

文章编号: 1007-4627(2017)03-0344-07

# Hartree-Fock 基矢下第一性原理的多体微扰理论计算

胡柏山, 许甫荣<sup>†</sup>

(北京大学物理学院, 北京 100871)

**摘要:** 从现实核力出发(手征有效场论  $N^3\text{LO}$ ), 应用多体微扰理论对一些双幻核进行计算。借助相似重整化群理论对手征有效场论核力进行“软化”处理。在 Hartree-Fock 基矢下对有效哈密顿量进行多体微扰理论计算, 对能量的修正计算到第三阶, 对波函数微扰修正到第二阶。利用反对称化的 Goldstone 图对波函数进行展开, 进而对单体密度进行修正, 从单体密度出发对原子核半径进行计算。与实验数据进行对比, 给出了很好的计算结果。

**关键词:** 第一性原理计算; 手征有效场论; 多体微扰理论; 相似重整化群;  $^4\text{He}$ 、 $^{16}\text{O}$  基态性质

**中图分类号:** O571.2    **文献标志码:** A    **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.34.03.344

## 1 引言

原子核结构领域一个最基本却很有挑战的课题是从现实核力出发计算有限核。现实核力是指可以很好的重复两核子低能散射相移以及氦核性质的核力。常见的现实核力有 CD-Bonn<sup>[1]</sup>, Nijmegen<sup>[2]</sup>, Argonne V18(AV18)<sup>[3]</sup>, INOY<sup>[4]</sup> 以及手征有效场论<sup>[5, 6]</sup>等等。它们都包含强的短程关联使得在进行核结构计算时收敛很慢。为了很好地处理短程关联和加速计算收敛速度, 这些现实核力常常需要借助重整化方法进行处理。最传统和古老的方法是将无穷阶梯图求和的 G-matrix 重整化方法<sup>[7-9]</sup>。最近, 许多新的重整化方法逐渐出现: 例如,  $V_{\text{low-}k}$ <sup>[10, 11]</sup>, 相似重整化群 (Similarity Renormalization Group, SRG)<sup>[12]</sup>, Okubo-Lee-Suzuki<sup>[13-18]</sup> 以及 Unitary Correlation Operator Method (UCOM)<sup>[19, 20]</sup>等等。这些重整化方法可以将现实核力进行“软化”, 同时保证在低能区所有的对称性及可观测量保持不变。它们本质上都是自由度的变化, 所以会产生多体力(引入三体力, induced three-body force)。我们的计算将忽略原初三体力和引入三体力。

第一性原理计算是指从量子力学第一性原理出发进行计算, 它避免了其他模型所带来的额外参数和对称性的破坏, 是揭示自然界物理规律不可或缺的手段, 也是量子力学发展的助推器。就核物理学科而言, 第一

性原理的计算要求体系的核力是现实核力。现如今核物理领域已经发展起来许多很好的多体理论, 例如: No-Core Shell Model (NCSM)<sup>[21-25]</sup>, Green's Function Monte Carlo (GFMC)<sup>[26-29]</sup> 以及 Coupled Cluster (CC)<sup>[30-32]</sup>等等。值得一提的是由于计算能力的限制, NCSM 和 GFMC 限制在轻核区( $\leq^{16}\text{O}$ ), CC 局限于双幻核附近。

重整化方法处理短程关联, Hartree-Fock (HF) 方法则主要是处理长程关联。然而, 传统的 HF 方法只考虑一个 Slater 行列式来构建基态组态, 所以它忽略了很多高阶关联。对于唯像的核力, 可以通过拟合实验数据将这些高阶效应包含在拟合参数当中, 进而给出与实验数据符合得很好的结果。对于第一性原理计算来说, 我们需要超越 HF 去包含在低阶 HF 中没有考虑到的中程关联。多体微扰理论 (many-body perturbation theory, MBPT) 是一种很有力的工具去包含这些丢失的关联<sup>[33-36]</sup>。经常使用的微扰有 Brillouin-Wigner (BW)<sup>[37, 38]</sup> 和 Rayleigh-Schrödinger (RS)<sup>[39, 40]</sup> 等方法。最近一些有关 MBPT 的工作显示出基于现实核力的 MBPT 在 HF 基矢下可以很好地提高计算结果的收敛性。这些相关的工作使用了不同的重整化方法 ( $V_{\text{low-}k}$ , OLS, UCOM), 并在低阶 MBPT 的计算中获得了很好的收敛结果<sup>[34-36]</sup>。我们的工作使用了相同的 MBPT 方法。不同于先前的方法, 我们的计算考虑了 MBPT 对原子核半径的修正。为了节约计算资源,

收稿日期: 2016-12-13; 修改日期: 2017-04-11

基金项目: 国家重大基础研究计划(973 计划)(2013CB834402); 国家自然科学基金资助项目(11235001, 11320101004, 11575007)

作者简介: 胡柏山(1989-), 男, 甘肃肃南裕固族自治县人, 在读博士, 从事原子核与粒子物理研究; E-mail: hubsh@pku.edu.cn

<sup>†</sup> 通信作者: 许甫荣, E-mail: frxu@pku.edu.cn

我们在角动量耦合表象下进行 MBPT 计算。对能量的修正计算到三阶, 对半径的修正考虑到二阶。

## 2 理论框架

### 2.1 有效哈密顿量

在本文工作中我们所使用  $A$  个核子系统的内禀哈密顿量如下:

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

这里的标记是通用标记。上式右边第一项是内禀的动能项,  $V_{NN,ij}$  是核子-核子相互作用 (包含了质子之间的库伦相互作用)。核子-核子相互作用采用手征有效场论  $N^3LO$ <sup>[5]</sup>。

为了软化手征  $N^3LO$  势的短程排斥和短程张量力成分, 我们使用相似重整化群方法对其进行软化处理。相似重整化群方法<sup>[12]</sup>通过连续的相似变换将核力中包含大动量转移的部分压低, 从而达到软化核力的效果, 得到的有效核力具有更好的微扰性。

### 2.2 角动量耦合表象下的球形 Hartree-Fock

得到有效相互作用后我们首先进行 HF 计算, 接着在 HF 基础上利用 MBPT 对 HF 进行修正。我们选取球形双幻核进行计算。球对称性保证 HF 单粒子轨道的轨道量子数 ( $l$ )、总的角动量量子数 ( $j$ ) 以及磁量子数 ( $m_j$ ) 的守恒。将 HF 单粒子基矢  $|\alpha\rangle$  在球形谐振子基矢  $|nljm_jm_t\rangle$  下展开:

$$|\alpha\rangle = |\nu l j m_j m_t\rangle = \sum_n D_n^{(\nu l j m_j m_t)} |nljm_jm_t\rangle, \quad (2)$$

这里的  $n$  和  $m_t$  分别表示径向量子数和同位旋的三分量量子数。  $A$  个核子体系的波函数可以在 HF 单粒子基矢的基础上用一个 Slater 行列式来表示。通过对 HF 能量期望值的变分, 我们可以得到 HF 单粒子本征方程,

$$\sum_{n_2} h_{n_1 n_2}^{(l j m_j m_t)} D_{n_2}^{(\nu l j m_j m_t)} = \varepsilon_{\nu l j m_j m_t} D_{n_1}^{(\nu l j m_j m_t)}, \quad (3)$$

这里  $\varepsilon_{\nu l j m_j m_t}$  表示 HF 单粒子本征能量,  $h_{n_1 n_2}^{(l j m_j m_t)}$  代表 HF 单粒子哈密顿量的矩阵元:

$$h_{n_1 n_2}^{(l j m_j m_t)} = \sum_{l' j' m'_j m'_t} \sum_{n'_1 n'_2} H_{n_1 n'_1 n'_2 n_2}^{(l j m_j m_t; l' j' m'_j m'_t)} \times \rho_{n'_1 n'_2}^{(l' j' m'_j m'_t)}, \quad (4)$$

这里  $H_{n_1 n'_1 n'_2 n_2}^{(l j m_j m_t; l' j' m'_j m'_t)}$  和  $\rho_{n'_1 n'_2}^{(l' j' m'_j m'_t)}$  分别是两体有效

相互作用的矩阵元和单体密度。它们可以被写成

$$H_{n_1 n'_1 n'_2 n_2}^{(l j m_j m_t; l' j' m'_j m'_t)} = \langle n_1 l j m_j m_t, n'_1 l' j' m'_j m'_t | \hat{H} | n_2 l j m_j m_t, n'_2 l' j' m'_j m'_t \rangle \quad (5)$$

和

$$\rho_{n'_1 n'_2}^{(l' j' m'_j m'_t)} = \sum_u \mathcal{N}^{(ul' j' m'_j m'_t)} D_{n'_1}^{*(ul' j' m'_j m'_t)} \times D_{n'_2}^{(ul' j' m'_j m'_t)}, \quad (6)$$

这里  $\mathcal{N}^{(\mu l' j' m'_j m'_t)}$  是 HF 单粒子轨道的占有数, 也即  $\mathcal{N}^{(\mu l' j' m'_j m'_t)} = 1$  (占有) 或 0 (不占有)。

实际计算中, 我们通过对下式进行对角化得到 HF 单粒子本征态:

$$\sum_{n_2} \left[ \sum_{n'_1 n'_2} \sum_{l' j' m'_j m'_t} H_{n_1 n'_1 n'_2 n_2}^{(l j m_j m_t; l' j' m'_j m'_t)} \rho_{n'_1 n'_2}^{(l' j' m'_j m'_t)} \right] \times D_{n_2}^{(\nu l j m_j m_t)} = \varepsilon_{\nu l j m_j m_t} D_{n_1}^{(\nu l j m_j m_t)}. \quad (7)$$

在球形闭壳的情况下, HF 单粒子本征能量不依赖于磁量子数  $m_j$ , 这将导致出现  $2j+1$  维简并。在这种情况下, 可以忽略  $m_j$  而重新写出  $D_n^{(\nu l j m_t)} = D_n^{(\nu l j m_j m_t)}$  以及  $\varepsilon_{\nu l j m_t} = \varepsilon_{\nu l j m_j m_t}$ 。此时我们可以简化公式 (7)<sup>[36]</sup>:

$$\sum_{n_2} \left[ \sum_{n'_1 n'_2} \sum_{l' j' m'_t} \sum_J \frac{2J+1}{(2j+1)(2j'+1)} \sqrt{1+\delta_{k_1 k'_1}} \times \sqrt{1+\delta_{k_2 k'_2}} \times \langle n_1 l j m_t, n'_1 l' j' m'_t; J | \hat{H} | n_2 l j m_t, n'_2 l' j' m'_t; J \rangle \times \rho_{n'_1 n'_2}^{(l' j' m'_t)} \right] D_{n_2}^{(\nu l j m_t)} = \varepsilon_{\nu l j m_t} D_{n_1}^{(\nu l j m_t)}, \quad (8)$$

这里  $\delta_{kk'}$  =  $\delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{jj'} \delta_{m_t m'_t}$  和单体密度矩阵,

$$\rho_{n'_1 n'_2}^{(l' j' m'_t)} = \sum_{\mu} O^{(\mu l' j' m'_t)} D_{n'_1}^{*(\mu l' j' m'_t)} D_{n'_2}^{(\mu l' j' m'_t)}, \quad (9)$$

这里  $O^{(\mu l' j' m'_t)}$  是轨道上占有的粒子数, 也即  $O^{(\mu l' j' m'_t)} = 2j'+1$  (占有) 或 0 (不占有)。

### 2.3 多体微扰理论

在计算中我们采用 Rayleigh-Schrödinger 微扰理论。首先将  $A$  个核子的哈密顿量 (公式 (1)) 分成零阶部分 ( $\hat{H}_0$ ) 和微扰部分 ( $\hat{V}$ ),

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + (\hat{H} - \hat{H}_0) = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (10)$$

此  $A$  核子体系的精确解是

$$\hat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (11)$$

对于零阶部分,

$$\hat{H}_0\Phi_n = E_n^{(0)}\Phi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

如果我们选取 HF 单粒子哈密顿量公式(4) 作为  $\hat{H}_0$ , 体系零阶能量  $E_0^{(0)}$  是对单粒子能量求和到费米面。对于体系的基态, Rayleigh-Schrödinger 微扰理论 (RSPT) 给出:

$$\chi = \Psi - \Phi_0, \quad (13)$$

$$\Delta E = E - E^{(0)}, \quad (14)$$

$$\Psi = \sum_{m=0}^{\infty} [\hat{R}_0(E^{(0)})(\hat{V} - \Delta E)]^m \Phi_0, \quad (15)$$

$$\Delta E = \sum_{m=0}^{\infty} \langle \Phi_0 | \hat{V} [\hat{R}_0(E^{(0)})(\hat{V} - \Delta E)]^m | \Phi_0 \rangle. \quad (16)$$

这里  $\hat{R}_0 = \sum_{i \neq 0} \frac{|\Phi_i\rangle\langle\Phi_i|}{E_0^{(0)} - E_i^{(0)}}$ 。在此过程中我们使用了中间归一化:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_n | \Phi_n \rangle &= 1, & \langle \chi_n | \Phi_n \rangle &= 0, \\ \langle \Psi_n | \Phi_n \rangle &= 1, & \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle &= 1 + \langle \chi_n | \chi_n \rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

将上式按微扰  $\hat{V}$  出现的数目重新排列:

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} + \dots \quad (18)$$

相应的一、二、三阶修正是:

$$E^{(1)} = \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle, \quad (19)$$

$$E^{(2)} = \langle \Phi_0 | \hat{V} \hat{R}_0 \hat{V} | \Phi_0 \rangle, \quad (20)$$

$$E^{(3)} = \langle \Phi_0 | \hat{V} \hat{R}_0 (\hat{V} - \langle \Phi_0 | \hat{V} | \Phi_0 \rangle) \hat{R}_0 \hat{V} | \Phi_0 \rangle. \quad (21)$$

相似地, 我们可以写出波函数的微扰展开:

$$\Psi = \Phi_0 + \Psi^{(1)} + \Psi^{(2)} + \dots \quad (22)$$

这里

$$\Psi^{(1)} = \hat{R}_0 \hat{V} | \Phi_0 \rangle \quad (23)$$

和

$$\Psi^{(2)} = \hat{R}_0 (\hat{V} - E^{(1)}) \hat{R}_0 \hat{V} | \Phi_0 \rangle \quad (24)$$

分别对应一阶和二阶波函数修正。为了简明, 我们用反对称的 Goldstone 图描述不同的微扰展开项。图 1 给出能量的修正, 图 2 给出对波函数的修正。

$$\langle R_{pp}^2 \rangle = \frac{\int r^2 \rho_p(\mathbf{r}) d^3r}{\int \rho_p(\mathbf{r}) d^3r}. \quad (25)$$

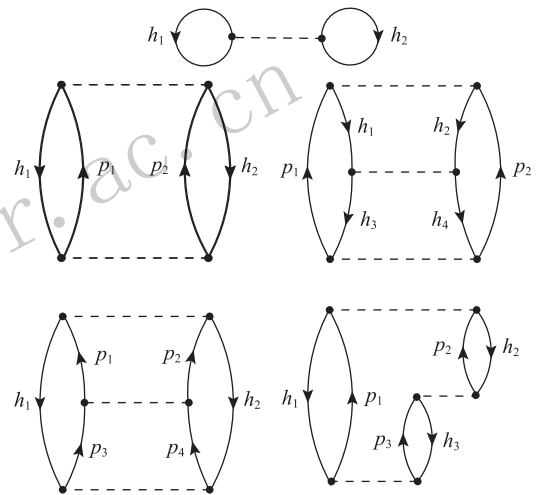


图 1 多体微扰理论中第一、二、三阶能量修正的反对称 Goldstone 图

本文工作与先前工作最大的不同之处在于我们考虑了微扰理论对波函数的修正, 并由此出发对原子核的半径计算进行修正。在我们的计算中利用单体局域密度

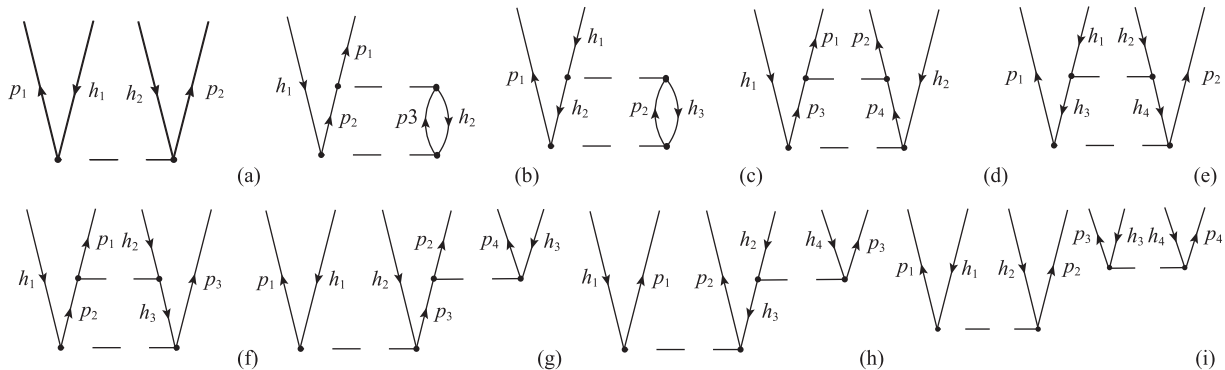


图 2 多体微扰理论中第一、二阶波函数修正的反对称 Goldstone 图  
(a) 是第一阶修正, (b)-(i) 是第二阶修正。

算符计算质子均方根半径, 所以我们将对波函数的修正考虑进单体局域密度算符的计算中。当我们将单体局域密度修正到二阶时, 我们仅需考虑图 2 中的(a)、(b)以及(c)。

$$\Psi = \Phi_0 + \Psi^{(1)} + \Psi_b^{(2)} + \Psi_c^{(2)}. \quad (26)$$

此时修正过的单体密度为

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \langle \Psi | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Psi \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle \langle \Psi^{(1)} | \Psi^{(1)} \rangle + \\ &2 \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_N | \Psi_b^{(2)} \rangle + 2 \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_N | \Psi_c^{(2)} \rangle + \langle \Psi^{(1)} | \hat{\rho}_N | \Psi^{(1)} \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{\rho}(\mathbf{r}) | \Phi_0 \rangle \langle \Psi^{(1)} | \Psi^{(1)} \rangle + \\ &2\rho_a + 2\rho_b + \rho_{c_1} + \rho_{c_2}, \end{aligned} \quad (27)$$

这里  $\rho_a = \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_N | \Psi_b^{(2)} \rangle$ ,  $\rho_b = \langle \Phi_0 | \hat{\rho}_N | \Psi_c^{(2)} \rangle$  以及  $\rho_{c_1} + \rho_{c_2} = \langle \Psi^{(1)} | \hat{\rho}_N | \Psi^{(1)} \rangle$ 。用图的语言在图 3 中表示出来。

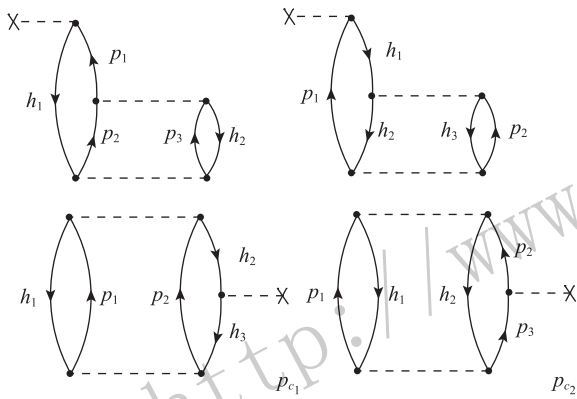


图 3 微扰理论中第二阶单体密度修正的反对称 Goldstone 图

对能量修正和单体密度修正的具体细节可以参考相关文献<sup>[41]</sup>。

由于我们采用了单粒子坐标而不是相对坐标, 计算得到的波函数  $\Psi(\mathbf{r})$  会包含质心运动, 由此将质心运动也带入了单体密度  $\rho$  之中。我们采用一种标准处理球形 HF 的修正方法<sup>[42]</sup> 移除虚的质心运动造成的半径  $r_{\text{COM}}$ ,

$$r_{\text{COM}} = \left[ r_{\text{SHF}}^2 - \frac{b^2}{A} \right]^{1/2} - r_{\text{SHF}}, \quad (28)$$

这里  $b^2 = \frac{\hbar}{m\Omega}$ ,  $A$  是核子数目。

### 3 结果及讨论

我们用 MBPT 对两个闭壳核 ( $^4\text{He}$  和  $^{16}\text{O}$ ) 进行了计算。利用相似重整化群方法对手征有效场论  $N^3\text{LO}$  进

行软化, 从而得到有效哈密顿量。此时得到的有效相互作用矩阵元是表达在谐振子基矢下。接着在谐振子表象下求解球形 HF, 得到球形 HF 后, 在 HF 基下进行多体微扰修正。我们在截断的模型空间中进行计算, 也即取  $N_{\text{shell}} = \max(2n + l + 1)$  个谐振子主壳。我们的计算显示取  $N_{\text{shell}}=11$  已经能得到很好的收敛结果。

图 3 给出了  $^4\text{He}$  基态能量在不同的模型空间 ( $N_{\text{shell}}$ ) 和流参数 ( $\lambda$ ) 下随谐振子参数  $\hbar\Omega$  变化的 MBPT 计算结果。可以看到谐振子大壳至少取  $N_{\text{shell}} = 11$  时计算结果对模型空间的依赖变得很小, 此时计算对谐振子参数  $\hbar\Omega$  的依赖也变得很小。这种变化趋势与 NCSM<sup>[45, 46]</sup> 的计算结果很相似。当流参数  $\lambda = 3.0 \text{ fm}^{-1}$  时 MBPT 随阶数增加没有快的收敛性, 这与在此大的流参数下有效相互作用基本与起始的相互作用很接近, 有较强的短程关联导致收敛性很差。Jurgenson 等研究了  $\hbar\Omega = 36 \text{ MeV}$  时  $^4\text{He}$  的基态性质随流参数  $\lambda$  的演化。他们发现  $\lambda \approx 2.0 \text{ fm}^{-1}$  时只用有效的两体力(忽略三体力) 就可以很好地重复实验数据。表 1 给出  $\lambda=2.0 \text{ fm}^{-1}$ ,  $\hbar\Omega=35 \text{ MeV}$  时 MBPT 计算结果。可以看到  $E^{(2)}/E^{(1)}=0.2327$ ,  $E^{(3)}/E^{(2)}=0.1767$ , 逐阶展开的收敛性很明显。同时质子的均方根半径与实验符合得很好, 且第二阶修正很小, 这意味着波函数的微扰收敛也很快。

表 1 用微扰理论逐阶展开计算的  $^4\text{He}$  基态性质。PT2 和 PT3 分别代表二阶和三阶微扰修正。计算中取  $N_{\text{shell}} = 13$ ,  $\hbar\Omega = 35 \text{ MeV}$ ,  $\lambda = 2.0 \text{ fm}^{-1}$ 。

观测量	质子半径/fm	$E_{\text{g.s.}}/\text{MeV}$
实验	1.450 <sup>[43]</sup>	-28.296 <sup>[44]</sup>
球形 HF	1.651 8	-21.863 9
PT2	0.001 3	-5.087 5
PT3	-	-0.898 9
质心修正	-0.092 2	-
总和	1.560 9	-27.850 3

图 4 给出了  $^{16}\text{O}$  的计算结果, 可以看到对不同的模型空间 ( $N_{\text{shell}}$ ) 和流参数 ( $\lambda$ ) 在  $\hbar\Omega \approx 35 \text{ MeV}$  时有能量的极小值, 并且此时能量随谐振子大壳的变化基本收敛。当取  $\lambda=1.5 \text{ fm}^{-1}$  时计算得到的基态能量相对于实验数据很负, 显示出过度的束缚, 这主要是由于我们的计算忽略了三体力。当流参数  $\lambda$  取得比较大时, 也即  $\lambda > 3.0 \text{ fm}^{-1}$ , 相似重整化群方法给出较“硬”的有效相互作用。此时重整化方法引入的三体力及更多体力的影响比较弱。但是对较“硬”的有效相互作用需要非常大的模型空间进行计算, 且此时的微扰性变得很差需要考虑超过三阶的修正。相反, 当流参数  $\lambda$  取得比较小

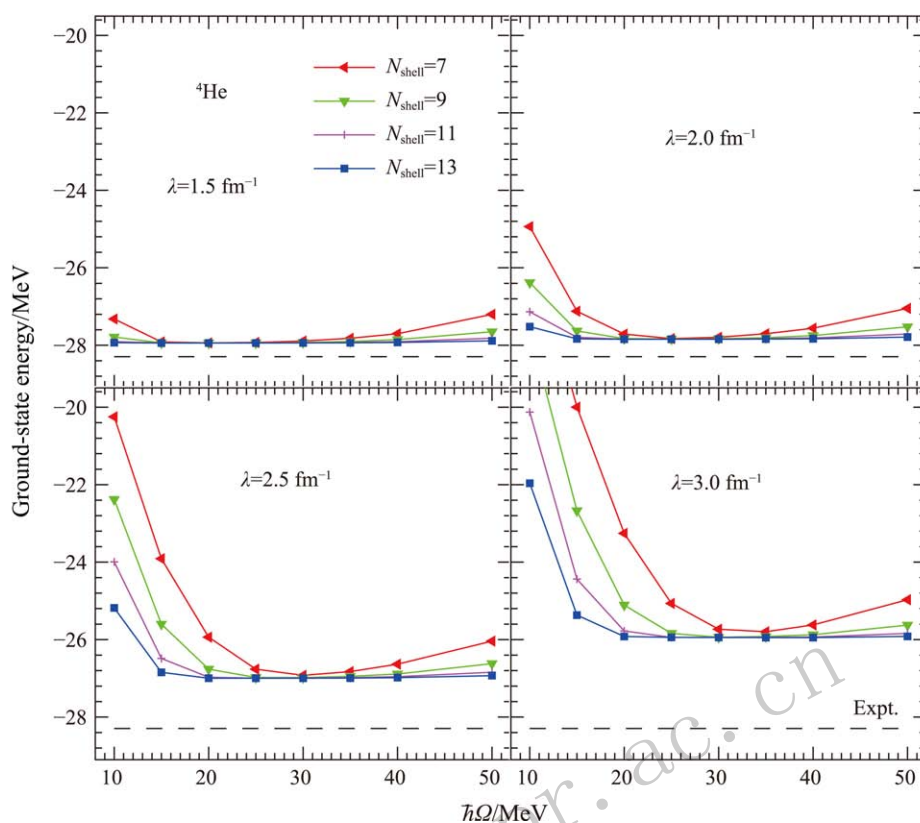


图 4 (在线彩图) HF 基矢下的多体微扰理论计算  ${}^4\text{He}$  的基态性质随谐振子参数  $\hbar\Omega$  以及相似重整化流参数  $\lambda$  的变化情况, 计算中核力采用手征有效场论  $N^3\text{LO}$

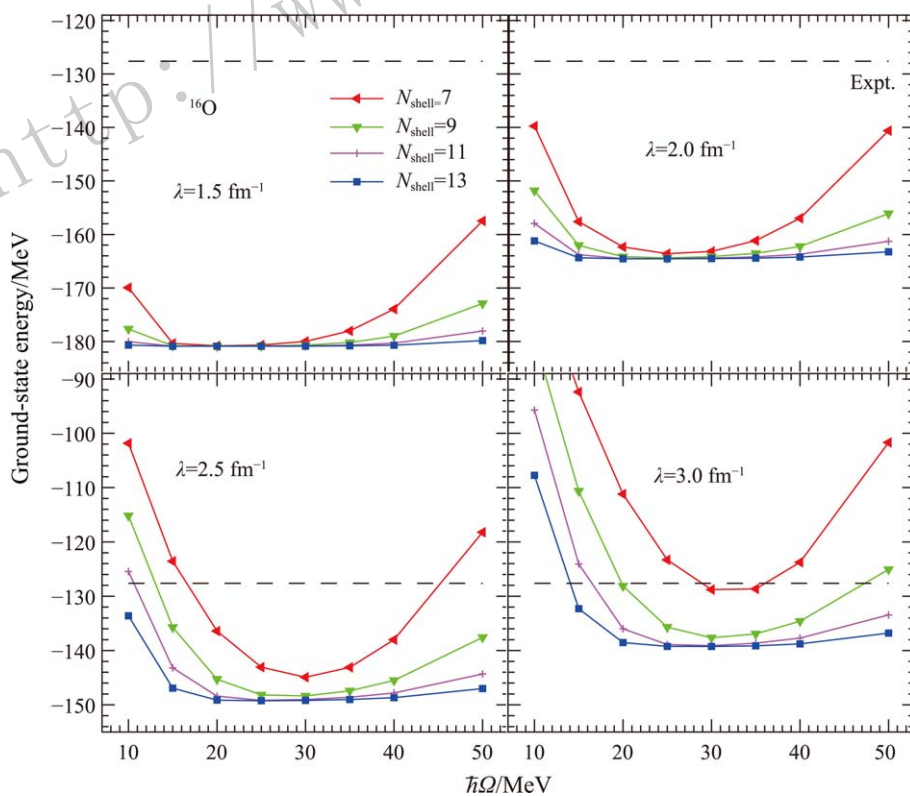


图 5 (在线彩图) HF 基矢下的多体微扰理论计算  ${}^{16}\text{O}$  的基态性质随谐振子参数  $\hbar\Omega$  以及相似重整化流参数  $\lambda$  的变化情况, 计算中核力采用手征有效场论  $N^3\text{LO}$

时, 相似重整化群方法给出较“软”的有效相互作用。但此时重整化引入的三体力效应将会很大。根据以往的经验流参数  $\lambda \sim (2.0 \sim 2.5) \text{ fm}^{-1}$  时, 核力可以被很好的软化, 同时重整化引入的三体力效应也被很好的压低<sup>[12, 46, 47]</sup>。表2给出  $\lambda = 2.5 \text{ fm}^{-1}$ ,  $\hbar\Omega = 35 \text{ MeV}$  时的 MBPT 计算结果。可以看到  $E^{(2)}/E^{(1)}=0.6999$ ,  $E^{(3)}/E^{(2)}=0.0777$ , 很明显在  $^{16}\text{O}$  计算中收敛也很快, 我们可以忽略更高阶的贡献。在文献<sup>[47]</sup>中可以看到 HF 基矢下 MBPT 计算到第三阶就可以与精确结果很相近, 第四阶修正和更高阶修正可以被忽略。从表2中还可以看到半径小于实验值, 其它的第一性原理计算也都显示出系统性比实验值小的结果<sup>[36, 48]</sup>。

表2 用微扰理论逐阶展开计算  $^{16}\text{O}$  的基态性质。PT2 和 PT3 分别代表二阶和三阶微扰修正。计算中取  $N_{\text{shell}} = 13$ ,  $\hbar\Omega = 35 \text{ MeV}$ ,  $\lambda = 2.5 \text{ fm}^{-1}$

观测量	质子半径/fm	$E_{g.s.}/\text{MeV}$
实验	2.58 <sup>[43]</sup>	-127.62 <sup>[44]</sup>
球形HF	2.2010	-85.1727
PT2	-0.0063	-59.6167
PT3	-	-4.6295
质心修正	-0.0169	-
总和	2.1778	-149.4189

## 4 结论

从手征有效场论出发, 利用多体微扰理论 (many-body perturbation theory, MBPT) 对双幻闭壳核  $^4\text{He}$  和  $^{16}\text{O}$  进行第一性原理计算。为加快 MBPT 逐阶展开的收敛速度选取 Hartree-Fock (HF) 单体哈密顿量作为零阶微扰哈密顿量, 本文证明在 HF 基矢下 MBPT 的计算结果逐阶收敛很快。对能量的微扰计算到第三阶, 对波函数计算到第二阶就可以得到很好的收敛结果。在此基础上详细分析了相似重整化群方法中的流参数、谐振子参数以及模型空间大小对 MBPT 计算结果的依赖和影响。

### 参考文献:

- [1] MACHLEIDT R. Phys Rev C, 2001, **63**: 024001.
- [2] STOKS V G J, KLOMP R A M, TERHEGGEN C P F, *et al.* Phys Rev C, 1994, **49**: 2950.
- [3] WIRINGA R B, STOKS V G J, SCHIAVILLA R. Phys Rev C, 1995, **51**: 38.
- [4] DOLESCHALL P. Phys Rev C, 2004, **69**: 054001.
- [5] ENTEM D R, MACHLEIDT R. Phys Rev C, 2003, **68**: 041001.
- [6] MACHLEIDT R, ENTEM D R. Physics Reports, 2011, **503**(1): 1.
- [7] BRUECKNER K A. Phys Rev, 1955, **97**: 1353.
- [8] GOLDSTONE J. Proc R Soc Lond A, 1957, **239**: 267.
- [9] BETHE H A, BRANDOW B H, PETSCHKE A G. Phys Rev, 1963, **129**: 225.
- [10] BOGNER S K, KUO T T S, CORAGGIO L, *et al.* Phys Rev C, 2002, **65**: 051301.
- [11] BOGNER S K, KUO T T S, SCHWENK A. Physics Reports, 2003, **386**(1): 1.
- [12] BOGNER S K, FURNSTAHL R J, PERRY R J. Phys Rev C, 2007, **75**: 061001.
- [13] ÔKUBO S. Progress of Theoretical Physics, 1954, **12**(5): 603.
- [14] SUZUKI K, LEE S Y. Progress of Theoretical Physics, 1980, **64**(6): 2091.
- [15] SUZUKI K. Progress of Theoretical Physics, 1982, **68**(1): 246.
- [16] SUZUKI K, OKAMOTO R. Progress of Theoretical Physics, 1983, **70**(2): 439.
- [17] SUZUKI K. Progress of Theoretical Physics, 1982, **68**(6): 1999.
- [18] SUZUKI K, OKAMOTO R. Progress of Theoretical Physics, 1994, **92**(6): 1045.
- [19] ROTH R, HERGERT H, PAPAKONSTANTINOPOULOS P, *et al.* Phys Rev C, 2005, **72**: 034002.
- [20] ROTH R, NEFF T, FELDMIEIER H. Progress in Particle and Nuclear Physics, 2010, **65**(1): 50.
- [21] NAVRÁTIL P, VARY J P, BARRETT B R. Phys Rev C, 2000, **62**: 054311.
- [22] NAVRÁTIL P, VARY J P, BARRETT B R. Phys Rev Lett, 2000, **84**: 5728.
- [23] NAVRÁTIL P, QUAGLIONI S, STETCU I, *et al.* Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 2009, **36**(8): 083101.
- [24] CAPRIO M A, MARIS P, VARY J P. Physics Letters B, 2013, **719**(1-3): 179.
- [25] BARRETT B R, NAVRÁTIL P, VARY J P. Progress in Particle and Nuclear Physics, 2013, **69**(0): 131.
- [26] PIEPER S C, PANDHARIPANDE V R, WIRINGA R B, *et al.* Phys Rev C, 2001, **64**: 014001.
- [27] PIEPER S C, WIRINGA R B, CARLSON J. Phys Rev C, 2004, **70**: 054325.
- [28] PERVIN M, PIEPER S C, WIRINGA R B. Phys Rev C, 2007, **76**: 064319.
- [29] MARCUCCI L E, PERVIN M, PIEPER S C, *et al.* Phys Rev C, 2008, **78**: 065501.
- [30] HAGEN G, PAPPENBROCK T, DEAN D J, *et al.* Phys Rev Lett, 2008, **101**: 092502.
- [31] HAGEN G, PAPPENBROCK T, DEAN D J. Phys Rev Lett, 2009, **103**: 062503.
- [32] HAGEN G, PAPPENBROCK T, DEAN D J, *et al.* Phys Rev C, 2010, **82**: 034330.
- [33] SHAVITT I, BARTLETT R J. Many-Body Methods in

- Chemistry and Physics: MBPT and Coupled-Cluster Theory[M]. Cambridge University Press, 2009.
- [34] CORAGGIO L, ITACO N, COVELLO A, *et al.* Phys Rev C, 2003, **68**: 034320.
- [35] HASAN M A, VARY J P, NAVRÁTIL P. Phys Rev C, 2004, **69**: 034332.
- [36] ROTH R, PAPAKONSTANTINOPOULOS P, PAAR N, *et al.* Phys Rev C, 2006, **73**: 044312.
- [37] BRILLOUIN L. J Phys Radium, Ser, 1932, **3**: 373.
- [38] WIGNER E. Math Naturwiss Anz Ungar Akad Wiss, 1935, **53**: 477.
- [39] STRUTT J W, RAYLEIGH B. The Theory of Sound, Vol1 [M]. 2ed. New York: Macmillan and Company, 1894.
- [40] SCHRÖDINGER E. Ann Physik, 1926, **385**: 437.
- [41] HU B S, XU F R, SUN Z H, *et al.* Phys Rev C, 2016, **94**: 014303.
- [42] NEGELE J W. Phys Rev C, 1970, **1**: 1260.
- [43] ANGELI I, MARINOVA K. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2013, **99**(1): 69.
- [44] AUDI G, KONDEV F, WANG M, *et al.* Chinese Physics C, 2012, **36**(12): 1157.
- [45] BOGNER S K, FURNSTAHL R J, MARIS P, *et al.* Nuclear Physics A, 2008, **801**(1-2): 21.
- [46] JURGENSON E D, MARIS P, FURNSTAHL R J, *et al.* Phys Rev C, 2013, **87**: 054312.
- [47] TICHAI A, LANGHAMMER J, BINDER S, *et al.* arXiv: 1601.03703[nucl-th].
- [48] EKSTRÖM A, JANSEN G R, WENDT K A, *et al.* Phys Rev C, 2015, **91**: 051301.

## *Ab initio* Many-body Perturbation Calculations with Chiral $N^3LO$ Interaction

HU Baishan, XU Furong<sup>†</sup>

(State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

**Abstract:** Starting from chiral  $N^3LO$ , we have applied many-body perturbation theory (MBPT) to the structure of spherical, doubly closed-shell nuclei. The two-body  $N^3LO$  interaction is softened by a similarity renormalization group transformation. The MBPT calculations are performed within the Hartree-Fock (HF) bases. Higher-order corrections in the HF basis are small relative to the leading-order perturbative result. Corrections up to the third order in energy and up to the second order in wave function are evaluated. Using the anti-symmetrized Goldstone diagram expansions of the wave function, we directly correct the one-body density for the calculation of the radius. Our results are in very good agreement with experimental data.

**Key words:** *Ab initio*; chiral  $N^3LO$ ; many-body perturbation theory; similarity renormalization group;  $^4\text{He}$  and  $^{16}\text{O}$

Received date: 13 Dec. 2016; Revised date: 11 Apr. 2016

Foundation item: National Basic Research Program of China (973 Program)(2013CB834402); National Natural Science Foundation of China (11235001, 11320101004, 11575007)

<sup>†</sup> Corresponding author: XU Furong, E-mail: frxu@pku.edu.cn.