



手征核力与核结构第一性原理计算研究进展

胡荣哲¹, 李健国^{1,2}, 袁琪^{1,2}, 许志成^{1,3}, 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, 南方核科学理论中心, 惠州 516000

3. 复旦大学现代物理研究所, 核物理与离子束应用教育部重点实验室, 上海 200433

* 联系人, E-mail: frxu@pku.edu.cn

2025-08-30 收稿, 2025-11-05 修回, 2025-11-06 接受, 2025-11-07 网络版发表

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

摘要 理解核子之间的相互作用力是核物理追求的基本目标之一. 近年来, 源于手征有效场论的手征核力已成为核结构第一性原理计算的理论基石, 对广泛的原子核结构可观测量展现出极强的预言能力. 借助强有力的量子多体方法, 第一性原理计算的应用范围已从仅有几个核子的少体系统拓展至重质量核区, 从稳定核素延伸到奇异的滴线核区, 实现了对激发谱、电磁跃迁及连续态效应等丰富物理现象的精确描述. 本文综述了近年来我们基于手征核力在核结构第一性原理计算中取得的主要进展, 并探讨了核力在其中扮演的关键角色.

关键词 手征核力, 第一性原理, 共振态, 连续谱, 电磁跃迁

对核力本质的探索, 是贯穿近代物理学发展史的核心议题之一. 20世纪初期, 随着卢瑟福与查德威克相继发现质子和中子, 原子核的现代模型得以确立. 一个根本性问题也随之浮现: 是何种强大的力克服了质子之间的库仑排斥, 从而将原子核紧紧地束缚在一起? 尽管如今我们已经知道核力源于强相互作用, 但对其早期的探索却经历了漫长而曲折的道路. 最初, 物理学家基于类比思想提出了多种理论构想, 例如海森堡的电荷交换模型与马约拉纳的空间坐标交换模型. 然而, 这些早期的唯象模型均存在根本性缺陷, 无法完整描述核力的全部性质, 当时的物理学界普遍认为核力的真实形式或许是这些模型的某种组合.

这一局面被汤川秀树提出的革命性见解所打破, 将核力研究推向了崭新的高度. 他将量子电动力学中交换光子产生电磁相互作用的思想进行类比, 提出核子之间的相互作用同样源于交换某种粒子产生的, 他将这种传递核力的粒子命名介子, 并且预言其质量约

为电子的200倍. 随着 π 介子在宇宙射线中的发现, 其性质与汤川秀树的预言高度吻合, 标志着核力理论的第一次重大突破, 并成功解释了核力的长程吸引行为(>2 fm). 随着高能散射实验的发展, 核力复杂的短程性质逐渐浮出水面, 人们意识到核力具有短程排斥芯(<0.5 fm), 并且在中程区域($0.7\sim 2$ fm)呈现出较强的吸引作用, 这样的中程吸引是核子束缚成原子核的主要原因. 为了描述这些短程性质, 研究者在理论中引入了更重的介子交换, 由此催生了包括里德势(Reid potential)、巴黎势(Paris potential)、波恩势(Bonn potential)^[1]、阿贡势(Argonne potential)^[2]在内的一系列高精度唯象势模型. 这些模型通过大量可调参数拟合核子散射实验数据, 呈现出百家争鸣的局面, 但其唯象本质使得物理学界普遍期待一个更深层次的理论来统一描述核力.

随着20世纪70年代粒子物理学取得突破性进展, 量子色动力学(quantum chromodynamics, QCD)被确立

引用格式: 胡荣哲, 李健国, 袁琪, 等. 手征核力与核结构第一性原理计算研究进展. 科学通报, 2026, 71: 993–1002

Hu R, Li J, Yuan Q, et al. Chiral nuclear forces and *ab initio* nuclear structure calculations (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 993–1002, doi: 10.1360/CSB-2025-5445

为描述强相互作用的基本理论, 对核力的理解也得到了根本性的革新: 核力是夸克胶子之间强相互作用的剩余相互作用. 然而, 由于QCD的低能非微扰特性, 直接从其出发计算核力是极其困难的, 而这最终催生了手征有效场论(chiral effective field theory, χ EFT)的诞生^[3-5]. 温伯格提出, 在核物理的能标下, 并不需要知道夸克、胶子的所有底层动力学细节, 只需要抓住系统的基本自由度和对称性就足够了. 他提出了一套系统可改善的方案, 以核子和 π 介子为基本自由度, 利用QCD在低能下的手征对称性来逐阶构造核力的具体形式, 这个框架被称为手征有效场论, 这样得到的核力被称为手征核力.

如今, 基于手征核力的第一性原理(*ab initio*, first-principles)计算已成为理论核物理最具挑战性的前沿领域之一. 得益于先进量子多体方法和超级计算机的飞速发展, 第一性原理计算从少体系统拓展到了滴线区原子核、重质量原子核以及核物质. 近年来, 我们在这些方面做出了一系列重要成果, 本文从手征核力的角度进行综述.

1 手征核力的基本性质与数学形式

在 χ EFT的框架下, 理论的出发点是以核子和 π 介子为基本自由度构造手征拉格朗日量, 并要求手征拉氏量具有与低能QCD拉氏量相同的对称性. 具体来说, χ EFT的对称性为: 局域手征性、空间反射对称性、时间反演对称性、电荷共轭对称性、厄米性和洛伦兹协变性. 借助对称性及对称变换规则, 可以按照某种数幂规则(power counting)逐阶构造手征拉氏量, 再经过复杂的正规化和重整化步骤, 最后推导出非相对论极限下核力的算符表达式. 由此得到的手征核力天然继承了QCD拉氏量的对称性, 其中洛伦兹协变性在非相对论极限下退化为平移对称性、伽利略不变性和空间旋转对称性. 对称性极大地约束了核力的数学形式, 可以证明, 手征两体核力在自旋空间最多只包含6个线性无关的算符结构, 最一般形式写为^[6]

$$\begin{aligned} V_{NN} = & V_C + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 W_C + [V_S + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 W_S] \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \\ & + [V_{LS} + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 W_{LS}] (-i\mathbf{S} \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{k})) \\ & + [V_T + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 W_T] \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{q} \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{q} + \\ & [V_{\sigma k} + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 W_{\sigma k}] \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{k} \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{k} \\ & + [V_{\sigma L} + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 W_{\sigma L}] \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{k}) \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (1)$$

值得强调的是, 中心力、自旋轨道耦合力以及其他张量力成分均是在手征有效场论的框架下自然涌现,

无需任何人为的额外假设. 另外, 三体相互作用也会在次次领头阶(N^2 LO)自然出现, 包含两 π 交换、单 π 交换和接触项:

$$V_{3N}^{N^2LO} = V_{3N}^{2\pi} + V_{3N}^{1\pi} + V_{3N}^{ct}, \quad (2)$$

其中,

$$V_{3N}^{2\pi} = \frac{g_A^2}{8f_\pi^2} \sum_{i \neq j \neq k} \frac{(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{q}_i)(\boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{q}_j)}{(q_i^2 + M_\pi^2)(q_j^2 + M_\pi^2)} F_{ijk}^{\alpha\beta} \tau_i^\alpha \tau_j^\beta, \quad (3)$$

$$V_{3N}^{1\pi} = -\frac{g_A c_D}{8f_\pi^4 A_\chi} \sum_{i \neq j \neq k} \frac{\boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{q}_j}{q_j^2 + M_\pi^2} (\boldsymbol{\tau}_i \cdot \boldsymbol{\tau}_j)(\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{q}_j), \quad (4)$$

$$V_{3N}^{ct} = \frac{c_E}{2f_\pi^4 A_\chi} \sum_{j \neq k} \boldsymbol{\tau}_j \cdot \boldsymbol{\tau}_k. \quad (5)$$

其中包含了2个新的三体耦合顶点 c_D 和 c_E , 需要通过三体散射或其他观测量来确定. 可以看到, 手征核力在动量空间具有相当复杂的自旋、同位旋数学结构, 但是这些结构都是在手征有效场论的框架下根据对称性的要求自然出现的, 使其相比传统唯象模型具有更坚实的理论基础和更强的自洽性. 除此之外, 由于手征有效场论是一个低能有效理论, 必须进行正规化处理, 在核力的算符结构上乘一个正规子(regulator)来压制高动量成分. 根据正规子的不同类型, 手征核力进一步被分为非局域的(nonlocal)、局域的(local)、局域-非局域的(local-nonlocal, lnl)和半局域的(semilocal)^[7]. 核力的非局域性主要取决于接触项的具体形式以及正规子的选取, 当然按照手征有效场论的思想, 当我们逐渐走向更高阶时, 正规子选取带来的差异会逐渐消失. 在多体计算中大家发现, 三体力的正规子形式对预言中等质量核的结合能和电荷半径起到关键作用, 因此后面我们主要关注三体力的正规子形式. Nonlocal正规子是目前核结构第一性原理计算中得到最广泛应用的三体力正规子, 其数学形式为

$$f_{\text{nonlocal}} = \exp \left[- \left(\frac{4p^2 + 3q^2}{4\Lambda^2} \right)^{2n} - \left(\frac{4p'^2 + 3q'^2}{4\Lambda^2} \right)^{2n} \right], \quad (6)$$

其中, p 和 q 是三体雅可比动量, Λ 称为截断(cutoff), 一般取值范围是400~600 MeV. 在量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo, QMC)方法中, 由于是在坐标空间求解多体薛定谔方程, 因此需要采用local正规子, 例如最常见的形式:

$$f_{\text{local}} = \exp \left[- \left(\frac{(p'_2 - p_2)^2}{\Lambda^2} \right)^n - \left(\frac{(p'_3 - p_3)^2}{\Lambda^2} \right)^n \right], \quad (7)$$

其中, p_2, p_3 是2,3核子的动量. 另外, 较新的还有两者相结合的lnl正规子^[8]:

$$f_{\text{lnl}} = f_{\text{local}} f_{\text{nonlocal}}. \quad (8)$$

Semilocal正规子在核结构计算中的应用尚且较少, 因此不做展开.

尽管手征核力的具体数学形式是确定的, 但是接触项中的低能有效常数(low energy constants, LECs)仍需要通过实验数据来确定. 这些LECs包含了QCD完整动力学的低能信息, 与传统唯象模型中的可调参数有根本区别. 理论上通过格点QCD可以直接计算出这些LECs的数值, 但是限于目前格点QCD的计算能力, 通常采取更加实际的做法, 利用核子-核子散射实验数据(相移、微分截面等)来确定手征两体力中的LECs, 利用三核子散射的实验数据(微分截面、极化率等)或有限核的结合能、半径等来确定手征三体力中的LECs. 目前对于两体力LECs的确定已经相当成熟, 但三体力LECs的确定方案仍存在较大争议. 截至目前, 已经发展出许多套成熟的手征两体和三体相互作用, 为核结构第一性原理计算提供了丰富的选择, 它们之间在正规子、截断、阶数、拟合策略上有所区别, 但都扎根于同一个有效理论的框架. 同时, 通过比较不同核力给出的计算结果, 也为我们系统性评估来自核力的误差提供了重要途径. 我们将在第4节系统总结比较不同类型手征核力在核结构计算中的特点和区别.

2 量子多体方法

第一性原理量子多体方法是核结构计算的前沿, 其旨在通过系统可改善的方式精确求解多体薛定谔方程^[9]:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (9)$$

其中, 多体哈密顿量包含了内禀动量部分以及核子间相互作用部分:

$$\hat{H} = \frac{1}{A} \sum_{i < j} \frac{(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j)^2}{2m} + \sum_{i < j} \hat{V}_{\text{NN}}^{ij} + \sum_{i < j < k} \hat{V}_{\text{3N}}^{ijk}. \quad (10)$$

当核子数 A 不太多时, 可以对多体薛定谔方程精确地进行求解, 代表方法有法捷耶夫方程(Faddeev equation)^[10]、无核芯壳模型(no-core shell model, NCSM)^[11]和量子蒙特卡罗(quantum Monte Carlo, QMC)^[12]. 其中, NCSM是一种基于谐振子基矢对哈密顿量进行大规模矩阵对角化的方法, 通过系统地增大模型空间来逼近

精确解. 这些方法在计算能力范围内是精确的, 但是由于计算量随核子数的增加指数增长, 只适用于轻质量区($A \leq 16$). 为了向更重的原子核推进, 需要通过引入一些近似来将计算量控制在多项式级别, 例如多体微扰理论(many-body perturbation theory, MBPT)^[13]、耦合簇方法(coupled cluster, CC)^[14]、自洽格林函数(self-consistent Green's function, SCGF)^[15]以及介质相似重整化群(in-medium similarity renormalization group, IMSRG)^[16]. 这些方法的核心思想是基于Hartree-Fock参考态, 通过对波函数或算符的逐阶校正来包含多体关联. 例如, IMSRG通过连续的 ϵ 正变换来解耦哈密顿量矩阵的非对角部分, 通过将多体哈密顿量在正规排序后截断到两体或三体水平, 从而大幅降低计算复杂度. 这些方法均是系统可改进的第一性原理多体方法. 2022年对重质量核 ^{208}Pb 的首次定量计算, 标志着第一性原理向重核区迈进的里程碑^[17].

我们课题组在第一性原理量子多体方法上取得了一系列新进展, 其中包括能够计算弱束缚或非束缚原子核的无核芯Gamow壳模型(NCGSM)^[18]、Gamow壳模型(GSM)^[19]和Gamow介质相似重整化群(G-IMSRG)^[20-22]. 这些方法与传统的第一性原理方法在基矢选择上有着本质不同. 传统的MBPT和IMSRG方法中使用的单粒子基矢是束缚的谐振子基矢, 其波函数随空间坐标 r 指数衰减, 固有地无法有效描述具有明显空间延展的弱束缚、非束缚体系. 为了解决这一限制, NCGSM、GSM和G-IMSRG方法使用了复动量空间的Berggren基矢, 将共振态、连续态信息自然包含在广义的完备性关系中, 在计算弱束缚或非束缚原子核体系中具有独特的优势, 不仅可以计算体系的能量 E , 也可以同时给出共振宽度 Γ .

3 结果与讨论

3.1 $\text{N}^3\text{LO}_{\text{EM}}$

由Entem和Machleidt发展的 $\text{N}^3\text{LO}_{\text{EM}}$ 手征核力是一项里程碑式的工作^[23], 标志着手征核力迈向高精度时代, 已被广泛应用于核结构计算. 该核力在次次次领头阶(N^3LO)构建, 采用nonlocal形式正规子, 其包含的29个LECs通过对数千个核子-核子散射数据的精确拟合来确定. 其最终达到的精度可与当时最先进的唯象核力(如AV18)相媲美, 有力地展现了手征展开良好的收敛性. 在本节中, 我们展示结合发展的第一性原理

NCGSM, 在非束缚核共振态研究中取得的两项关键成果.

四中子体系是否存在, 是核物理领域一个长期悬而未决且备受关注的前沿课题^[24]. 作为一个纯由中子构成的非束缚系统, 对其进行理论描述的核心难点在于如何精确处理连续谱效应. 我们利用NCGSM方法的独特优势, 即通过Berggren基矢恰当处理连续谱耦合, 并结合高精度的 $N^3\text{LO}_{\text{EM}}$ 手征核力, 对该体系进行了深入计算^[18]. 我们的计算结果对可能存在的四中子态给出了2.6 MeV的共振能量和2.3 MeV的共振宽度的预言. 这一预言在2022年得到了实验的有力证实^[25], 实验团队通过 ^8He 敲出反应成功观测到了四中子共振态, 其实验测定的能量与宽度与我们的理论预言高度吻合. 如图1所示, 只有在第一性原理框架下正确地包含连续谱效应, 才能对这类奇特的非束缚系统给出可靠的描述.

在此基础上, 我们进一步将该理论方法应用于研究 ^4H 、 ^4He 和 ^4Li 中角动量宇称为 $J^\pi=2^-$ 的同位旋相似态^[26], 这些态也都是宽共振态, 体现出强烈的连续谱耦合效应. 如图2所示, 我们计算的结果与现有的实验数据很好吻合, 并且揭示了其中的同位旋对称性破缺效应. 由于在 ^4H 中只存在1个质子, 相互作用中没有库仑排斥, 导致其 2^- 态的能量较低, 而 ^4He 和 ^4Li 中由于多个质子之间的库仑排斥导致 2^- 态能量偏高. 在这些体系中, 正确处理同位旋对称性破缺效应和连续态效应是NCGSM方法成功的关键.

3.2 $N^2\text{LO}_{\text{opt}}$ 和 $N^2\text{LO}_{\text{sat}}$

精确确定手征核力中的LECs是连接理论与实验的关键, 这既是一个物理问题, 也对数值优化技术提出了极高的要求. 随着POUNDERS等多参数优化算法的发展, 同时拟合数十个LECs成为可能, 这直接催生了 $N^2\text{LO}_{\text{opt}}$ ^[27]和 $N^2\text{LO}_{\text{sat}}$ ^[28]两个新型手征核力. $N^2\text{LO}_{\text{opt}}$ 是一个纯两体相互作用, 其LECs通过对核子-核子散射数据进行高精度拟合而确定. 尽管该核力不包含显式的三体力贡献, 但在后续的核结构计算中, 它出人意料地成功描述了氧同位素滴线、钙同位素链的壳效应等关键的多体现象. 这预示着, 与该两体力适配的三体力贡献可能较弱.

$N^2\text{LO}_{\text{sat}}$ 则在拟合策略上迈出了更大一步, 它首次将多体系统的观测量, 如中等质量核(如 ^{14}C 、 ^{16}O)的结

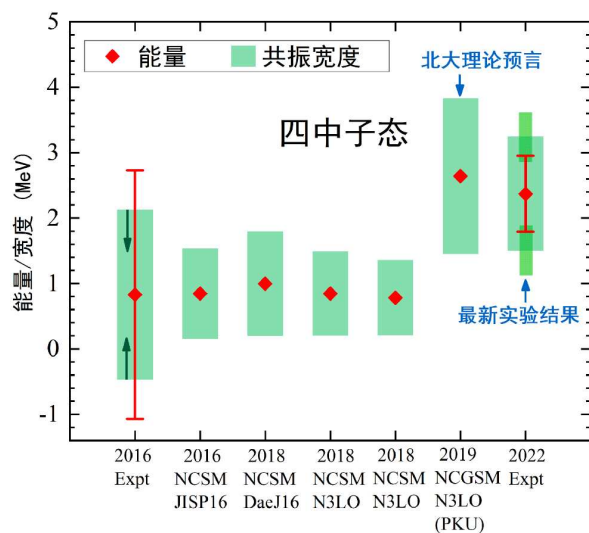


图1 (网络版彩色)四中子体系共振能量和宽度的理论预言与实验值的比较^[18,25], 其中红色点代表共振能量, 绿色阴影高度代表共振宽度. 2019年的结果是我们NCGSM的预言

Figure 1 (Color online) Experimental and predicted resonance energy and width of the $4n$ system^[18,25], where red diamonds and the heights of green shadows indicate energy and width respectively. The 2019 values are our NCGSM predictions

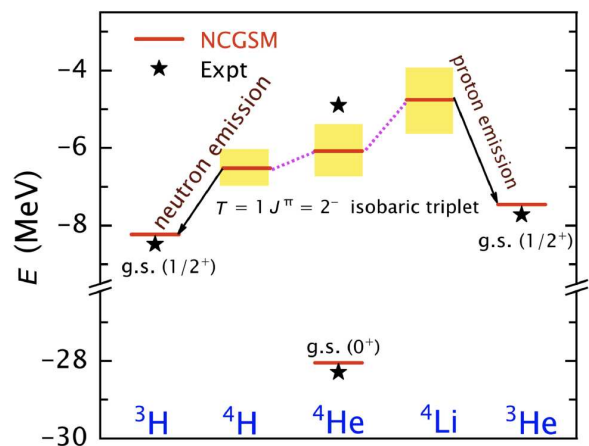


图2 (网络版彩色)NCGSM对 $A=3, 4$ 原子核的计算结果^[26], 其中红色横线代表能量, 黄色阴影高度代表共振态的宽度

Figure 2 (Color online) NCGSM results of $A=3, 4$ nuclei^[26], where the red lines and the heights of yellow shadows indicate energy and resonance widths, respectively

合能与半径纳入LECs的全局拟合中. 通过这种少体加多体的约束策略, 两体力和三体力的LECs得到了同时优化. 结果表明, 由此构建的两体加三体相互作用能够对直到中重核区的原子核基态性质提供系统的精确描述.

借助我们团队发展出的形变基IMSRG (D-

IMSRG), 我们使用 N^2LO_{opt} 作为核力输入量, 对Be、C、O、Ne、Mg同位素链的基态能量和电荷半径进行了系统的研究^[29]. 相比于传统的采用球形基的IMSRG方法, D-IMSRG使用了形变的Hartree-Fock(HF)基矢, 能够更加有效地包含形变原子核的静态关联. 在D-IMSRG中, 演化后的多体波函数不再具有球对称性, 需要通过额外的角动量投影来恢复球对称性. 如图3所示, N^2LO_{opt} 能够很好再现这些同位素链的基态能量. 特别是在中子数 $N=20$ 反转岛区域的Ne、Mg同位素计算中, 角动量投影的修正变得较为重要, 这直接反映了该区域原子核强烈的组态混合特征. 考虑了形变信息的D-IMSRG与球形基的价空间IMSRG (VS-IMSRG)之间不仅可以互相检验多体方法的精度, 其差异本身也成为探测原子核形变效应的有效指标. 如图4所示, 然而在电荷半径的计算中, 尽管不同第一性原理方法给出的结果彼此高度自洽, 但它们与实验值相比均存在系统性的低估. 这一半径之谜并非 N^2LO_{opt} 特有, 而是当前几乎所有手征核力共同面临的一个普遍性难题^[30]. 目前, 解决这一难题的探索方向主要集中在手征核力的高阶修正(如三体力在 N^4LO 的贡献)以及对电荷半径算符的高阶修正^[31].

除了形变, 连续谱效应对晕核的密度分布也至关

重要, 其中一个典型例子就是晕核 ^{22}C . 针对此类弱束缚系统, 我们发展了复空间采用Berggren基矢的Gamow-IMSRG (G-IMSRG)方法^[31], 使用 N^2LO_{opt} 和 N^2LO_{sat} 对其物质分布密度进行了计算. 如图5所示, 只有当连续态效应被G-IMSRG恰当处理后, 计算出的 ^{22}C 的密度才具有晕核典型的长尾分布, 展示了这个体系中连续态效应的重要性. 进一步比较两种核力的结果可以发现, N^2LO_{opt} 给出的密度分布更集中于核心, 导致半径偏小. 而包含了三体力且在拟合中加入更多多体信息的 N^2LO_{sat} , 则给出了空间延展更广的密度分布和更接近实验值的半径. 这一对比不仅再次证实了三体力和优化策略对于精确描述原子核半径的重要性, 同时也解释了当前手征核力在半径相关物理量的预言上仍存在不可忽略的理论不确定度, 对核力的进一步发展提出了明确的方向.

3.3 Magic force, 1.8/2.0(EM)

1.8/2.0(EM)是目前第一性原理计算中应用最广泛的手征核力之一^[32]. 该核力的两体部分源于 N^3LO_{EM} , 并通过相似重整化群(similarity renormalization group, SRG)方法演化至较低动量尺度 $\Lambda_{SRG}=1.8$ fm; 三体部分则采用 $A=2.0$ fm的nonlocal正规子. 由于其在很广的质量范围内, 从 ^3H , ^4He 的少体系统, 到中重质量区原子核

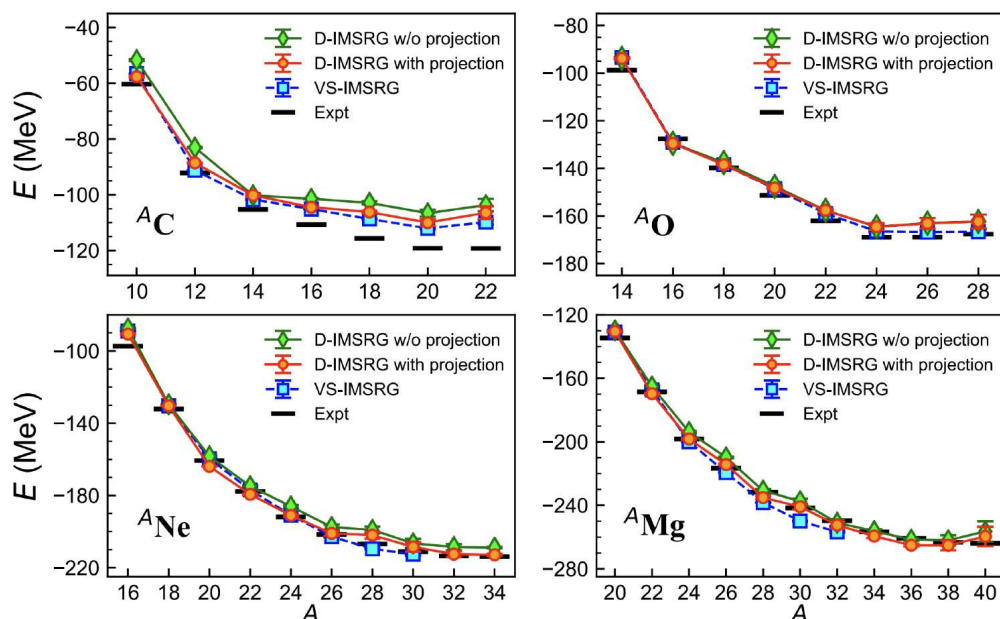


图3 (网络版彩色)C、O、Ne和Mg同位素链基态能量的理论值^[29]与实验值的比较

Figure 3 (Color online) Calculated ground-state energies of C, O, Ne and Mg isotopes^[29] compared with data

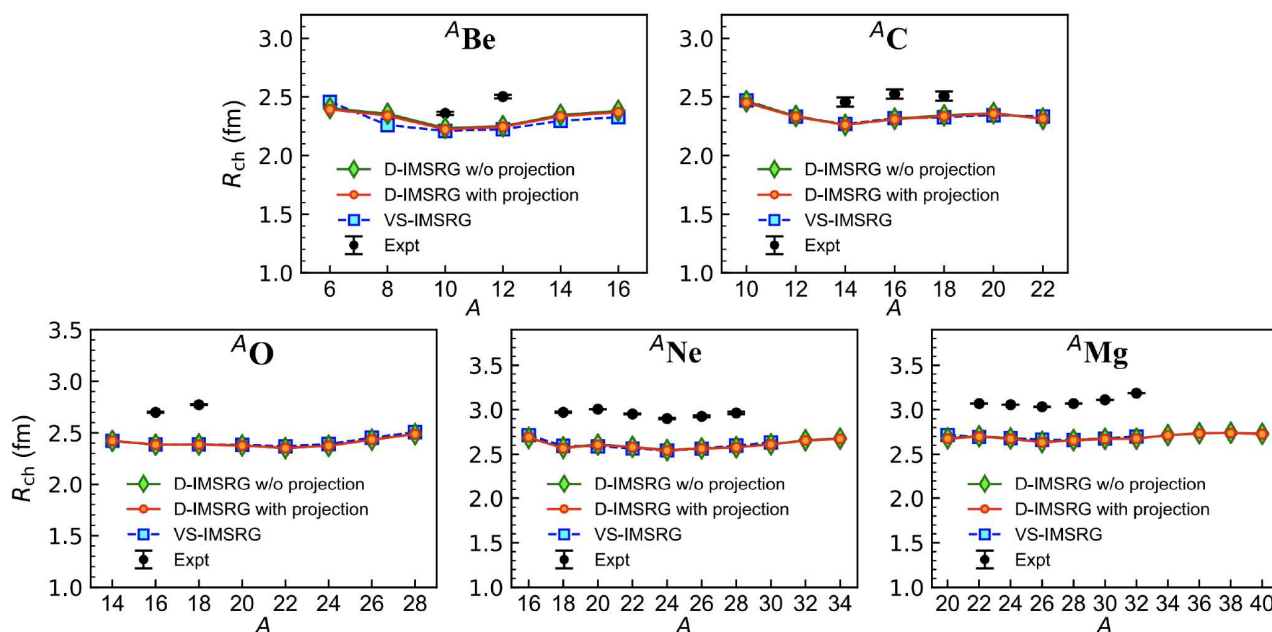


图4 (网络版彩色)C、O、Ne和Mg同位素链基态电荷半径的理论值^[29]与实验值的比较
Figure 4 (Color online) Calculated charge radii of C, O, Ne and Mg isotopes^[29] compared with data

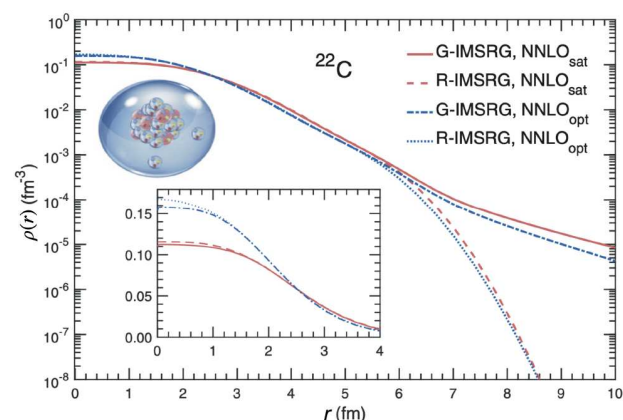


图5 (网络版彩色)使用两种核力计算的²²C基态密度分布, 其中G-IMSRG计算考虑了连续态效应^[20]
Figure 5 (Color online) Calculated ground-state densities of ²²C, in which G-IMSRG calculations include continuum effects^[20]

(如¹³²Sn), 乃至核物质, 都能精确地再现结合能, 因此被誉为magic force. 我们将其应用于研究原子核的电磁跃迁. 具体而言, 我们发展了一套复空间的有效算符方法, 基于多体微扰理论对Gamow-Teller (GT)跃迁算符进行重整化, 系统研究了连续态效应对GT跃迁的影响. 如图6所示, 相比于不考虑连续态效应的SM结果, 在复空间进行算符重整化的GSM计算对GT跃迁矩阵元的计算有系统性改善. 特别地, 在²²Si→²²Al和²²O→²²F的

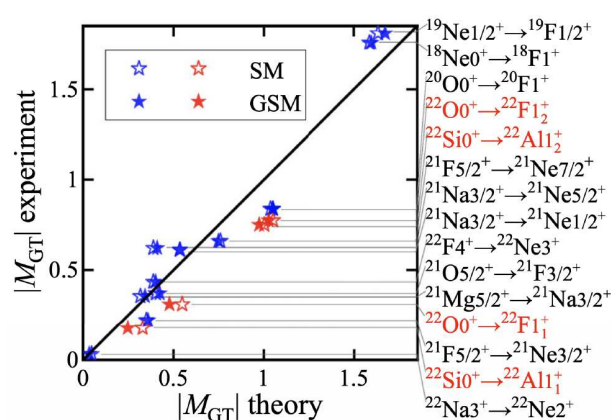


图6 (网络版彩色)使用1.8/2.0(EM)两体加三体核力对A~20质量区GT跃迁矩阵元的计算结果与实验值的比较
Figure 6 (Color online) A~20 GT transition matrix elements calculated with 1.8/2.0(EM), compared with data

GT跃迁计算中, 由于这些原子核位于质子滴线附近, 其弱束缚特性使得连续态效应的贡献变得至关重要.

3.4 NN+3N(lnl)

随着研究的深入, 人们逐渐意识到三体力的正规子形式对计算结果有显著影响. 在NN+3N(lnl)这个两体加三体相互作用中, 研究者首次尝试使用了lnl形式的三体正规子^[8], 通过A=3,4的少体性质确定两个三体

力接触项, 而其两体力部分仍是 $N^3\text{LO}_{\text{EM}}$. 该核力在描述原子核基态能量上, 其表现与 $1.8/2.0(\text{EM})$ 相当.

同核异能态(isomer)是检验核理论的重要探针^[34], 尤其对天体的快质子俘获(rp)过程有重要影响. 我们选取了存在长寿命 $19/2^-$ 同核异能态的 ^{53}Co , ^{53}Fe 作为研究对象, 系统检验了三体力在描述其能谱结构中的作用^[35]. 如图7所示, 若仅考虑两体力, 理论无法再现正确的能级顺序和isomer的存在. 当引入三体力后, 无论是 $1.8/2.0(\text{EM})$ 还是 $\text{NN}+3\text{N}(\text{lnl})$ 相互作用, 计算结果均能与实验能谱很好符合, 并成功还原了其中的isomer结构. 这表明了三体力在描述该区域原子核结构中扮演着不可或缺的角色. 更重要的是, 两种构造细节完全不同的三体力给出的激发能也高度一致, 这表明了第一性原理计算对该体系能谱预言的可靠性.

4 总结与展望

本文系统综述了基于手征核力的核结构第一性原理计算的近期进展. 我们课题组长期致力于该领域的前沿研究, 特别是在发展适用于远离稳定线的奇异原子核的量子多体方法方面. 我们通过发展包含Gamow壳模型、Gamow相似重整化群在内的一系列强有力量子多体方法, 将第一性原理的计算版图成功拓展到了连续谱效应至关重要的弱束缚、非束缚核区, 为我们深入理解滴线区原子核的奇特结构与现象提供了强有力的理论武器.

手征有效场论是连接核物理与底层理论(QCD)的桥梁, 对于第一性原理核结构的计算非常重要, 未来的发展将聚焦于几个关键方向. 首先, 将核力的构建推向微扰展开的更高阶(如 $N^4\text{LO}$), 这将有助于系统地减小理论误差、并严格检验手征核力的收敛性. 其次, 更深入研究三体力的约束策略, 不仅可能需要新的实验数据, 也需要发展能够更精确包含少体和多体观测量的全局拟合方法. 另外, 为了解决长期存在的电荷半径和电磁跃迁矩阵元预言值普遍偏小等难题, 更加深入地对电弱流算符进行研究也是一个重要的方向.

更进一步, 在多体计算框架的选择上, 也存在着一个极具潜力的前沿方向. 由于求解多体薛定谔方程的复杂性, 目前绝大多数多体方法都是以非微扰的方式求解多体薛定谔方程, 例如CC和IMSRG等. 然而, 使用微扰核力作为输入量的微扰多体计算还处于早期探索阶段, 这是一个具有挑战性的前沿领域^[36-38]. 目前在非微扰多体计算中遇到的长期无法解决的问题(如系统性的半径低估), 能否在微扰的框架下得到解决或改善, 是一个很有价值的问题. 这种微扰框架下的计算有望为这些疑难提供全新的理解, 也为检验手征有效场论本身提供了独立且重要的验证途径.

第一性原理的核结构计算不仅是微观核力的应用者, 更是检验和指导核力构建的重要工具. 当前学界对于手征核力的构建方式仍存在不同看法, 例如以Machleidt为代表的非相对论方法与以van Kolck等人所强

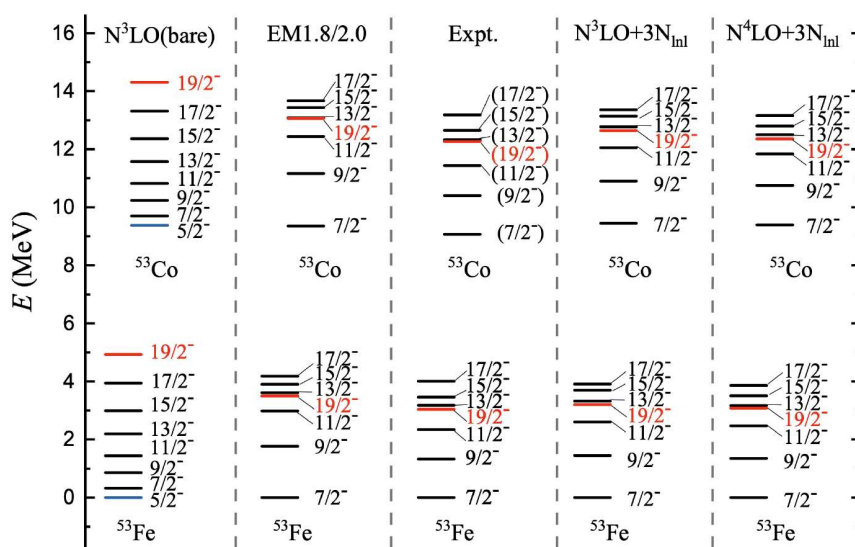


图7 (网络版彩色)使用不同核力对 ^{53}Co 和 ^{53}Fe 能谱的计算结果并与实验值进行比较^[35]

Figure 7 (Color online) Calculated ^{53}Co and ^{53}Fe spectra using different chiral interactions, compared with data^[35]

调的相对论不变性, 以及正则化和重整化方案对于核力本身收敛性的影响等问题^[39-41]. 核结构计算的反馈价值正体现于此: 通过对跨越核区的大量原子核的结合能、半径、电磁跃迁等可观测量进行高精度的系统

计算, 其结果可以用于有效区分和评价不同手征核力构建方案的优劣. 最终, 手征核力与核结构多体计算之间的协同发展, 将会进一步提升第一性原理的预言能力, 深化我们对原子核之间相互作用的根本理解.

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
- Weinberg S. Phenomenological Lagrangians. *Physica A*, 1979, 96: 327–340
- Weinberg S. Dynamical approach to current algebra. *Phys Rev Lett*, 1967, 18: 188–191
- Weinberg S. Pion scattering lengths. *Phys Rev Lett*, 1966, 17: 616–621
- Machleidt R, Entem D R. Chiral effective field theory and nuclear forces. *Phys Rep*, 2011, 503: 1–75
- Hebeler K. Three-nucleon forces: Implementation and applications to atomic nuclei and dense matter. *Phys Rep*, 2021, 890: 1–116
- 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
- Hergert H. A guided tour of *ab initio* nuclear many-body theory. *Front Phys*, 2020, 8: 379
- Glöckle W. The Quantum Mechanical Few-body Problem. Berlin: Springer-Verlag, 1983
- Barrett B R, Navrátil P, Vary J P. *Ab initio* no core shell model. *Prog Particle 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, Covello A, Gargano A, et al. Shell-model calculations and realistic effective interactions. *Prog Particle Nucl Phys*, 2009, 62: 135–182
- Hagen G, Papenbrock T, Hjorth-Jensen M, et al. Coupled-cluster computations of atomic nuclei. *Rep Prog Phys*, 2014, 77: 096302
- Barbieri C, Carbone A. Self-consistent Green's Function Approaches. Cham: Springer International Publishing, 2017. 571–644
- Hergert H, Bogner S K, Morris T D, et al. The In-Medium Similarity Renormalization Group: a novel *ab initio* method for nuclei. *Phys Rep*, 2016, 621: 165–222
- Hu B, Jiang W, Miyagi T, et al. *Ab initio* predictions link the neutron skin of ²⁰⁸Pb to nuclear forces. *Nat Phys*, 2022, 18: 1196–1200
- 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
- Wu Q, Xu F. Hartree-Fock Gamow basis from realistic nuclear forces (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2018, 63: 2876–2882 [吴强, 许甫荣. 现实核力 Hartree-Fock Gamow 基矢计算. 科学通报, 2018, 63: 2876–2882]
- 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
- Yuan Q, Hu B, Li J, et al. *Ab initio* Gamow in-medium similarity renormalization group for open-shell nuclei (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2023, 68: 2648–2654 [袁琪, 胡柏山, 李健国, 等. 第一性原理 Gamow 介质相似重整化群理论计算开壳原子核. 科学通报, 2023, 68: 2648–2654]
- Hu B, Yuan Q, Fan S, et al. *Ab initio* in-medium similarity renormalization group (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2023, 68: 1016–1025 [胡柏山, 袁琪, 范思钦, 等. 第一性原理介质相似重整化群理论. 科学通报, 2023, 68: 1016–1025]
- Entem D R, Machleidt R. Accurate charge-dependent nucleon-nucleon potential at fourth order of chiral perturbation theory. *Phys Rev C*, 2003, 68: 041001
- Xu F. Can a pure neutron state of matter exist? *Sci Bull*, 2022, 67: 2487–2489
- Duer M, Aumann T, Gernhäuser R, et al. Observation of a correlated free four-neutron system. *Nature*, 2022, 606: 678–682
- Li J G, Michel N, Zuo W, et al. Resonances of $A = 4T = 1$ isospin triplet states within the *ab initio* no-core Gamow shell model. *Phys Rev C*, 2021, 104: 024319
- 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
- Ekström A, Jansen G R, Wendt K A, et al. Accurate nuclear radii and binding energies from a chiral interaction. *Phys Rev C*, 2015, 91: 051301
- Yuan Q, Fan S Q, Hu B S, et al. Deformed in-medium similarity renormalization group. *Phys Rev C*, 2022, 105: L061303
- Simonis J, Stroberg S R, Hebeler K, et al. Saturation with chiral interactions and consequences for finite nuclei. *Phys Rev C*, 2017, 96: 014303
- Cirigliano V, Dawid M, Dekens W, et al. New class of three-nucleon forces and their implications. *Phys Rev Lett*, 2025, 135: 022501
- Hebeler K, Bogner S K, Furnstahl R J, et al. Improved nuclear matter calculations from chiral low-momentum interactions. *Phys Rev C*, 2011, 83: 031301
- Xu Z C, Zhang S, Li J G, et al. Complex valence-space effective operators for observables: the Gamow-Teller transition. *Phys Rev C*, 2023, 108:

L031301

- 34 Xu F R, Zhao E G, Wyss R, et al. Enhanced stability of superheavy nuclei due to high-spin isomerism. [Phys Rev Lett](#), 2004, 92: 252501
- 35 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
- 36 Lu B N, Li N, Elhatisari S, et al. Perturbative quantum Monte Carlo method for nuclear physics. [Phys Rev Lett](#), 2022, 128: 242501
- 37 Curry R, Lynn J E, Schmidt K E, et al. Second-order perturbation theory in continuum quantum Monte Carlo calculations. [Phys Rev Res](#), 2023, 5: L042021
- 38 Yang C J, Ekström A, Forssén C, et al. Power counting in chiral effective field theory and nuclear binding. [Phys Rev C](#), 2021, 103: 054304
- 39 Hammer H W, König S, van Kolck U. Nuclear effective field theory: status and perspectives. [Rev Mod Phys](#), 2020, 92: 025004
- 40 van Kolck U. The problem of renormalization of chiral nuclear forces. [Front Phys](#), 2020, 8: 00079
- 41 König S, Griebhammer H W, Hammer H W, et al. Nuclear physics around the unitarity limit. [Phys Rev Lett](#), 2017, 118: 202501

Summary for “手征核力与核结构第一性原理计算研究进展”

Chiral nuclear forces and *ab initio* nuclear structure calculations

Rongzhe Hu¹, Jianguo Li^{1,2}, Qi Yuan^{1,2}, Zhicheng Xu^{1,3} & 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, China³ Key Laboratory of Nuclear Physics and Ion-beam Application (MOE), Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China

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

Understanding the microscopic interaction between nucleons is one of the primary goals of nuclear physics, connecting the phenomena of the atomic nucleus with the fundamental theory of the strong interaction, quantum chromodynamics (QCD). In recent decades, chiral effective field theory (χ EFT) has established itself as the theoretical foundation for this endeavor, providing a systematic and improvable framework to derive nuclear forces consistent with the symmetries of QCD. Coupled with advances in *ab initio* quantum many-body methods and computational power, this approach has extended its predictive capabilities far beyond the few-body systems to medium-mass and even heavy nuclei, covering both stable isotopes and exotic, weakly-bound nuclides near the drip lines.

This paper provides a systematic review of our recent progress in *ab initio* nuclear structure calculations driven by χ EFT, with a particular emphasis on theoretical developments tailored for nuclei where continuum effects are important. Traditional methods like the no-core shell model (NCSM) and the in-medium similarity renormalization group (IMSRG) often use a harmonic oscillator basis, which is fundamentally limited in describing the spatial extension and decay properties of weakly-bound and unbound systems. Our team has pioneered a series of potent quantum many-body methods utilizing the complex-momentum Berggren basis, which naturally incorporates continuum and resonance states through a generalized completeness relation. These include the no-core Gamow shell model (NCGSM) and the Gamow-IMSRG (G-IMSRG), successfully extending the *ab initio* map into regions where continuum effects are crucial.

A major achievement using NCGSM with the high-precision $N^3\text{LO}_{\text{EM}}$ interaction was the theoretical prediction of the elusive tetra-neutron resonance, an unbound system composed purely of neutrons, which was subsequently confirmed by experimental observation. Furthermore, NCGSM was successfully applied to $A=4$, $T=1$ isospin triplet, correctly describing their wide-resonance characteristics and the effects of isospin symmetry breaking.

For medium-mass nuclei, we introduced the deformed-IMSRG (D-IMSRG), employing a deformed Hartree-Fock basis to effectively capture static shape correlations, which is essential for studying the $N=20$ “island of inversion” region. Utilizing optimized chiral forces like $N^2\text{LO}_{\text{opt}}$ and $N^2\text{LO}_{\text{sat}}$, our calculations accurately reproduce the ground-state energies of Be, C, O, Ne, and Mg isotopes. However, a persistent challenge remains the systemic underprediction of charge radii across various *ab initio* methods and chiral forces—the “radius puzzle”. We demonstrated that the inclusion of three-nucleon forces (3NFs), as in the $N^2\text{LO}_{\text{sat}}$ interaction, yields a more spatially extended density distribution for halo nuclei like ^{22}C when properly treated with G-IMSRG, offering a better agreement with experimental radii and underscoring the vital role of 3NFs and the underlying fitting strategy. The importance of 3NFs was further confirmed in the description of high-spin isomerism, where the presence of a three-nucleon component was shown to be indispensable for correctly reproducing the spectra of nuclei like ^{53}Co and ^{53}Fe .

Looking ahead, the development of χ EFT and quantum many-body methods remains a highly active frontier. Future efforts include pushing the chiral expansion to higher orders (e.g., $N^4\text{LO}$) to reduce systematic errors and rigorously test convergence, refining global fitting strategies to better constrain 3NFs, and further investigating electroweak current operators to resolve issues like the radius puzzle. Crucially, while most current many-body calculations non-perturbatively solve the Schrödinger equation, an exciting and highly challenging frontier involves employing perturbative many-body methods with chiral forces. This alternative approach holds the promise of providing fresh insights into the long-standing discrepancies of non-perturbative frameworks and serves as an independent, valuable avenue for rigorously testing the consistency and predictive power of χ EFT itself. The synergy between advancing χ EFT, robust quantum many-body methods, and refined structural observables will continue to deepen our fundamental understanding of nuclear interaction.

chiral nuclear force, *ab initio*, resonance, continuum, electromagnetic transitiondoi: [10.1360/CSB-2025-5445](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5445)