



第一性原理计算研究镜像原子核同位旋对称性破缺

王新鹏 李红蕙 李健国

Ab Initio Calculations for Isospin Symmetry Breaking in Mirror Nuclei

WANG Xinpeng, LI Honghui, LI Jianguo

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC34>

引用格式:

王新鹏, 李红蕙, 李健国. 第一性原理计算研究镜像原子核同位旋对称性破缺[J]. *原子核物理评论*, 2024, 41(1):233–238. doi: 10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC34

WANG Xinpeng, LI Honghui, LI Jianguo. *Ab Initio* Calculations for Isospin Symmetry Breaking in Mirror Nuclei[J]. *Nuclear Physics Review*, 2024, 41(1):233–238. doi: 10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC34

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

第一性原理无核芯壳模型计算原子核谱因子

Ab initio no-core Shell Model for Nuclear Spectroscopic Factor

原子核物理评论. 2022, 39(3): 286–295 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.39.2022042>

强相互作用系统的对称性及其破缺

Symmetries and Their Breaking of Strong Interaction System

原子核物理评论. 2020, 37(3): 329–363 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2019CNPC77>

第一性原理在热中子散射截面计算中的应用

Application of First Principles in Calculation of Thermal Neutron Scattering Cross Section

原子核物理评论. 2023, 40(4): 643–650 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.40.2022115>

应用光核反应计算 μ 原子中的核极化效应

Application of Photonuclear Reaction to Evaluating Nuclear Polarizability in Muonic Atoms

原子核物理评论. 2020, 37(3): 605–610 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2019CNPC56>

重离子碰撞中同位旋自由度输运和对称能约束

Transport of Isospin Degree of Freedom in Heavy Ion Reactions and the Constraint of Symmetry Energy

原子核物理评论. 2020, 37(3): 249–259 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2019CNPC63>

RE₂Ti₂O₇ (RE=Gd, Y, Ho, Er) 的结构、机械性能及热学性质的第一性原理研究(英文)

First-principles Study of Structural, Mechanical and Thermal Properties of RE₂Ti₂O₇ (RE=Gd, Y, Ho, Er)

原子核物理评论. 2019, 36(2): 248–255 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.36.02.248>

文章编号: 1007-4627(2024)01-0233-06

第一性原理计算研究镜像原子核同位旋对称性破缺

王新鹏^{1,2}, 李红蕙^{1,2,†}, 李健国^{1,2,†}

(1. 中国科学院近代物理研究所精细核谱学重点实验室, 兰州 730000;
2. 中国科学院大学核科学与技术学院, 北京 100049)

摘要: 同位旋对称性破缺是一个原子核性质的重要物理现象, 为核结构、核反应以及核天体物理学的研究提供关键信息。镜像能级差异是一个研究同位旋对称性破缺的主要观测量, 研究这种能级差异能够清晰地反映出同位旋对称性破缺, 对深入认识核力的性质有重要意义。随着超级计算机计算能力与原子核量子多体方法的不断发展, 第一性原理方法在原子核结构计算中已取得巨大成功。本研究基于手征有效场论的两体与三体核力, 利用第一性原理价空间介子重整化群方法, 计算了²⁵Si与²⁵Na这对镜像核的低激发能谱。采用的核力很好地考虑了电荷对称性破缺和电荷独立性破缺效应, 并在量子多体哈密顿量中考虑库仑力。计算结果显示三体力对于原子核激发态的描述非常关键。基于激发态结果, 计算了镜像原子核的镜像能级差异与对应能级的粒子数占据情况。结果表明, 较大的镜像能级差异主要由丰质子原子核弱束缚的 $1s_{1/2}$ 轨道的占据数引起。

关键词: 同位旋对称性破缺; 镜像核能级差异; 第一性原理计算

中图分类号: O571.53

文献标志码: A

DOI: 10.11804/NuclPhysRev.41.2023CNPC34

0 引言

核力的同位旋对称是核物理中的一个基本假设^[1], 即中子-中子相互作用(V_{nn})、质子-质子相互作用(V_{pp})与 $T=1$ 通道的质子-中子相互作用 $[V_{pn}(T=1)]$ 近似相等。同位旋这一概念, 最早由物理学家Heisenberg^[1]在1932年提出, 即将质子和中子视为同一种粒子(核子)的两种状态, 质子与中子对应的量子数为 $1/2$; 为了区分质子和中子, 一般规定质子与中子的同位旋第三分量分别为 $t_z = -1/2$ 与 $t_z = +1/2$ ^[2]。在核力的同位旋对称以及不考虑库仑力的基础上, 对于一对镜像原子核, 即其具有交换的质子数和中子数, 它们的能级结构是相同的。然而, 核子-核子散射实验已经表明 V_{nn} 比 V_{pp} 约强1%, 而 $V_{pn}(T=1)$ 大约比 V_{pp} 与 V_{nn} 平均值约强2.5%^[3], 即核力中存在微弱的同位旋对称性破缺。考虑到库仑相互作用及核力的电荷相关性^[4-5], 在原子核中存在同位旋对称性破缺现象。研究同位旋对称性破缺对检验核模型, 理解原子核内的基本相互作用以及核结构提供了重要途径^[4-9]。镜像能级差异(Mirror Energy

Difference, MED)是研究同位旋对称性破缺的重要观测量。镜像能级差异定义为^[4, 10]

$$MED(A, T) = E_{ex}(T, T_{z_+}) - E_{ex}(T, T_{z_-}), \quad (1)$$

其中: A 为核子数; T 为总同位旋量子数; E_{ex} 为激发态能量; T_{z_+} 与 T_{z_-} 分别指的是镜像核中丰质子核和丰中子核的同位旋投影; $MED(A, T)$ 与库仑力及核力的电荷相关部分有关。镜像能级差异大约是几十或几百keV^[4, 11]; 当丰质子侧原子核靠近质子滴线时, 丰质子原子核呈现出弱束缚或非束缚特性, 而其镜像核仍保持着深束缚状态。在这种情况下, 镜像核展现出明显的同位旋对称性破缺, 其具有较大的MED, 这被称为托马斯-埃尔曼位移(Thomas-Ehrman Shift, TES)^[12-13]。随着探测器以及加速器技术的发展, 实验测量发现质子滴线附近镜像核中存在较大的MED, 一个典型的例子是¹⁹O与¹⁹Na的 $1/2_1^+$ 态^[14-15]。另外, 理论研究表明核力的电荷依赖性对于同位旋对称性破缺也起着重要的作用。MED的研究为解释同位旋对称性破缺的起源提供了有效途径。

目前已经发展了各种理论模型来计算镜像核的MED,

收稿日期: 2023-07-06; 修改日期: 2024-02-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(12205340, 12175281, 11975282); 中国科学院B类先导科技专项培育项目(XDPB15); 甘肃省自然科学基金资助项目(22JR5RA123, 23JRRA614)

作者简介: 王新鹏(1997-), 男, 陕西商洛人, 硕士研究生, 从事原子核理论物理研究; E-mail: 15891717079@139.com

†通信作者: 李红蕙, E-mail: lihonghui20@mails.ucas.ac.cn; 李健国, E-mail: jianguo_li@impcas.ac.cn

如传统壳模型、平均场和第一性原理方法^[4, 9, 16–17]。其中, 传统壳模型在描述 sd 壳层核的结构和性质方面取得了显著的成功, 并已被广泛用于计算该区域内许多对镜像核的MED。此外, 平均场方法^[18–19], 如Skyrme-Hartree-Fock和相对论平均场模型, 也被广泛用于研究MED, 并成功地再现了镜像核的实验数据。然而, 这些模型在计算镜像能级差异时, 需要引入额外的参数, 并且, 这些参数需要通过实验数据进行拟合而得到^[16, 18, 20]。近年来, 第一性原理方法已经被广泛用于计算原子核性质。第一性原理计算采用现实核力, 现实核力可以很好地处理核力的电荷相关性, 没有引入额外的可调参数。基于第一性原理计算镜像原子核MED对我们理解同位旋对称性破缺现象提供了研究途径。本文利用第一性原理价空间介质相似重整化群方法(*ab initio* Valence-Space In-Medium Similarity Renormalization Group, VS-IMSRG)^[21–23]研究 sd 壳中 $^{25}\text{Si}/^{25}\text{Na}$ 镜像核中的MED, 库仑力和核力的电荷相关部分都被考虑在所采用的核多体哈密顿量中, 并且第一性原理计算中没有引入额外的可调参数。

本文中, 我们将首先介绍第一性原理价空间介质相似性重整化群方法(*ab initio* VS-IMSRG)。随后, 基于手征有效场论的两体与三体相互作用, 计算了 ^{25}Si 和 ^{25}Na 低激发能谱, 获得了镜像核的MED。并对计算结果与粒子数占据之间的联系进行了深入分析, 探讨了较大MED的产生机制, 即较大的MED与粒子数占据之间的联系。

1 理论框架

原子核是由质子和中子构成的 A 体系统, 其内禀的 A 体哈密顿量写为

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

其中: $\mathbf{p}_i$ 表示实验室系的核子动量; m 表示核子的质量; v^{NN} 和 v^{3N} 分别表示手征有效场论(χ EFT)中两体(NN)以及三体(3N)相互作用, 本研究使用了由1.8/2.0(EM)的NN+3N相互作用, 该相互作用能够系统地描述较轻原子核至 ^{132}Sn 的基态能量^[24–26]。对于1.8/2.0(EM)的NN+3N相互作用, 使用 $\lambda_{\text{SRG}} = 1.8 \text{ fm}^{-1}$ 作为相似性重整化群(SRG)演化^[27]来软化初始的次次次领头阶(N^3LO)核子-核子(NN)相互作用^[28], 相应的次次领头阶(N^2LO)三体(3N)相互作用选择 $\Lambda = 2.0 \text{ fm}^{-1}$ 作为动量截断尺度。为了进一步系统地分析核力的影响, 本研究还采用了 χ EFT NN+3N(lnl)以及NNLO_{sat}相互作用^[29–30]。

对于NN+3N(lnl)相互作用, 采用了一个较大的SRG演化参数($\lambda_{\text{SRG}} = 2.6 \text{ fm}^{-1}$)去软化两体核力, 并且不包含诱导的三体力。而对于NNLO_{sat}相互作用, 考虑拟合了 $A=25$ 以下原子核的结合能和电荷半径, 为电荷半径的描述提供了大幅改善。短程低能常数 c_D 和 c_E 经过优化以更好地描述氦核的结合能和 ^4He 的半径^[31]。在手征有效场论(EFT)的框架内, 通过 π 介子交换、 π 介子-核子耦合常数、核子质量分裂、电磁修正、接触项的低能常数等, 我们可以考虑核力的电荷对称性和电荷独立性破缺等因素。更全面和系统的研究可以参考文献^[3, 32]。并且在使用哈密顿量中也考虑了质子之间的库仑相互作用。在实际计算过程中, 我们利用谐振子基矢, 采用 $\hbar\omega = 16 \text{ MeV}$, 并选择了15个谐振子主壳层(即 $e = 2n + l \leq e_{\text{max}} = 14$)的空间计算原子核性质, 同时三体相互作用部分也限制在 $e_{3\text{max}} = 2n_a + 2n_b + 2n_c + l_a + l_b + l_c \leq 14$ 空间内。

为了方便计算, 可以将方程(2)中的哈密顿量重新描写为对单个参考态或构型混合参考态 $|\Phi\rangle$ 的正规排序^[21]:

$$H = E + \sum_{ij} f_{ij} : a_i^\dagger a_j : + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k : + \frac{1}{36} \sum_{ijklmn} W_{ijklmn} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^\dagger a_n a_m a_l :, \quad (3)$$

其中 E , f_{ij} , Γ_{ijkl} 和 W_{ijklmn} 分别代表正规排序后哈密顿量的零体, 一体, 两体和三体部分。并且式中产生和湮灭算符遵循 $\langle\Phi| : a_i^\dagger \cdots a_j : |\Phi\rangle = 0$ 。实际上, 正规排序的零阶、一阶和二阶部分, 即方程(3)中对应的 E 、 f_{ij} 和 Γ_{ijkl} , 包含了 v^{3N} 的贡献。因此, 我们可以忽略哈密顿量中计算量较大的正规排序的三阶部分 W_{ijklmn} ^[33–34]。第一性原理VS-IMSRG方法计算中, 将单粒子希尔伯特空间分为核芯空间、价空间以及外部空间, 通过一系列相似么正变化, 将低能量自由度与高能量激发态进行脱耦合。通过这种方法可以构建价空间的有效哈密顿量, 并在价空间中进行精确对角化, 为核结构提供第一性原理(*ab initio*)的描述。第一性原理价空间介质相似重整化群方法(*ab initio* VS-IMSRG)主要就是构建一个价空间的有效哈密顿量^[21–22], 其表示为

$$H_{\text{eff}}(s) = U^\dagger(s) H(0) U(s), \quad (4)$$

其中 $U(s)$ 为么正变换算符。进一步可以通过如下的流方程来实现脱耦:

$$\frac{dH(s)}{ds} = [\eta(s), H(s)], \quad (5)$$

其中反厄米算符 $\eta(s)$ 定义为

$$\eta(s) \equiv \frac{dU(s)}{ds} U^\dagger(s) = -\eta^\dagger(s). \quad (6)$$

手征有效场论的高精度核力和精确的第一性原理 VS-IMSRG 核多体方法相结合, 为研究轻核以及中质量原子核的核结构计算提供了一个有力的工具^[21, 35]。在本研究中, 我们使用了文献^[35]的 VS-IMSRG 代码, 结合构型混合正规排序技术(ENO)^[21, 35]生成了价空间的有效哈密顿量。随后, 利用壳模型 kshell 代码^[36]对所得到的有效哈密顿量进行了精确的对角化计算。在实际的计算中, 我们以¹⁶O 为核芯, 对价质子与价中子均采用 *sd* 壳价空间, 计算了²⁵Si 和²⁵Na 镜像原子核的性质和镜像能级差异, 并进一步讨论了镜像能级差异背后的物理机制, 特别关注了托马斯-埃尔曼位移(TES)现象。

2 结果分析与讨论

较大的镜像能级差异主要是由于价质子占据弱束缚或者非束缚的 *s* 和 *p* 轨道导致的。在 *sd* 壳的一对镜像原子核中, 丰质子侧原子核接近质子滴线, 是弱束缚或者不束缚原子核, 而对应的丰中子原子核总处于深束缚状态。另外, 由于 *s* 轨道没有离心势垒, 丰质子原子核的价质子接近粒子发射阈值时, 它们的波函数在坐标空间中具有较延展的分布, 即质子 $1s_{1/2}$ 轨道的弱束缚效应。然而, 对应的丰中子原子核中 *s* 轨道深束缚, 空间延展性较丰质子原子核弱, 这也导致丰质子原子核的激发态能量相对于丰中子原子核有较大的向下平移, 也称为托马斯-埃尔曼位移, 导致镜像原子核产生较大的镜像能级差异。例如, 镜像核¹⁸Ne/¹⁸O 的 3_1^+ ^[15, 37] 与²²Al/²²F 的 1_1^+ 态^[38] 都具有较大的镜像能级差异。另外, 质子 $1s_{1/2}$ 轨道的弱束缚效应也引起¹⁶F 和¹⁶N 镜像核中基态反转的奇特现象^[39–40]。在 *sd* 壳原子核中, 托马斯-埃

尔曼位移(TES)主要受到 *s* 波的影响。第一性原理价空间介质相似重整化群方法可以很好地考虑导致同位旋对称性破缺的主要因素, 如核力中的同位旋不守恒部分、库仑力以及弱束缚效应等。我们基于第一性原理 VS-IMSRG 方法对²⁵Si/²⁵Na 进行计算, 研究²⁵Si/²⁵Na 中的同位旋对称性破缺现象与内在机制。

基于第一性原理价空间介质相似重整化群方法(*ab initio* VS-IMSRG), 我们对²⁵Si 和²⁵Na 镜像核低激发谱进行系统的计算, 计算中我们分别使用了手征有效场论两体核力(NN)和手征有效场论 NN+3N(EM1.8/2.0)相互作用, NN+3N(lnl) 以及 NNLO_{sat} 现实核力。四种核力的计算结果如图 1 中所示, 并将计算结果与实验结果相比较。从图中可以看到, 当计算中只考虑两体力(NN)时, 对²⁵Si 和²⁵Na 镜像核的低激发态的描述较差; 尤其是对基态的计算与实验结果不符合, 两体力计算得到的基态是 $1/2^+$, 而实验给出的基态为 $5/2^+$ 。当计算中引入三体力时, 即使用两体加三体力计算, 三种核力的计算结果对于²⁵Si 和²⁵Na 镜像核低激发态能级的描述都比较准确, 得到了与实验值符合较好的宇称和能级, 给出的基态结构与实验结果也相同, 并且低激发态的计算结果也与实验比较符合。类似的情况也在 *sd* 壳的其他镜像核中存在。第一性原理计算结果显示三体力对于描述原子核低激发态性质非常关键。第一性原理 VS-IMSRG 方法采用两体加三体现实相互作用(NN+3N)能够较好地符合实验数据。因此, 在随后的研究分析中, 我们都采用包含三体力的相互作用。另外, 通过比较²⁵Si 和²⁵Na 镜像核, 理论与实验结果均给出, 相同角动量的态, 大部分²⁵Si 中的激发态能量总是低于²⁵Na 的对应的激发能, 以及²⁵Si 和²⁵Na 中存在较多具有较大的镜像能级差异的态, 如 $1/2_1^+$ 与 $7/2_1^+$ 态等。

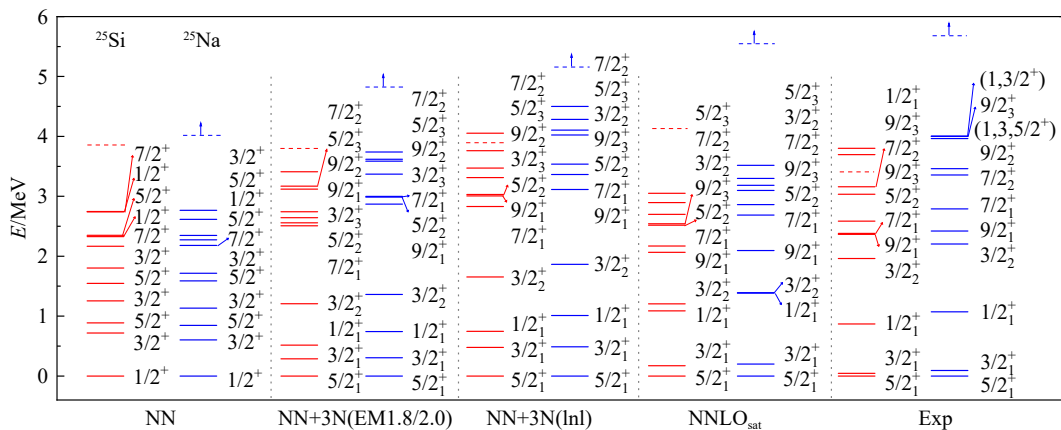


图 1 第一性原理价空间介质相似重整化群方法对镜像核²⁵Si 和²⁵Na 的能谱进行计算(在线彩图)

计算中分别使用了手征有效场论两体和两体加三体 NN+3N(EM1.8/2.0)、NN+3N(lnl) 以及 NNLO_{sat} 现实核力, 并将计算结果与实验数据进行对比。²⁵Si 和²⁵Na 的单质子和单中子分离能分别用带箭头的虚线表示。

为了进一步分析镜像核的同位旋对称性破缺,我们还分别使用了上述三种现实核力分别计算了 ^{25}Si 和 ^{25}Na 的镜像能级差异,并将计算结果与实验数据进行对比,如图2中所示。从图中清晰可见,在低激发态中,我们的计算结果与已有的实验数据较吻合。尽管在较高激发态中存在一些偏差,但最大的偏差值不超过200 keV。另外,我们的计算还预言 $3/2_3^+$ 与 $3/2_4^+$ 态具有较大的镜像能级差异,显示出较明显的同位旋对称性破缺现象。另外,我们的第一性原理计算也能很好地描述镜像能级差异随角动量的演化。

此外,我们利用第一性原理价空间介质相似重整化群方法,分别计算了丰质子核 ^{25}Si 和丰中子核 ^{25}Na 每个低激发态的价质子和价中子的平均占据数,如图2所示。三种相互作用计算的价核子平均占据数结果一致,所以在图2中我们只展示了NN+3N(EM1.8/2.0)的计算结果。对于镜像态,结果显示 ^{25}Si 的价质子占据数与

^{25}Na 的价中子占据数非常相近。在 ^{25}Si 和 ^{25}Na 的基态中,价核子主要占据 $0d_{5/2}$ 轨道。对于 $3/2_1^+$ 和 $9/2_2^+$ 激发态,其价核子占据数接近 $5/2_1^+$ 基态的占据数,因此这两个激发态 $3/2_1^+$ 和 $9/2_2^+$ 的镜像能级差值较小。相比之下, $1/2_1^+$ 激发态在 $1s_{1/2}$ 单粒子轨道上的占据数略大,因此具有明显的镜像能级差异。特别是对于 $7/2_1^+$ 态,其 $1s_{1/2}$ 轨道的占据数更大时,对应着一个较大的镜像能级差。基于自洽构建的有效相互作用计算的有效单粒子能,结果显示在 ^{25}Si 中,质子的 $1s_{1/2}$ 单粒子态是弱束缚的,并且由于 s 波缺少离心势垒,所以质子的 $1s_{1/2}$ 轨道的波函数比其对应的丰中子原子核 ^{25}Na 中的深束缚中子 $1s_{1/2}$ 波函数更加延展。 ^{25}Si 中弱束缚的 $\pi 1s_{1/2}$ 单粒子态与其他态的耦合更强,它相较于 ^{25}Na 中深束缚的中子提供了更强的结合能。因此, ^{25}Si 中的能级较低,导致了负的较大的镜像能级差异。此外, $3/2_3^+$ 激发态在 $1s_{1/2}$ 轨道上的占据数不大,但其具有较大的 $0d_{3/2}$ 轨道的占据,因此也表现出较大的镜像能级差。类似的情况也出现在 $3/2_4^+$ 激发态中。这主要是因为镜像核中,基于自洽构建的有效相互作用计算的有效单粒子能,我们可以得到 $0d_{3/2}$ 单粒子轨道在丰质子核中是不束缚的,而在丰中子核中是弱束缚的,因此较大的 $0d_{3/2}$ 轨道的占据也会导致较大的镜像能级差异。

对于较大的镜像能级差异,可以通过直接考虑 s 或 p 波的外部延展性和组态混合自洽计算这两种可能的原因来解释。价质子占据弱束缚或不束缚的 s 或 p 波时,由于单粒子波函数较大的延展性导致的较大的MED。例如托马斯-埃尔曼位移(TES)、中子皮和晕结构。这种思想也被应用于传统壳模型计算中,由于 s 或 p 波的波函数延展特性,通过直接调节质子-质子相互作用重现实验结果,从而考虑弱束缚与不束缚特性,计算滴线原子核的镜像能级差异^[38,41]。另外在实际计算中,考虑了多条 s 或 p 分波的单粒子轨道,通过组态混合的形式自洽地包含了弱束缚效应,这种方法也应用于Gamow壳模型中。Gamow壳模型也成功应用于解释滴线原子核的镜像核同位旋对称性破缺,例如:引入扩展的 $1s_{1/2}$ 单粒子波函数可以解释 ^{16}F 和 ^{16}N 的基态反转^[40]。然而,Gamow壳模型计算量非常大,远远超过传统壳模型计算,对于系统研究 sd 壳原子核的镜像核能级差异难度较大。本文的计算中,我们使用多个谐振子壳层空间的第一性原理介质相似重整化群方法,采用了 $N_{\text{max}}=14$ 的截断参数。对于 s 波,在实际的模型空间中包含8条 $1s_{1/2}$ 单粒子轨道,从而考虑了弱束缚与不束缚特性。通过前期的研究结果,这种计算方法可以部分描述弱束缚和非束缚多体态的扩展渐近行为,同时在VS-IMSRG

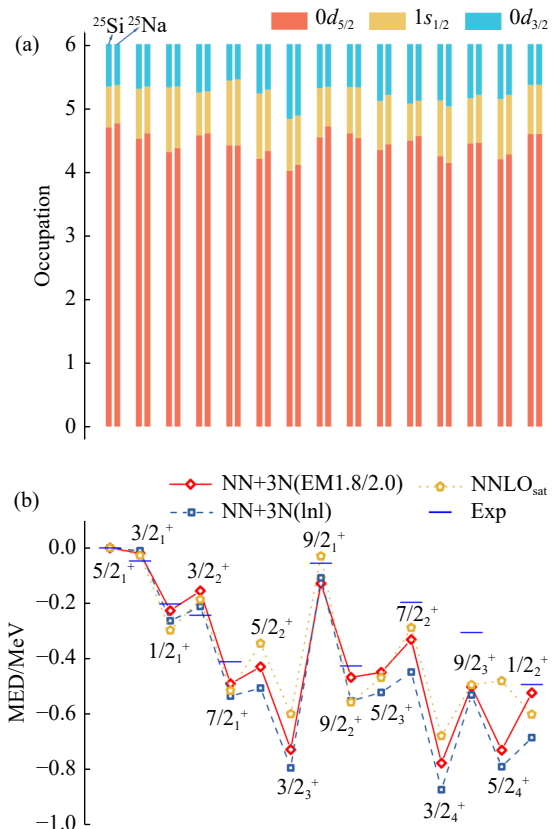


图2 (a) 利用第一性原理价空间介质相似重整化群方法(*ab initio* VS-IMSRG), 采用考虑了两体加三体相互作用(NN+3N(EM1.8/2.0)), 计算了 ^{25}Si 的价质子和 ^{25}Na 的价中子的平均粒子数占据情况; (b) 利用第一性原理价空间介质相似重整化群方法, 分别采用考虑了两体加三体相互作用(NN+3N(EM1.8/2.0)、NN+3N(lnl)以及NNLO_{sat}核力, 对 ^{25}Si 和 ^{25}Na 低激发态镜像能级差异(MED)进行了计算, 并且将计算结果与实验数据进行了比较(在线彩图)

计算中也能很好地描述 sd 壳滴线原子核的镜像能级差异。从本文的计算中也可以看到，第一性原理介质相似重整化群计算也可以很好地描述 $^{25}\text{Si}/^{25}\text{Na}$ 的镜像能级差异。

3 总结

同位旋对称性破缺提供了关于核结构的重要信息。通过研究同位旋对称性破缺，我们可以深入研究核结构以及核子间的相互作用，从而深入理解原子核的性质。本文采用手征两体加三体现实核力相互作用，将电荷对称性破缺、电荷独立性破缺和库仑相互作用考虑在内；基于第一性原理价空间介质相似重整化群方法，研究了镜像原子核 ^{25}Si 和 ^{25}Na 的能谱及镜像能级差异，并分析了同位旋对称性破缺的起因。首先，我们采用第一性原理介质相似重整化群方法，分别考虑了两体和两体加三体相互作用，计算了 ^{25}Si 和 ^{25}Na 的能谱。从 ^{25}Si 和 ^{25}Na 的低激发谱的价空间介质相似重整化群方法计算结果可以看出，三体力对能谱的研究起了重要作用。我们还讨论了镜像核 ^{25}Si 和 ^{25}Na 的镜像能级差异，通过分析弱束缚和非束缚的单粒子轨道的占据来解释较大的镜像能级差异，尤其是 $1s_{1/2}$ 轨道的占据，解释了镜像能级差异大的原因主要是价核子占据弱束缚或不束缚的 s 轨道导致。总的来说，通过使用第一性原理价空间介质相似重整化群方法，我们能够很好地描述同位旋对称性破缺现象。然而，为了更精确地描述核结构，仍需要考虑更精确的核力和更先进的多体处理方法，以解决计算结果与实验数据的微小误差。

参考文献:

- [1] HEISENBERG W. *Zeitschrift für Physik*, 1932, 77: 1.
- [2] YAJZEY R, BENTLEY M, SIMPSON E, et al. *Phys Lett B*, 2021, 823: 136757.
- [3] MACHLEIDT R, ENTEM D. *Phys Rep*, 2011, 503(1): 1.
- [4] ZUKER A P, LENZI S M, MARTÍNEZ-PINEDO G, et al. *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 142502.
- [5] KANEKO K, SUN Y, MIZUSAKI T, et al. *Phys Lett B*, 2017, 773: 521.
- [6] EKMAN J, RUDOLPH D, FAHLANDER C, et al. *Phys Rev Lett*, 2004, 92: 132502.
- [7] BENTLEY M A, CHANDLER C, TAYLOR M J, et al. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 132501.
- [8] GADEA A, LENZI S M, LUNARDI S, et al. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 152501.
- [9] KANEKO K, SUN Y, MIZUSAKI T, et al. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 172505.
- [10] KANEKO K, SUN Y, MIZUSAKI T, et al. *Phys Rev C*, 2014, 89: 031302.
- [11] MILLER G A, OPPER A K, STEPHENSON E J. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 2006, 56(1): 253.
- [12] BOSO A, LENZI S M, RECCHIA F, et al. *Phys Rev Lett*, 2018, 121: 032502.
- [13] EHRMAN J B. *Phys Rev*, 1951, 81: 412.
- [14] ANGULO C, TABACARU G, COUDER M, et al. *Phys Rev C*, 2003, 67: 014308.
- [15] ZHANG S, MA Y, LI J, et al. *Phys Lett B*, 2022, 827: 136958.
- [16] BENTLEY M, LENZI S. *Prog Part Nucl Phys*, 2007, 59(2): 497.
- [17] LAM Y H, SMIRNOVA N A, CAURIER E. *Phys Rev C*, 2013, 87: 054304.
- [18] BĄCZYK P, DOBACZEWSKI J, KONIECZKA M, et al. *Phys Lett B*, 2018, 778: 178.
- [19] LLEWELLYN R D O, BENTLEY M A, WADSWORTH R, et al. *Phys Rev Lett*, 2020, 124: 152501.
- [20] UTHAYAKUMAAR S, BENTLEY M A, SIMPSON E C, et al. *Phys Rev C*, 2022, 106: 024327.
- [21] STROBERG S R, CALCI A, HERGERT H, et al. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 032502.
- [22] TSUKIYAMA K, BOGNER S K, SCHWENK A. *Phys Rev C*, 2012, 85: 061304.
- [23] TSUKIYAMA K, BOGNER S K, SCHWENK A. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 222502.
- [24] STROBERG S R, HOLT J D, SCHWENK A, et al. *Phys Rev Lett*, 2021, 126: 022501.
- [25] MORRIS T D, SIMONIS J, STROBERG S R, et al. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 152503.
- [26] MIYAGI T, STROBERG S R, NAVRÁTIL P, et al. *Phys Rev C*, 2022, 105: 014302.
- [27] BOGNER S K, FURNSTAHL R J, PERRY R J. *Phys Rev C*, 2007, 75: 061001.
- [28] ENTEM D R, MACHLEIDT R. *Phys Rev C*, 2003, 68: 041001(R).
- [29] SOMÁ V, NAVRÁTIL P, RAIMONDI F, et al. *Phys Rev C*, 2020, 101: 014318.
- [30] EKSTRÖM A, JANSEN G R, WENDT K A, et al. *Phys Rev C*, 2015, 91: 051301.
- [31] HEBELER K, BOGNER S K, FURNSTAHL R J, et al. *Phys Rev C*, 2011, 83: 031301(R).
- [32] EPELBAUM E, MEIBNER U G. *Phys Rev C*, 2005, 72: 044001.
- [33] HERGERT H, BOGNER S, MORRIS T, et al. *Phys Rep*, 2016, 621: 165.
- [34] STROBERG S R, HERGERT H, BOGNER S K, et al. *Ann Rev Nucl Part Sci*, 2019, 69(1): 307.
- [35] [EB/OL]. [2023-06-03]. <https://github.com/ragnarstroberg/imsrg>
- [36] SHIMIZU N, MIZUSAKI T, UTSUNO Y, et al. *Computer Physics Communications*, 2019, 244: 372.
- [37] CHIPPS K A, BARDAYAN D W, BLACKMON J C, et al. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 152502.
- [38] LEE J, XU X X, KANEKO K, et al. *Phys Rev Lett*, 2020, 125: 192503.
- [39] STEFAN I, DE OLIVEIRA SANTOS F, SORLIN O, et al. *Phys Rev C*, 2014, 90: 014307.
- [40] MICHEL N, LI J G, RU L H, et al. *Phys Rev C*, 2022, 106: L011301.
- [41] YUAN C, QI C, XU F, et al. *Phys Rev C*, 2014, 89: 044327.

Ab Initio Calculations for Isospin Symmetry Breaking in Mirror Nuclei

WANG Xinpeng^{1,2}, LI Honghui^{1,2,†}, LI Jianguo^{1,2,†}

(1. CAS Key Laboratory of High Precision Nuclear Spectroscopy, Institute of Modern Physics,
Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China;

2. School of Nuclear Science and Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Isospin symmetry breaking is essential to exploring atomic nuclear properties, offering vital insights that further our understanding of nuclear structure, reactions, and astrophysics. Mirror energy differences, a primary observational quantity in the study of isospin symmetry breaking, allow for a clear reflection of this phenomenon, which is significantly meaningful in comprehending the properties of nuclear forces. In light of the remarkable progress in supercomputing capabilities and quantum many-body techniques in atomic nuclei, *ab initio* calculations have achieved great success in nuclear systems. In this study, using the chiral effective field theory two-body and three-body forces, we employed the *ab initio* valence-space in-medium similarity renormalization group method to calculate the low-energy excited states of the mirror nuclei ^{25}Si and ^{25}Na . The nuclear forces adopted consider both charge symmetry breaking and charge independence breaking effects well, and the Coulomb force is also included in the quantum many-body Hamiltonian. The results show that the three-body forces are crucial in describing the excited states of nuclei. Based on the results of the excited states, we calculated the mirror energy differences and corresponding occupations of states in mirror nuclei. The results suggest that the larger mirror energy differences are primarily caused by occupying the weakly bound $1s_{1/2}$ orbit in proton-rich nuclei.

Key words: isospin symmetry breaking; mirror energy difference; *ab initio* calculation

Received date: 06 Jul. 2023; Revised date: 08 Feb. 2024

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (12205340, 12175281, 11975282); Key Research Program of Chinese Academy of Sciences (XDPB15); Gansu Natural Science Foundation (22JR5RA123, 23JRRA614)

† Corresponding author: LI Honghui, E-mail: lihonghui20@mails.ucas.ac.cn; LI Jianguo, E-mail: jianguo_li@impcas.ac.cn