R. Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys Rep*, 2011, 503: 1–75
- Wiringa R B, Stoks V G J, Schiavilla R. Accurate nucleon-nucleon potential with charge-independence breaking. *Phys Rev C*, 1995, 51: 38–51
- Machleidt R. High-precision, charge-dependent Bonn nucleon-nucleon potential. *Phys Rev C*, 2001, 63: 024001
- Ökubo S. Diagonalization of Hamiltonian and Tamm-Dancoff equation. *Prog Theor Phys*, 1954, 12: 603–622
- Bogner S, Kuo T T S, Coraggio L, et al. Low momentum nucleon-nucleon potential and shell model effective interactions. *Phys Rev C*, 2002, 65: 051301
- Bogner S K, Furnstahl R J, Perry R J. Similarity renormalization group for nucleon-nucleon interactions. *Phys Rev C*, 2007, 75: 061001
- 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
- Lee D. Lattice simulations for few- and many-body systems. *Prog Part Nucl Phys*, 2009, 63: 117–154
- Tichai A, Roth R, Duguet T. Many-body perturbation theories for finite nuclei. *Front Phys*, 2020, 8: 164
- Dean D J, Hjorth-Jensen M. Coupled-cluster approach to nuclear physics. *Phys Rev C*, 2004, 69: 054320
- Tsukiyama K, Bogner S K, Schwenk A. In-medium similarity renormalization group for nuclei. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 222502
- Somà V. Self-consistent Green's function theory for atomic nuclei. *Front Phys*, 2020, 8: 340
- 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
- Kurath D. Intermediate coupling in the $1p$ -shell. *Phys Rev*, 1956, 101: 216–224
- Brown B A, Richter W A. New “USD” Hamiltonians for the sd shell. *Phys Rev C*, 2006, 74: 034315
- Hjorth-Jensen M, Kuo T T, Osnes E. Realistic effective interactions for nuclear systems. *Phys Rep*, 1995, 261: 125–270
- Coraggio L, Itaco N. Perturbative approach to effective shell-model hamiltonians and operators. *Front Phys*, 2020, 8: 345
- Tsukiyama K, Bogner S K, Schwenk A. In-medium similarity renormalization group for open-shell nuclei. *Phys Rev C*, 2012, 85: 061304
- Jansen G R, Engel J, Hagen G, et al. *Ab initio* coupled-cluster effective interactions for the shell model: application to neutron-rich oxygen and carbon isotopes. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 142502
- 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
- Roth R, Binder S, Vobig K, et al. Medium-mass nuclei with normal-ordered chiral $NN + 3N$ interactions. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 052501
- Tichai A, Langhammer J, Binder S, et al. Hartree–Fock many-body perturbation theory for nuclear ground-states. *Phys Lett B*, 2016, 756: 283–288

- 24 Suzuki K, Lee S Y. Convergent theory for effective interaction in nuclei. *Prog Theor Phys*, 1980, 64: 2091–2106
- 25 Stroberg S R, Hergert H, Bogner S K, et al. Nonempirical interactions for the nuclear shell model: an update. *Annu Rev Nucl Part Sci*, 2019, 69: 307–362
- 26 Takayanagi K. Effective Hamiltonian in the extended Krenciglowa–Kuo method. *Nucl Phys A*, 2011, 864: 91–112
- 27 Tsunoda N, Takayanagi K, Hjorth-Jensen M, et al. Multi-shell effective interactions. *Phys Rev C*, 2014, 89: 024313
- 28 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
- 29 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
- 30 Shavitt I, Bartlett R J. *Many-Body Methods in Chemistry and Physics: MBPT and Coupled-Cluster Theory*. Cambridge Molecular Science. Cambridge: Cambridge University Press, 2009
- 31 Kuo T T S, Shurpin J, Tam K C, et al. A simple method for evaluating Goldstone diagrams in an angular momentum coupled representation. *Ann Phys*, 1981, 132: 237–276
- 32 Jin S L, Hou J H, Xu F R. Simplified and more efficient computations of angular-momentum-coupled Goldstone diagrams. *Eur Phys J A*, 2025, 61: 163
- 33 Suzuki K, Okamoto R. Effective operators in time-independent approach. *Prog Theor Phys*, 1995, 93: 905–917
- 34 Coraggio L, Gargano A, Itaco N, et al. Calculation of the neutrinoless double- β decay matrix element within the realistic shell model. *Phys Rev C*, 2020, 101: 044315
- 35 Warburton E K, Becker J A, Brown B A. Mass systematics for $A = 29 - 44$ nuclei: The deformed $A \sim 32$ region. *Phys Rev C*, 1990, 41: 1147–1166
- 36 Caurier E, Nowacki F, Poves A. Merging of the islands of inversion at $N = 20$ and $N = 28$. *Phys Rev C*, 2014, 90: 014302
- 37 Liu H, Lee J, Doornenbal P, et al. Intruder configurations in the ground state of ^{30}Ne . *Phys Lett B*, 2017, 767: 58–62
- 38 Revel A, Sorlin O, Marqués F M, et al. Extending the southern shore of the island of inversion to ^{28}F . *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 152502
- 39 Miyagi T, Stroberg S R, Holt J D, et al. *Ab initio* multishell valence-space Hamiltonians and the island of inversion. *Phys Rev C*, 2020, 102: 034320
- 40 Dai B, Li J G, Zhang S, et al. Effects of three-nucleon force on the low-lying states of ^{28}F and ^{29}Ne within *ab initio* calculations (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2021, 66: 3866–3872 [戴博, 李健国, 张爽, 等. 第一性原理研究三体力对 ^{28}F 和 ^{29}Ne 低激发谱的影响. *科学通报*, 2021, 66: 3866–3872]
- 41 Entem D R, Machleidt R. Accurate charge-dependent nucleon-nucleon potential at fourth order of chiral perturbation theory. *Phys Rev C*, 2003, 68: 041001
- 42 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
- 43 Tsunoda N, Otsuka T, Shimizu N, et al. Exotic neutron-rich medium-mass nuclei with realistic nuclear forces. *Phys Rev C*, 2017, 95: 021304
- 44 Shimizu N, Mizusaki T, Utsuno Y, et al. Thick-restart block Lanczos method for large-scale shell-model calculations. *Comput Phys Commun*, 2019, 244: 372–384
- 45 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
- 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 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
- 48 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
- 49 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
- 50 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
- 51 Garg S, Maheshwari B, Singh B, et al. Atlas of nuclear isomers—Second edition. *Atom Data Nucl Data Tables*, 2023, 150: 101546
- 52 Yuan Q, Hu B S, Xu X Y, et al. $J^\pi = 19/2^-$ isomerism and direct β decay in ^{53}Co elucidated by *ab initio* calculations. *Phys Rev C*, 2025, 111: 034309
- 53 Fan S Q, Yuan Q, Xu F R, et al. *Ab initio* calculations of the highest-multipole electromagnetic transition ever observed in nuclei. *Nucl Sci Tech*, 2025, 36: 222
- 54 Fan S, Yuan Q, Hu R, et al. *Ab initio* calculations of isomers in nuclei near the magic number $N=50$. *Commun Theor Phys*, 2026, 78: 025301
- 55 Somà V, Navrátil P, Raimondi F, et al. Novel chiral Hamiltonian and observables in light and medium-mass nuclei. *Phys Rev C*, 2020, 101: 014318
- 56 Schmidt Th. Über die magnetischen Momente der Atomkerne. *Z Physik*, 1937, 106: 358–361
- 57 Miyagi T, Cao X, Seutrin R, et al. Impact of two-body currents on magnetic dipole moments of nuclei. *Phys Rev Lett*, 2024, 132: 232503
- 58 Acharya B, Hu B S, Bacca S, et al. Magnetic dipole transition in ^{48}Ca . *Phys Rev Lett*, 2024, 132: 232504
- 59 Aprahamian A, Sun Y. Long live isomer research. *Nat Phys*, 2005, 1: 81–82
- 60 Misch G W, Ghorui S K, Banerjee P, et al. Astromers: nuclear isomers in astrophysics. *Astrophys J Suppl Ser*, 2020, 252: 2

Summary for “第一性原理多体微扰理论”

Ab initio many-body perturbation theory

Ziyan Meng¹ & Furong Xu^{1,2*}¹ State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China² Southern Center for Nuclear-Science Theory (SCNT), Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Huizhou 516000, China

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

Nuclear *ab initio* calculations have currently emerged as the frontier of nuclear theory research. Starting from realistic nuclear forces that reproduce nucleon-nucleon scattering data, *ab initio* calculations have achieved precise descriptions of nuclear structure using rigorous quantum many-body methods. Compared with phenomenological nuclear models, *ab initio* calculations are capable of providing more fundamental and reliable theoretical analysis and predictions, without relying on additional parameters.

The configuration interaction shell model has been one of the fundamental concepts for understanding nuclear structure since its inception. In recent years, the dramatic progress of *ab initio* calculations has provided novel opportunities to derive shell model interactions from chiral nuclear forces. The paper presents an overview of the derivation of effective shell-model Hamiltonians and operators within the framework of *ab initio* many-body perturbation theory, named $\hat{Q}$ -box and $\hat{\Theta}$ -box folded diagrams, and reviews our recent work on exotic nuclei and nuclear isomers. With extended Kuo-Krenciglowa method, the effective Hamiltonians across the non-degenerate *sdpf* valence space are constructed in the Hartree-Fock basis to investigate the properties of nuclei in the $N = 20$ island of inversion. The constructed effective Hamiltonians are then diagonalized with the shell model method to obtain the low-lying states of ^{28}F and ^{29}Ne , which are located on the southern shore of the $N = 20$ island of inversion. Including three-body forces improves the agreement with experiment as compared to the use of two-body forces only, especially in ^{29}Ne where the first negative-parity state becomes the ground state. Three-body forces have a significant effect on the relative position between the neutron $0d_{3/2}$ and $1p_{3/2}$ orbit, leading to their inversion and enhanced cross-shell excitations. Our calculations show that three-body forces are crucial for *ab initio* descriptions of exotic nuclei.

Nuclear isomers are metastable excited states of atomic nuclei, in which electromagnetic transitions to lower-lying states are inhibited. The study of isomers provides a unique probe for testing nuclear models and offers fundamental insights into nuclear structure. We have performed *ab initio* calculations of the $J^\pi = 1/2^-$ isomers in $N = 49$ isotones ^{83}Se , ^{85}Kr , ^{87}Sr , ^{89}Zr , ^{91}Mo and ^{93}Ru near the magic number $N = 50$ with *ab initio* many-body perturbation theory. The effective operators of electromagnetic transitions and β -decay are obtained self-consistently using $\hat{\Theta}$ -box folded diagrams. The excitation energies, magnetic dipole moments, reduced probabilities of $M4$ transitions and half-lives of these isomers are in good agreement with experimental data. Our results reveal the single-particle characteristics of these $N = 49$ isomers and demonstrate the reliability of *ab initio* calculations. Therefore, the unmeasured electromagnetic transition data supplemented by *ab initio* predictions hold promise as reliable nuclear data inputs for astrophysical nucleosynthesis calculations, where isomers may play significant roles.

ab initio, many-body perturbation theory, island of inversion, isomers

doi: [10.1360/CSB-2025-5588](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5588)