

第二届原子核从头计算与 β 衰变前沿研讨会

2026.1.10-12, 重庆

第一性原理计算探究原子核中的同位旋对称性破缺

李建国

中国科学院近代物理研究所

合作者：左维，袁琪，李红蕙，谢萌冉，沈留媛，…

同位旋对称性破缺的起因

同位旋：1932年由Heisenberg提出，镜像原子核的性质相同



► 粒子物理

- ✓ u-d 夸克质量区别
- ✓ 夸克之间的电磁效应

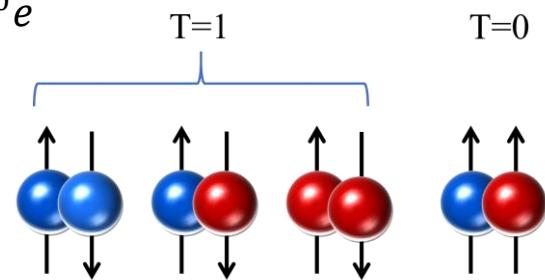
► 核物理

- ✓ 库仑相互作用
- ✓ 核子-核子相互作用的区别

- 电荷对称性破缺 (Charge symmetry breaking--CSB) $V_{nn} - V_{pp}$ (同位旋矢量)
- 电荷无关性破缺 (Charge independent breaking--CIB) $2V_{np} - (V_{nn} + V_{pp})$ (同位旋张量)

同位旋不守恒力 (Isospin non-conserving force--INC)

✓ 弱束缚效应



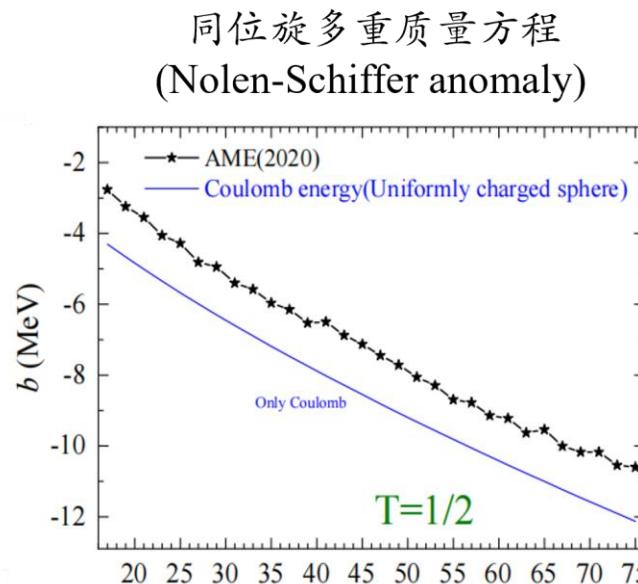
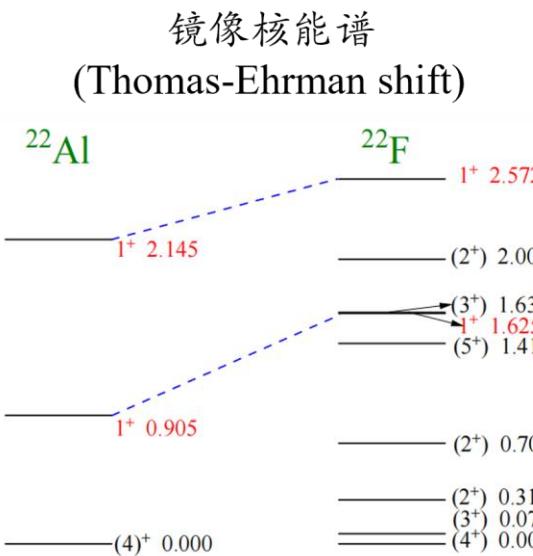
探索同位旋对称性破缺的物理机制：库仑力，核力，弱束缚效应…

原子核中的同位旋对称性破缺



➤ 同位旋：（近似的假设）

同位旋对称性破缺：实验结果



J. Lee, X.X. Xu, et al., PRL 125, 192503(2020)

Y. H. Zhang et al., PRL 109, 102501(2012)

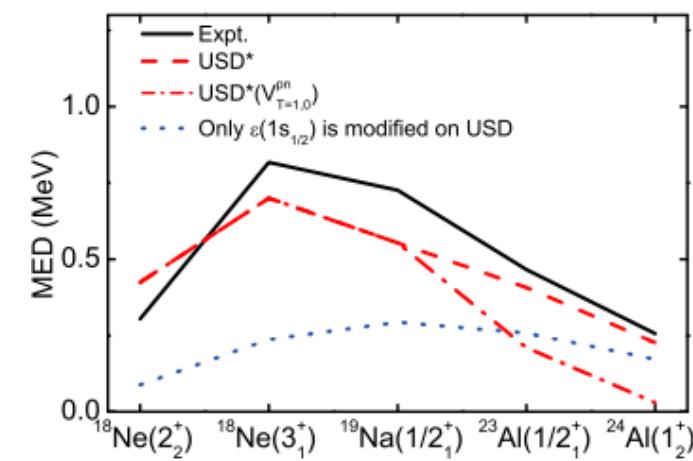
➤ 前期的理论研究主要手段：壳模型

国内：上海交通大学 孙扬 教授

中山大学 袁岑溪 教授

国际：法国Lenzi等人

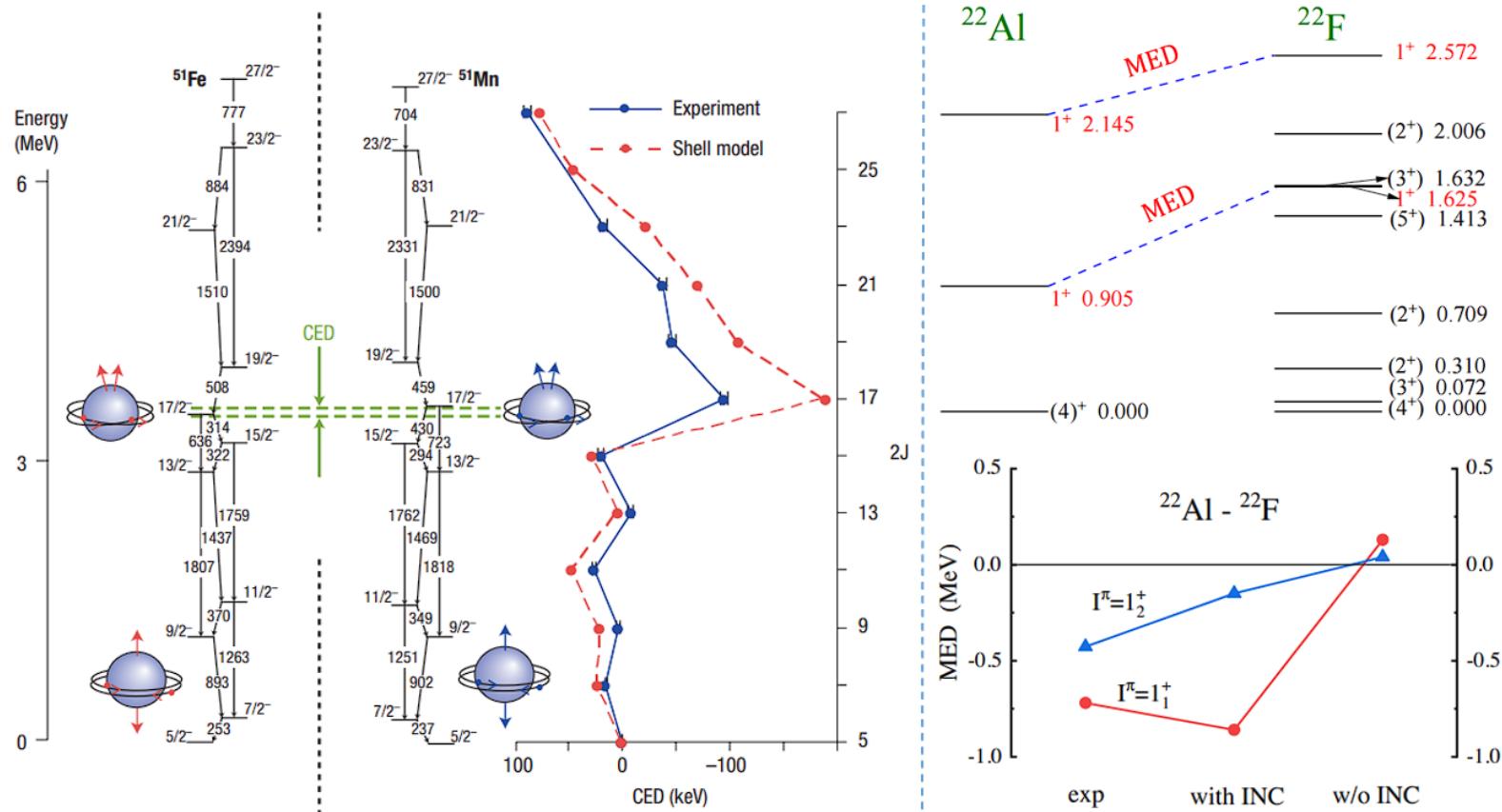
唯象手段：调整与 $1s_{1/2}$ 相关的矩阵元，重现实验结果



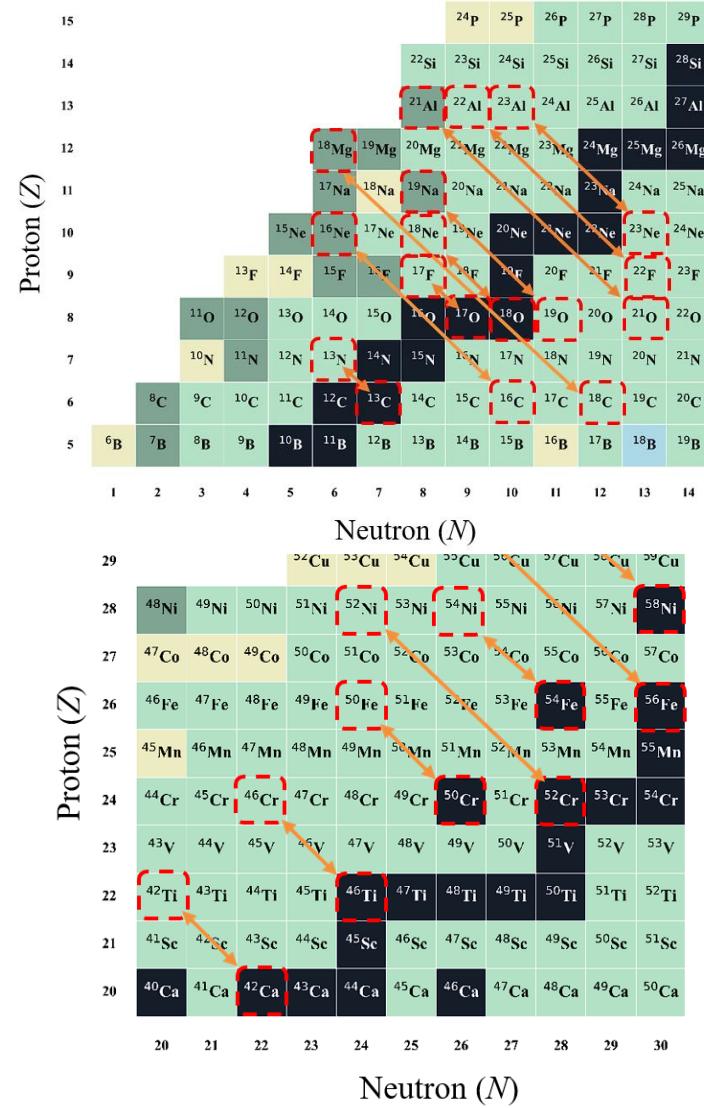
第一性原理计算中无额外参数，应用于同位旋对称性破缺研究

镜像原子核中同位旋对称性研究现状

sd- 和 pf-壳 镜像原子核中的镜像能级差对比



理论上精确描述镜像能级差依然是理论研究的挑战



质子滴线核中的 β 衰变—同位旋对称性破缺



镜像能级差异(MED)— 检验哈密顿量与波函数

$$MED = E_x(J, T, T_Z = -T) - E_x(J, T, T_Z = T),$$

Thomas-Ehrman Shift

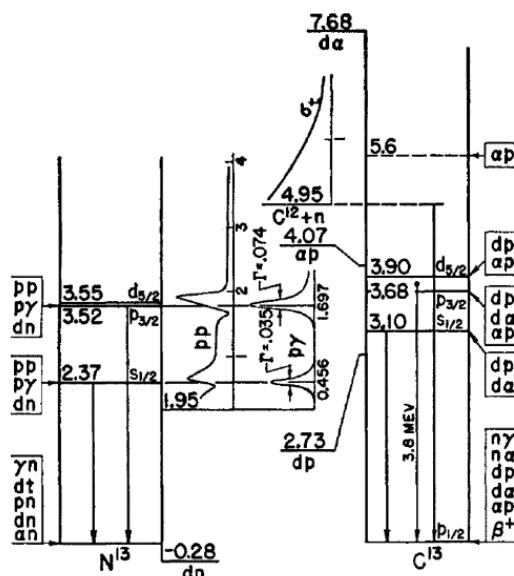
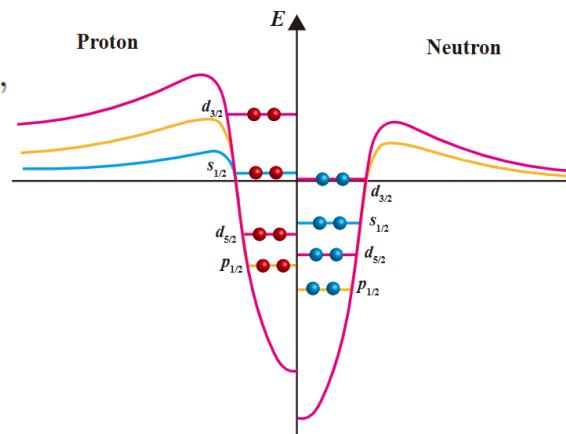


FIG. 1. The energy levels of C^{13} and N^{13} below 6 MeV.

Phys. Rev. 88, 1109 (1952)



mirror asymmetry parameter (δ) :
检验镜像多体波函数

$$\delta = \frac{ft^+}{ft^-} - 1 \quad \rightarrow$$

$\delta >> 0$
isospin symmetry breaking

PHYSICAL REVIEW LETTERS 125, 192503 (2020)

Isospin Asymmetry in $^{22}\text{Si}/^{22}\text{O}$ Mirror Gamow-Teller Transitions Reveals
the Halo Structure of ^{22}Al

| I_i^π | E_x (MeV) | $br\%$ | $\log(ft^+)$ | Experiment | | Calculations | | Experiment | | Calculations | | δ (%) |
|-----------|-------------|-----------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| | | | | E_x (MeV) | $\log(ft^+)$ | E_x (MeV) | $\log(ft^-)$ | E_x (MeV) | $\log(ft^-)$ | E_x (MeV) | $\log(ft^-)$ | |
| 1^+_1 | 0.905 | 5.3 (10) | 5.09 (9) | 1.12 [1.69] | 4.81 [4.52] | 1.625 | 29 (4) | 4.6 (1) | 1.98 [1.56] | 4.32 [4.56] | 209 (96) | -212 [-7] |
| 1^+_2 | 2.145 | 56.5 (51) | 3.83 (5) | 2.43 [2.55] | 3.71 [3.72] | 2.572 | 68 (6) | 3.8 (1) | 2.58 [2.51] | 3.72 [3.68] | 7 (28) | -3.4 [10] |

Comparing the mirror β decay of $^{22}\text{Si}/^{22}\text{O}$, we found **the largest** value of mirror asymmetry ($\delta = 209(96)\%$) in low-lying states by far, in the transition to the first 1^+ excited state.



核多体问题: $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

1. A体哈密顿量 H

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

2. 对A体哈密顿量做正规乘积 (Normal Order)

$$\begin{aligned} E = & \left(1 - \frac{1}{A}\right) \sum_i \langle i | T^{(1)} | i \rangle n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | T^{(2)} + V^{(2)} | ij \rangle n_i n_j \\ & + \frac{1}{6} \sum_{ijk} \langle ijk | V^{(3)} | ijk \rangle n_i n_j n_k \end{aligned}$$

$$\Gamma_{ijkl} = \langle ij | T^{(2)} + V^{(2)} | kl \rangle + \sum_a \langle ija | V^{(3)} | kla \rangle n_a$$

$$H_{NO} = E + \sum_{ij} f_{ij} : a_i^\dagger a_j : + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k : + \frac{1}{36} \sum_{ijklmn} W_{ijklmn} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^\dagger a_n a_m a_l :$$

$$\begin{aligned} f_{ij} = & \left(1 - \frac{1}{A}\right) \langle i | T^{(1)} | j \rangle + \sum_a \langle ia | T^{(2)} + V^{(2)} | ja \rangle n_a \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ab} \langle iab | V^{(3)} | jab \rangle n_a n_b \end{aligned}$$

$$W_{ijklmn} = \langle ijk | V^{(3)} | lmn \rangle$$

正规乘积后的两体近似(*NO2B*)包含三体力效应。

核多体问题: $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

1. A体哈密顿量 H

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

2. 对A体哈密顿量做正规乘积 (Normal Order)

$$\begin{aligned} E = & \left(1 - \frac{1}{A}\right) \sum_i \langle i | T^{(1)} | i \rangle n_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle ij | T^{(2)} + V^{(2)} | ij \rangle n_i n_j \\ & + \frac{1}{6} \sum_{ijk} \langle ijk | V^{(3)} | ijk \rangle n_i n_j n_k \end{aligned}$$

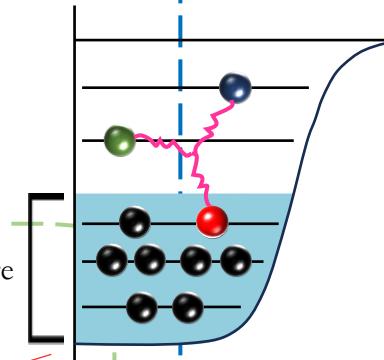
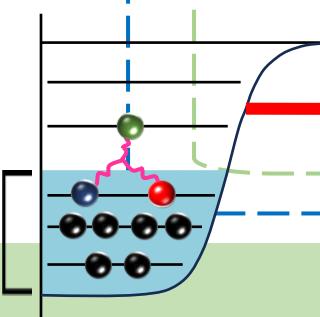
$$\Gamma_{ijkl} = \langle ij | T^{(2)} + V^{(2)} | kl \rangle + \sum_a \langle ija | V^{(3)} | kla \rangle n_a$$

$$H_{NO} = E + \sum_{ij} f_{ij} : a_i^\dagger a_j : + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \Gamma_{ijkl} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k : + \frac{1}{36} \sum_{ijklmn} W_{ijklmn} : a_i^\dagger a_j^\dagger a_k^\dagger a_n a_m a_l :$$

$$f_{ij} = \left(1 - \frac{1}{A}\right) \langle i | T^{(1)} | j \rangle + \sum_a \langle ia | T^{(2)} + V^{(2)} | ja \rangle n_a$$

$$W_{ijklmn} = \langle ijk | V^{(3)} | lmn \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{ab} \langle iab | V^{(3)} | jab \rangle n_a n_b$$



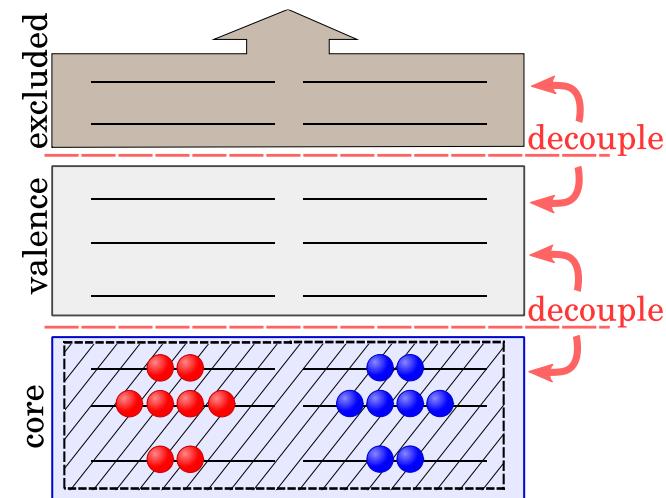
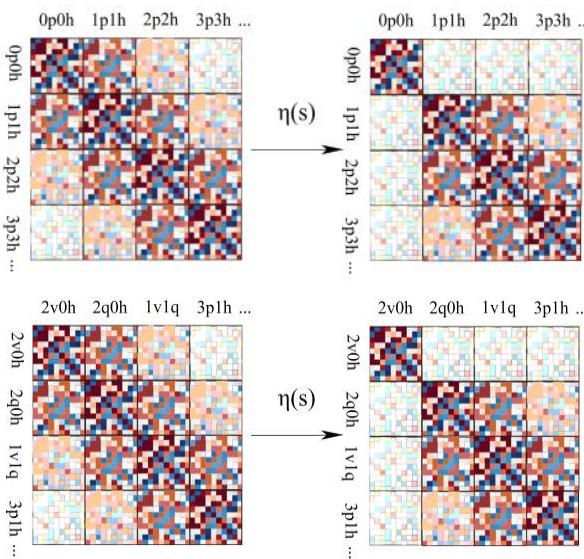
正规乘积后的两体近似($NO2B$)包含三体力效应。

价空间-介质相似重整化群 (VS-IMSRG) 与多体微扰方法

3. 通过连续的幺正变换 U 将正规乘积的哈密顿量脱耦成价空间的有效哈密顿量

$$H_{eff}(s) = U(s) H_{NO} U^\dagger(s), (UU^\dagger = 1)$$

- 流方程: $\frac{d}{ds} H_{eff}(s) = [\eta(s), H(s)]$
- 生成子: $\eta(s) = \frac{dU(s)}{ds} U^\dagger(s) = -\eta^\dagger(s)$
- 幺正变换: $U(s) = e^{\Omega(s)} = e^{\int \eta(s) ds}$



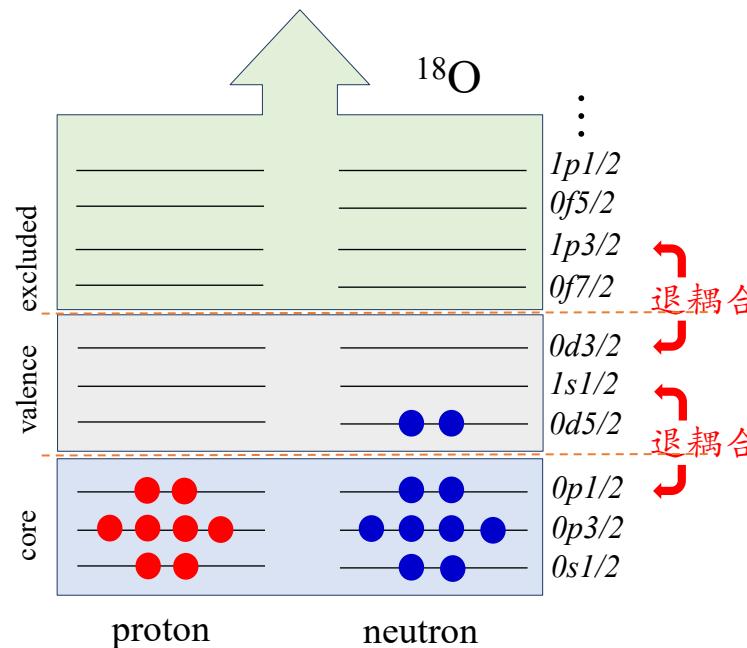
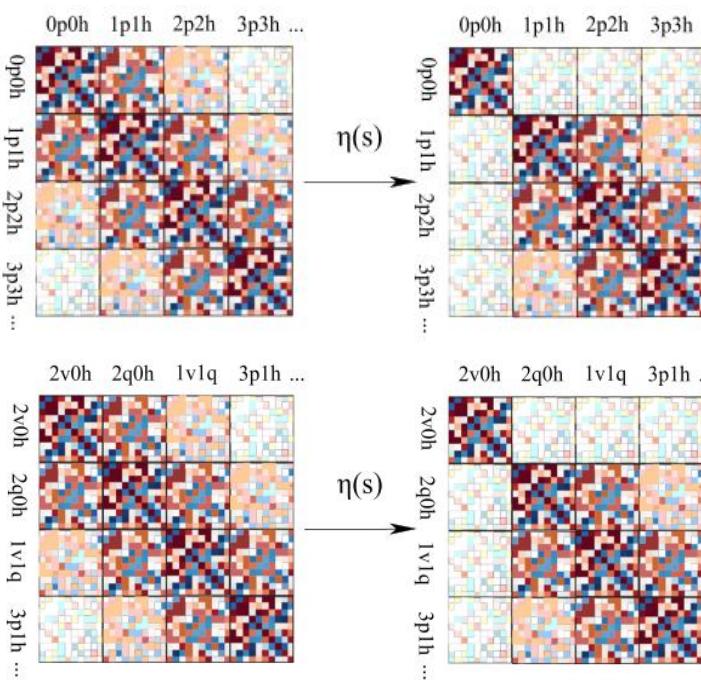
$$|\Phi_0\rangle = |^{16}\text{O}\rangle$$

价空间-介质相似重整化群 (VS-IMSRG)

第一性原理 价空间的介质相似重整化群 (*Ab initio* VS-IMSRG)
Ab initio Valence-Space In-Medium Similarity Renormalization Group

► 核心思想

$$\begin{aligned} H(s) &= U(s)H(0)U^+(s) \\ &= H^d(s) + H^{od}(s) \rightarrow H^d(\infty) \end{aligned}$$



► 优势:

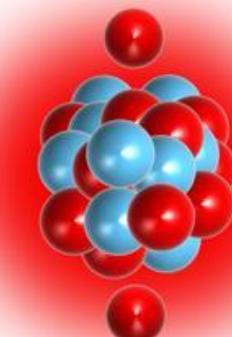
- 基于现实核力 (NN+3N)
- 包括CSB 以及 CIB 效应
- 同位旋对称性破缺: 接触项和交换项
- 在计算过程中, 没有引入额外的参数
- 精确处理核多体系统

壳模型能算的, VS-IMSRG都可以从现实核力出发进行计算

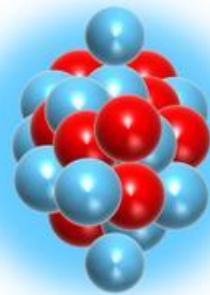
第一性原理计算探究

镜像原子核能级差中的同位旋对称性破缺

^{31}Ar



^{31}Al



1. 第一性原理计算镜像原子核能级差异

采用NN(bare)和NN+3N(1.8/2.0)现实核力，利用VS-IMSRG研究镜像核能谱上的破缺

PHYSICAL REVIEW C 107, 014302 (2023)

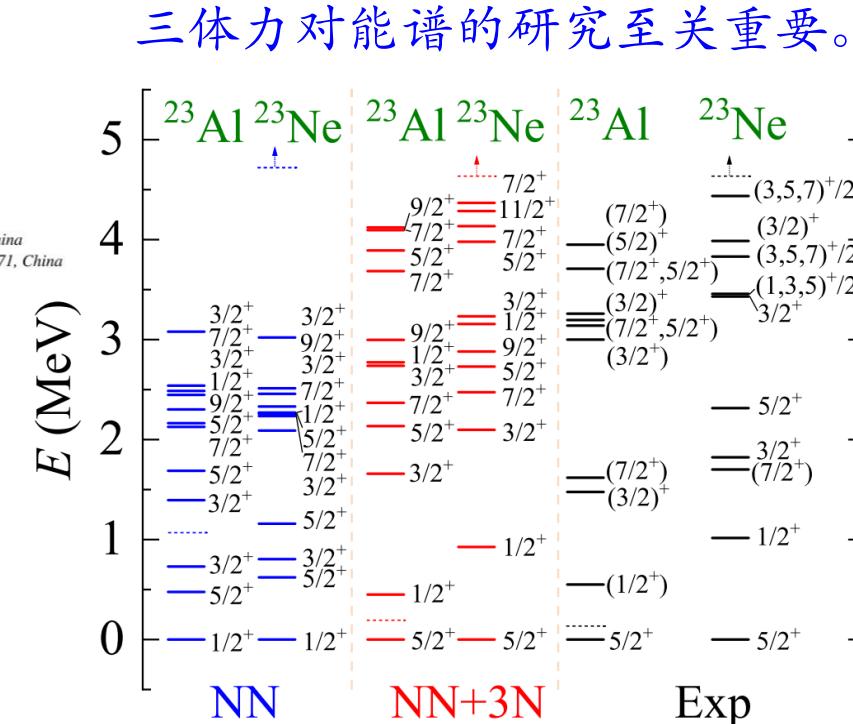
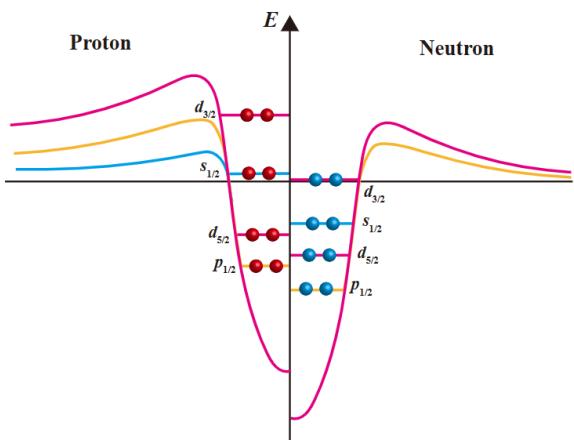
Investigation of isospin-symmetry breaking in mirror energy difference and nuclear mass with *ab initio* calculations

H. H. Li,^{1,2} Q. Yuan,³ J. G. Li,^{1,2,*} M. R. Xie,¹ S. Zhang,³ Y. H. Zhang,^{1,2} X. X. Xu,^{1,2}
N. Minchev,^{1,2} F. R. Xu,³ and W. Zuo,^{1,2}

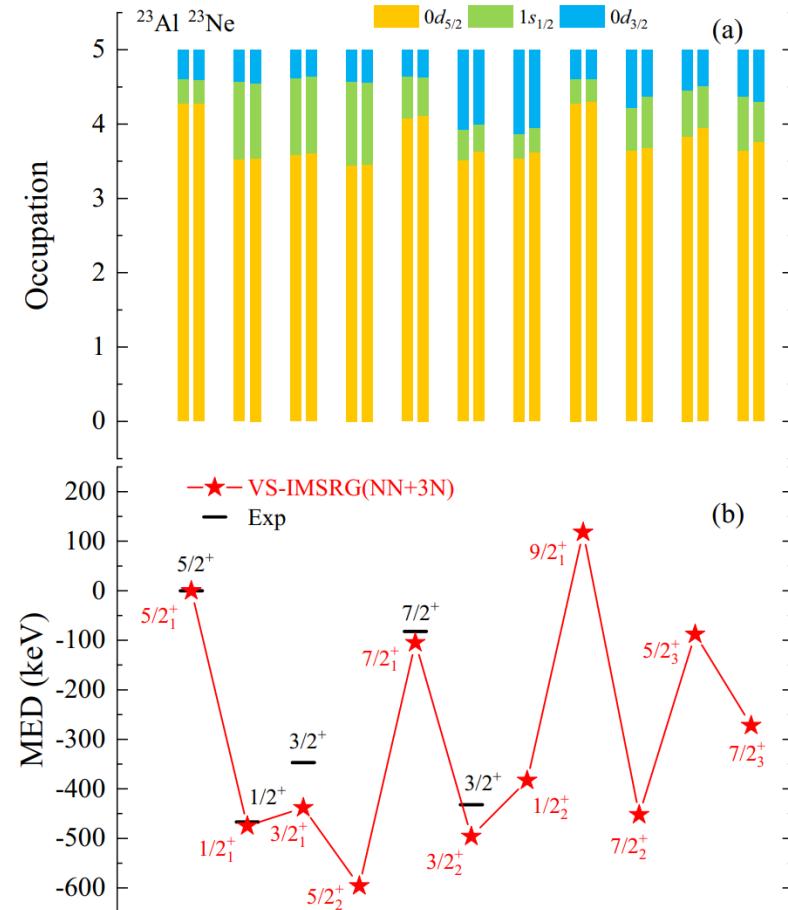
¹CAS Key Laboratory of High Precision Nuclear Spectroscopy, Institute of Modern Physics,
Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China

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

³School of Physics, and State Key Laboratory of Nuclear Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China



镜像能级差异 \rightarrow 同位旋对称性破缺
 $(MED) = E_x(\text{丰质子}) - E_x(\text{丰中子})$

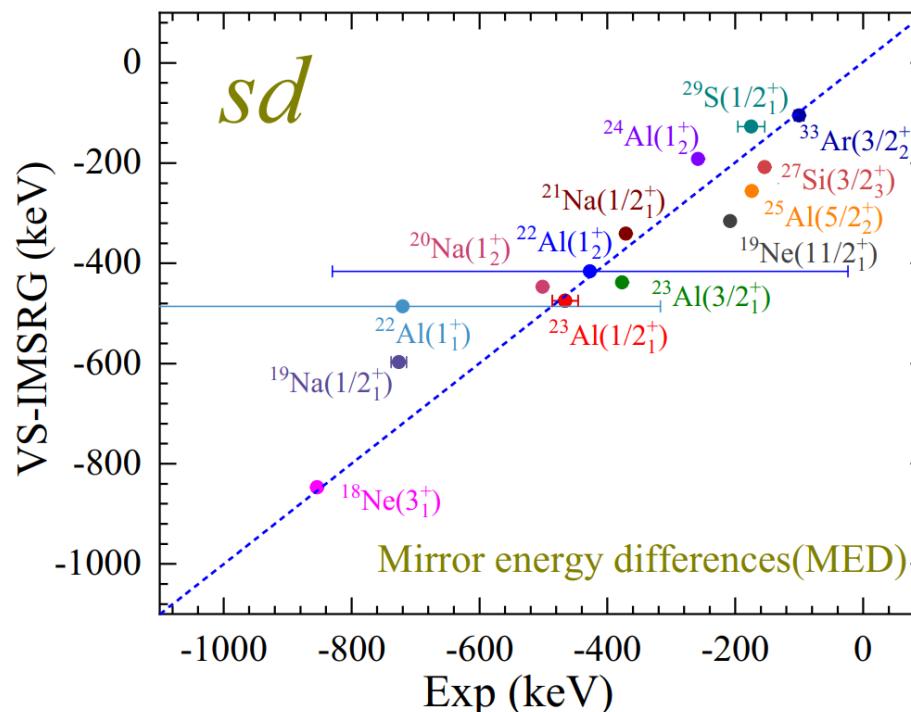


较大的MED主要是由 $1s_{1/2}$ 轨道占据导致， $0d_{3/2}$ 轨道的占据也做出贡献

1. 第一性原理计算镜像原子核能级差异

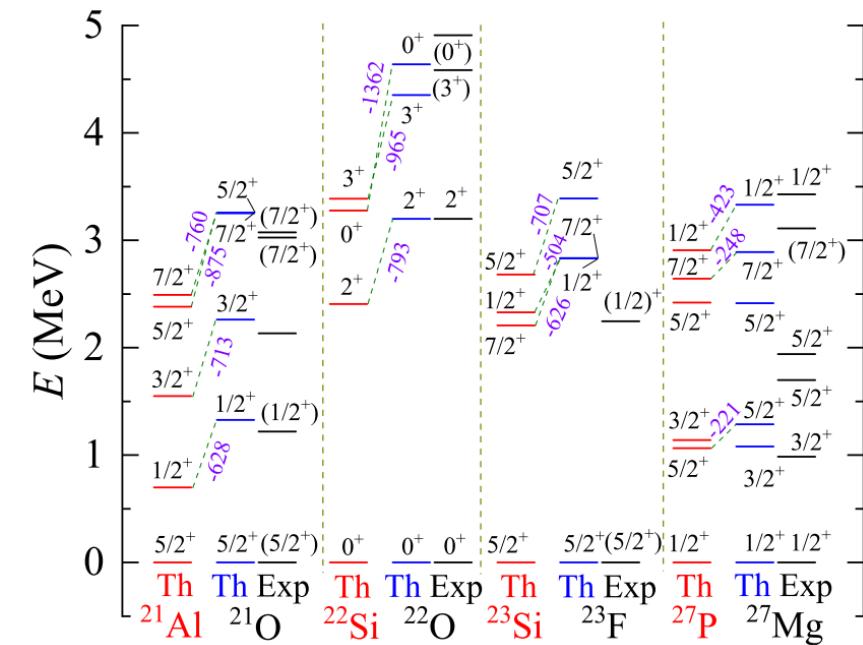
① 计算实验上已发现具有较大MED的镜像核相似态。

第一性原理能较好地重现实验结果



第一性原理VS-IMSRG方法可用于预测实验感兴趣的未知原子核。

② 预测sd壳质子滴线区原子核的低激发谱。



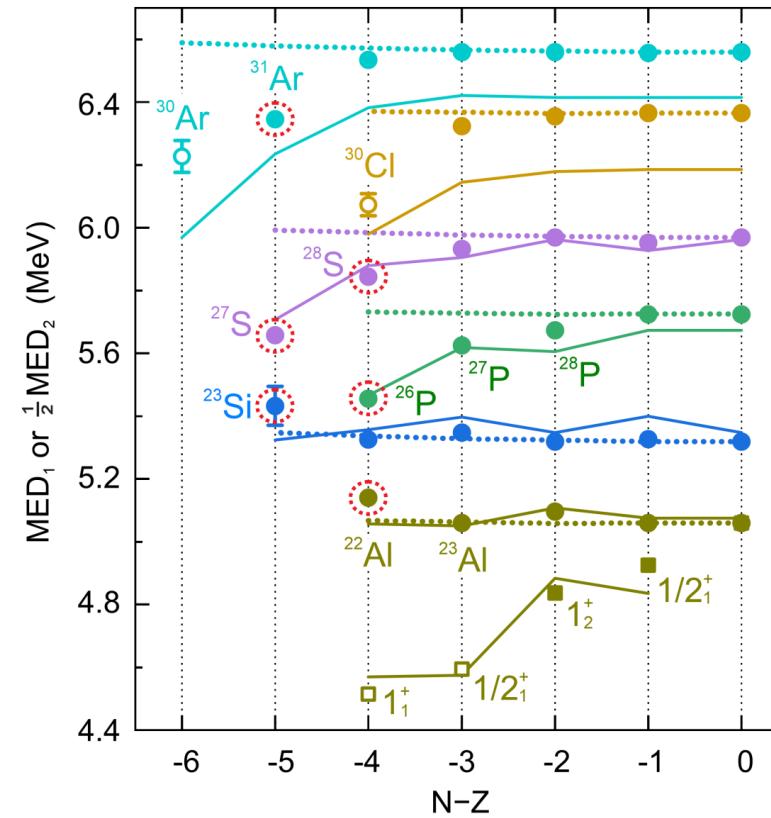
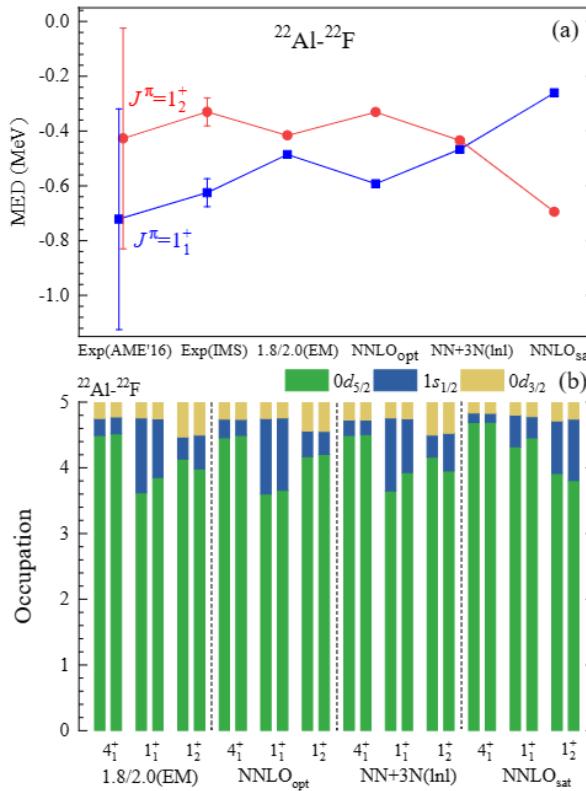
- 其镜像核(对应的丰中子核)的计算结果可与实验比拟。
- 丰质子原子核的预测是可靠。

MED 较大

同位旋对称性破缺—原子核晕结构—质量测量



与近物所张玉虎研究员、王猛研究员团队合作



- ✓ 镜像原子核分离能在滴线附近偏离正常曲线
- ✓ Al 同位素激发态存在明显同位旋对称性破缺
- ✓ 滴线原子核 $^{26}\text{P}, ^{27}\text{P}, ^{27}\text{S}, ^{31}\text{Ar}$ 基态中存在明显同位旋对称性破缺
- ✓ 同位旋对称性破缺的机制与晕核形成机制类似
- ✓ 滴线原子核 $^{26}\text{P}, ^{27}\text{P}, ^{27}\text{S}, ^{31}\text{Ar}$ 具有晕结构

M.Z. Sun, Y. Yu, X.P. Wang, M. Wang, J.G. Li*, Y.H. Zhang*, et al., Chin. Phys. C(2024)
Y. Yu, Y. M. Xing, Y. H. Zhang, M. Wang, X. H. Zhou, J. G. Li, H. H. Li, et al., PRL(2024)

传统幻数的消失与新幻数出现

传统幻数消失

反转岛

中子数为8, 20, 28, 与40附近的丰中子核区形成一片具有较大形变的原子核

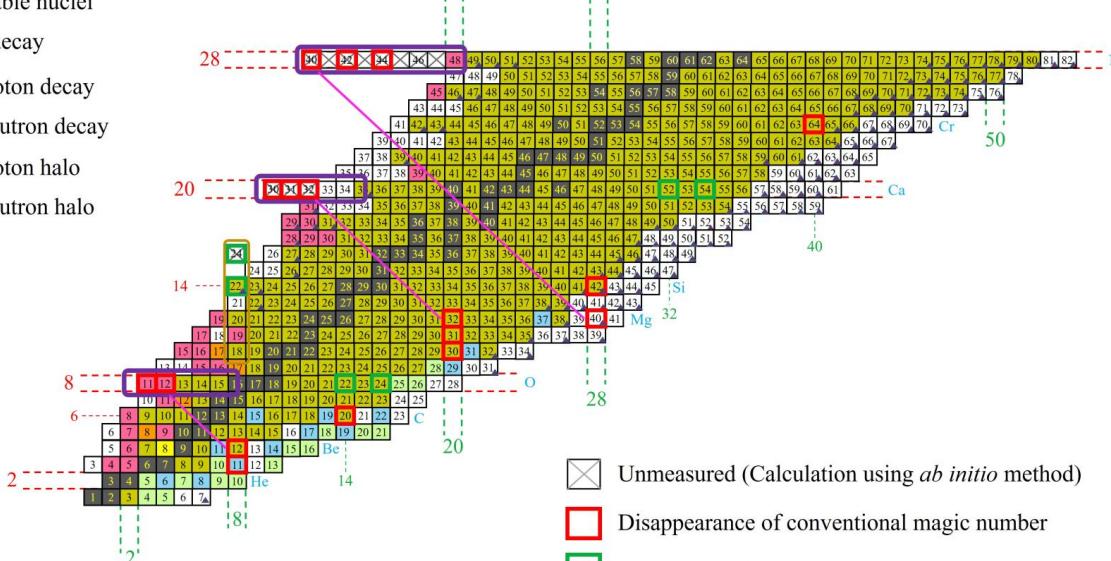
$N=8: {}^{12}\text{Be}$

$N=20: {}^{30}\text{Ne}, {}^{32}\text{Mg}$

$N=28: {}^{42}\text{Si}, {}^{40}\text{Mg}$

$N=40: {}^{64}\text{Cr}$

- Unknown decay mode
- Stable nuclei
- β decay
- Proton decay
- Neutron decay
- Proton halo
- Neutron halo



新幻数出现

出现中子数为14,16,32与34的新幻数

$N=14: {}^{22}\text{O}$

$N=16: {}^{24}\text{O}$

$N=32: {}^{52}\text{Ca}$

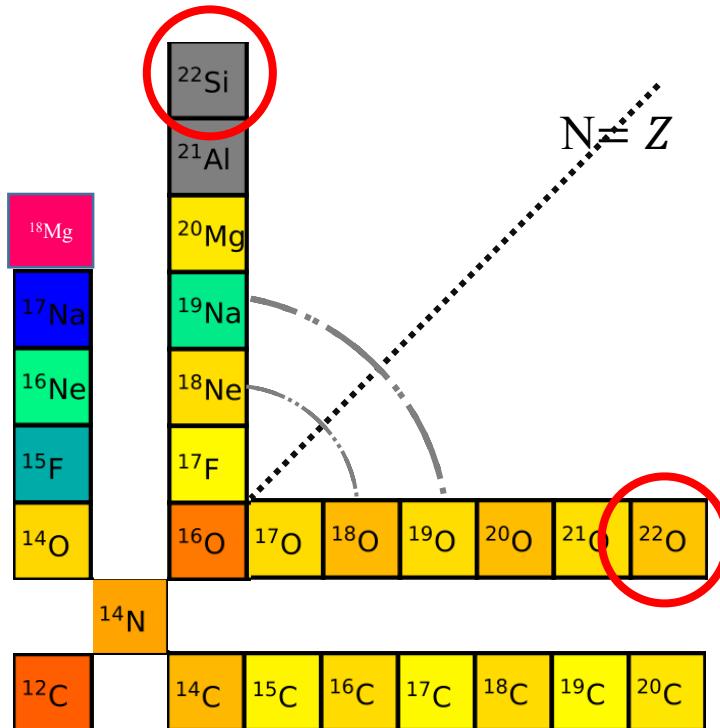
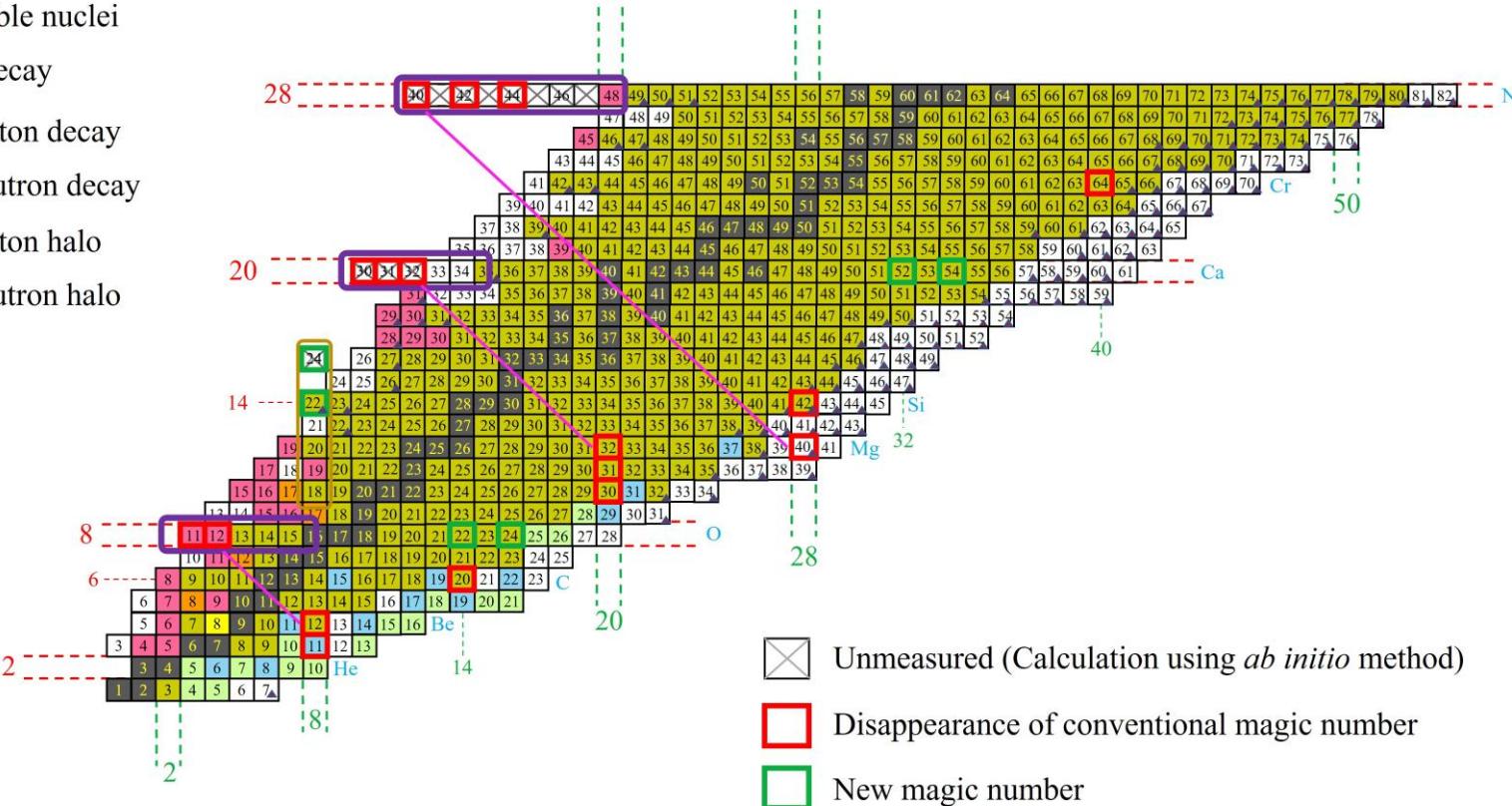
$N=34: {}^{54}\text{Ca}$

传统幻数消失与新幻数形成的物理机制

丰质子原子核中壳结构是如何演化? 同位旋对称性破缺对丰质子原子核中壳演化影响

壳结构演化—同位旋对称性破缺

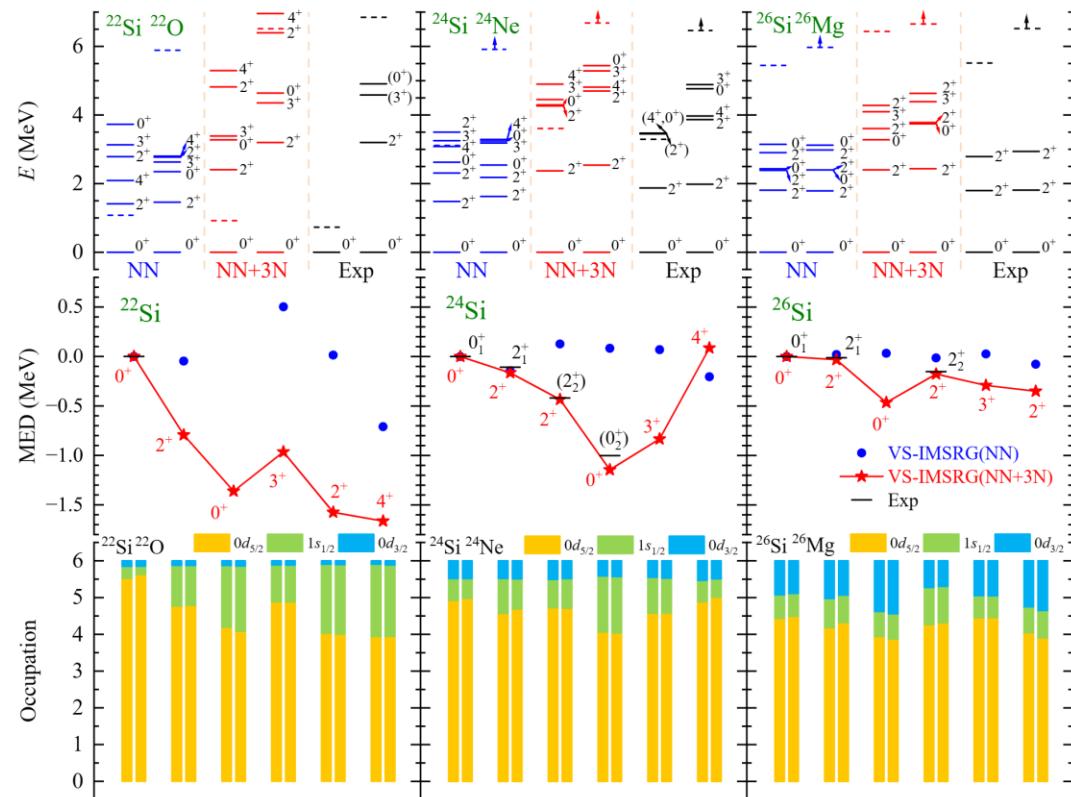
- Unknown decay mode
- Stable nuclei
- β decay
- Proton decay
- Neutron decay
- Proton halo
- Neutron halo



- ✓ 传统幻数的消失与新幻数产生
- ✓ 丰质子原子核中壳结构演化规律? 同位旋对称性破缺的效应

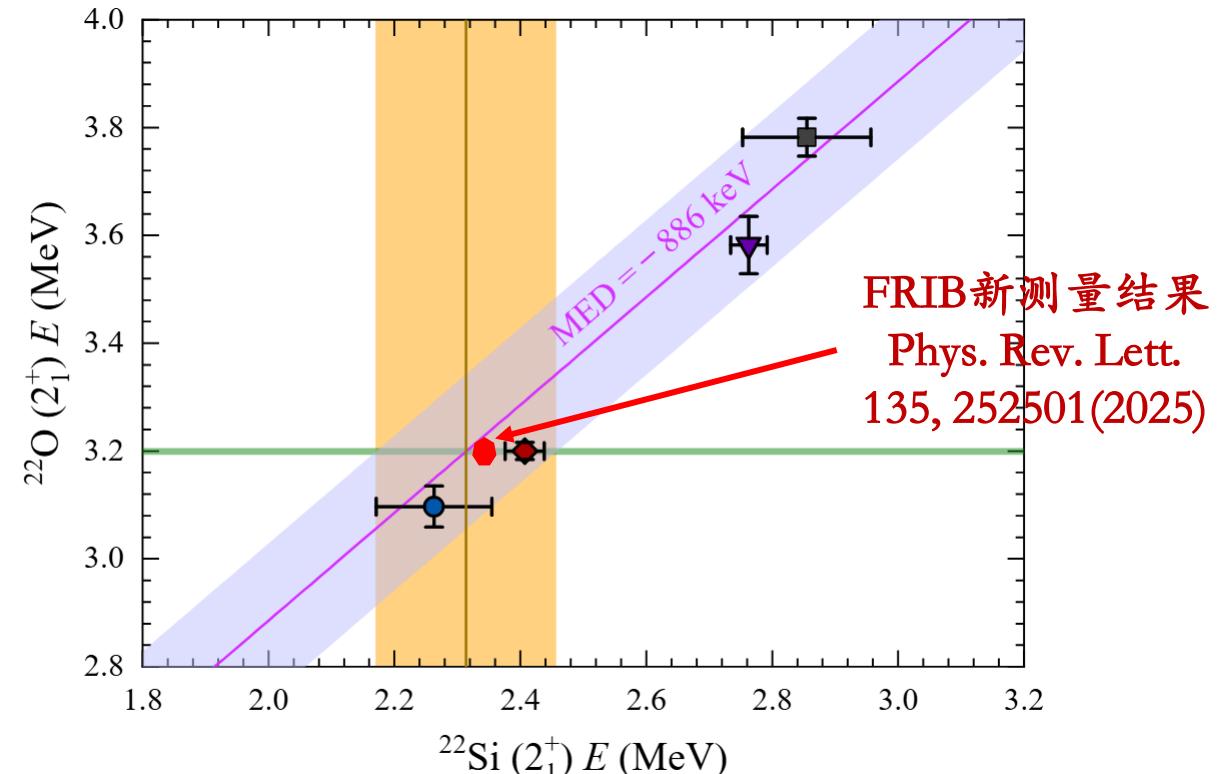
- ✓ 丰中子双幻核: ^{22}O
- ✓ $^{22}\text{Si}-^{22}\text{O}$ 中的同位旋对称性破缺

2. ^{22}Si 双幻核结构---新幻数



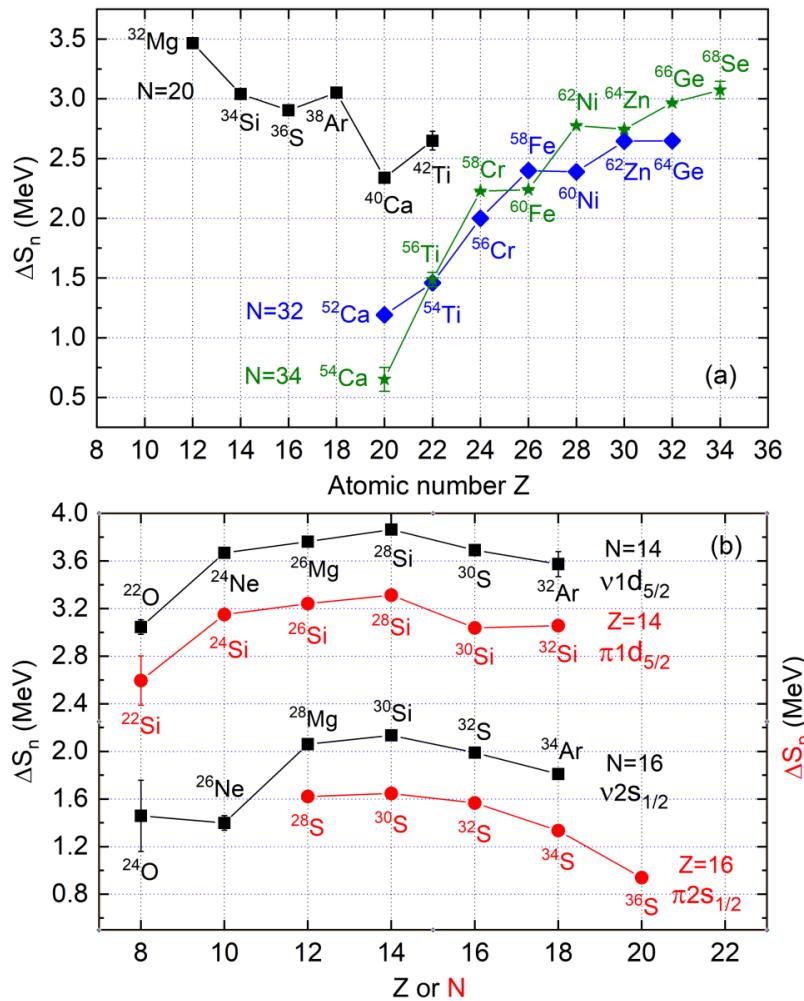
- 计算给出的 ^{22}Si 与 ^{22}O 的E(21+)的位置分别为2.4与3.2 MeV, Thomas-Ehrman shift效应; 计算显示 $^{22}\text{Si}/^{22}\text{O}$ 的0⁺与2⁺的组态非常接近
- 尽管 ^{22}Si 的E(2₁⁺)较低, 但是与 ^{22}O 相近, ^{22}Si 依然表现幻数性质。

2²²Si 的壳结构对于认识丰质子原子核中的壳结构演化很关键

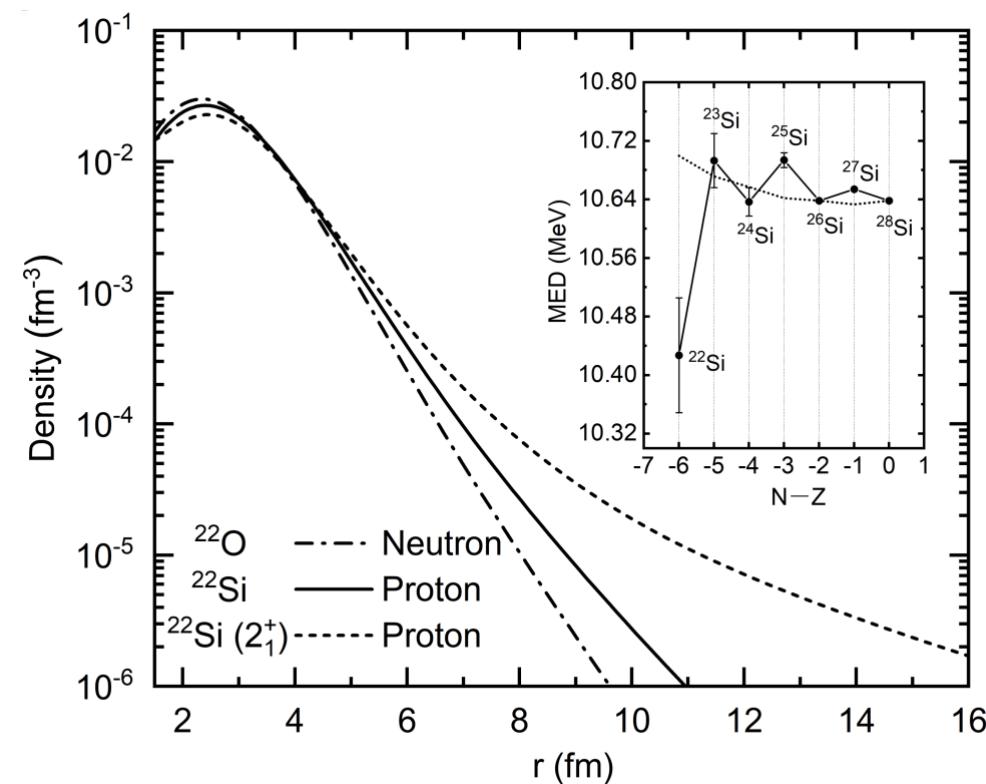


不同核力给出的 ^{22}Si 的MED值均比较接近

J.G. Li,* H. H. Li, S. Zhang, Y. M. Xing,* W. Zuo,* Phys. Lett. B 846, 138197 (2023)



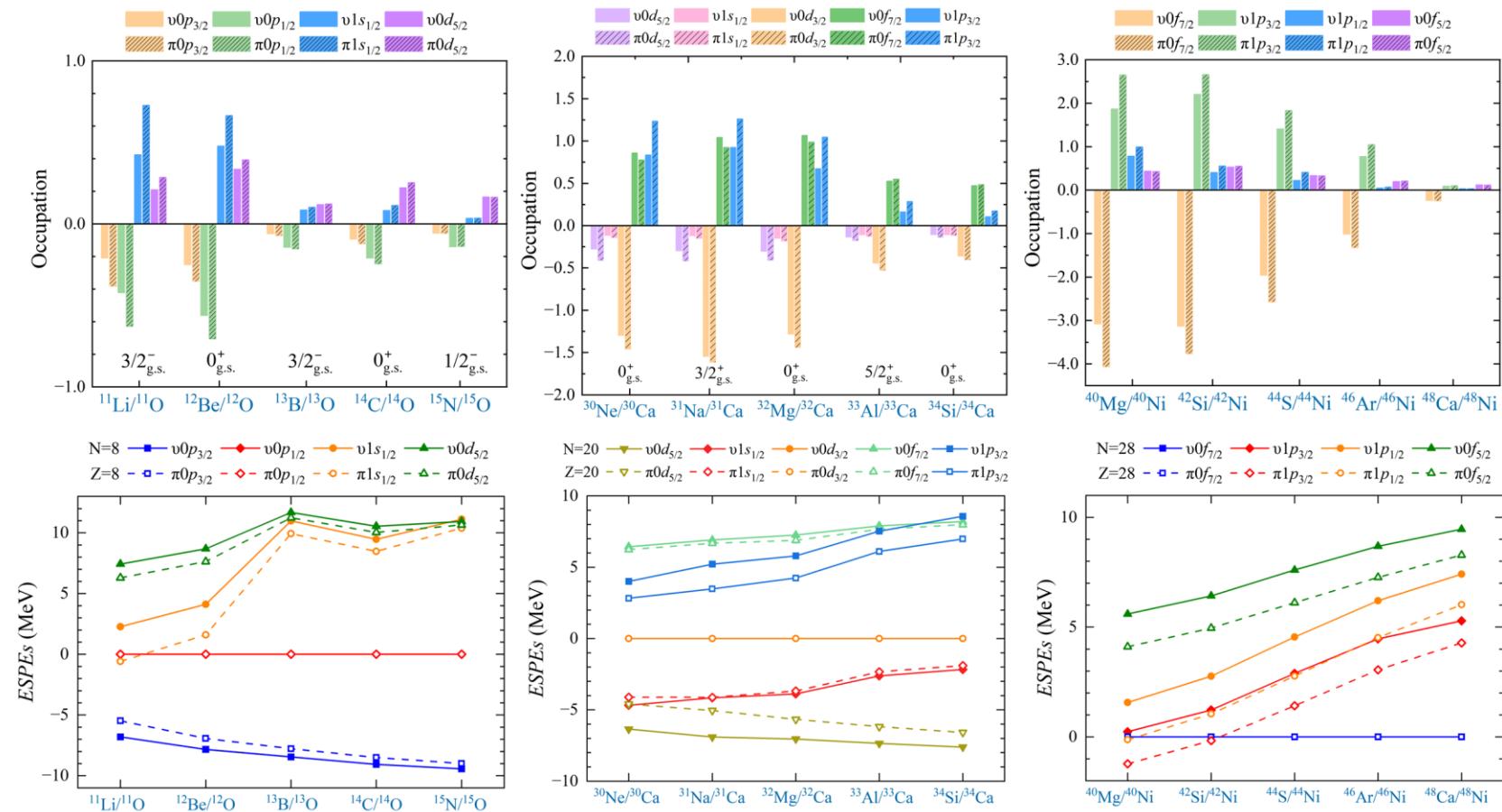
双幻核的对能较小



^{22}Si 基态展示出较强同位旋对称性破缺，主要是由占价质子微弱占据弱束缚的 $s1/2$ 轨道导致的

Y. M. Xing, Y. F. Luo, Y. H. Zhang,[†] M. Wang, X. H. Zhou, **J. G. Li*** et al., PRL 135, 012501 (2025) (共同通讯作者)

3. Z=8、20 和28 的丰质子反转岛是否存在

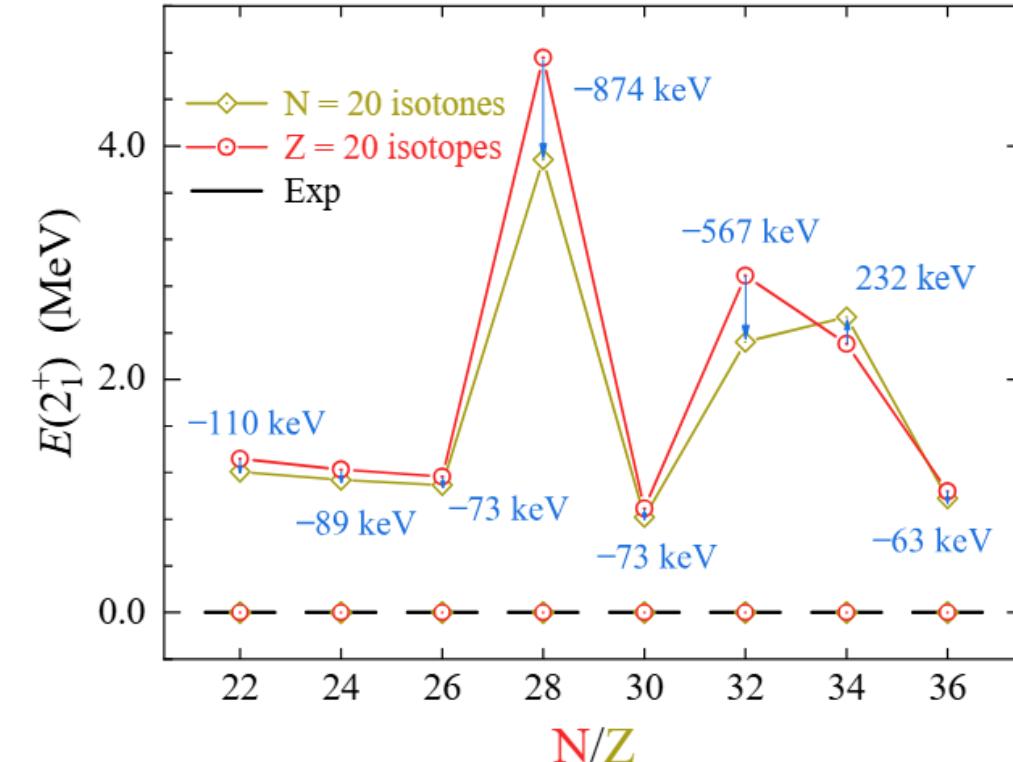
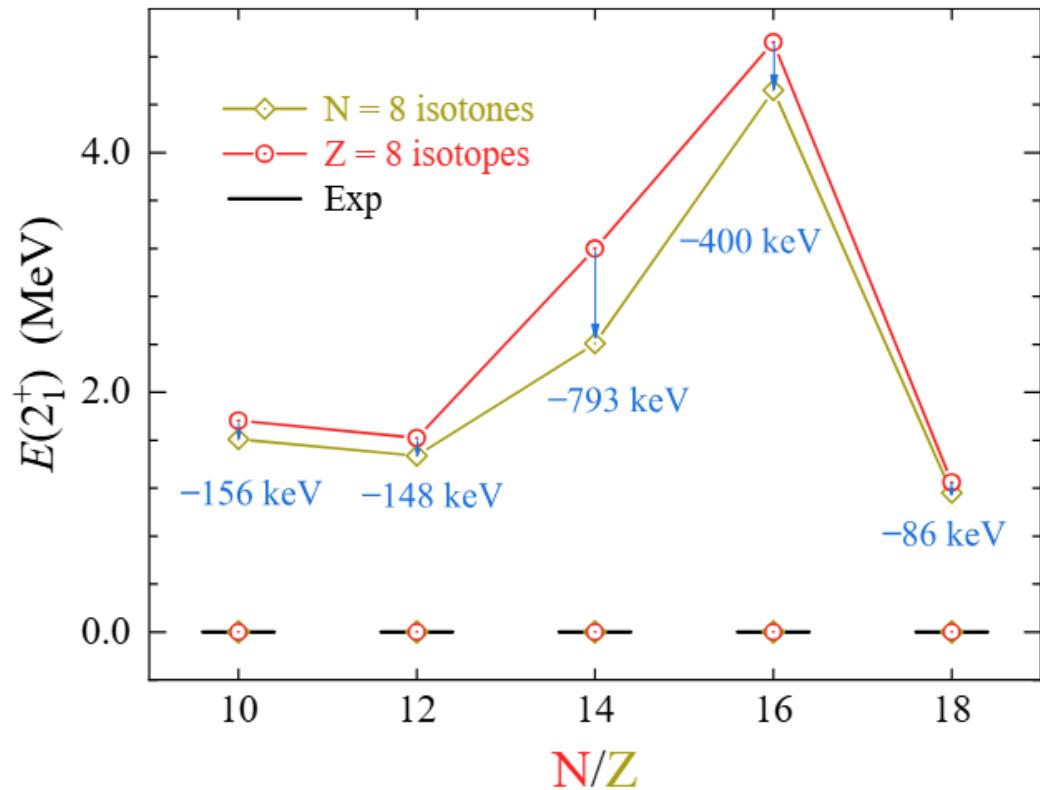


- ✓ 第一性原理计算能很好的重现 $N=8, 20, 28$ 反转岛区原子核性质；
- ✓ 计算给出丰质子原子核 $Z=8, 20, 28$ 也存在反转岛；
- ✓ 跨壳激发成分：丰质子核 > 丰中子核；
- ✓ 丰质子原子核的形变比其镜像的丰中子核大；丰质子反转岛可能比丰中子的反转岛区域更加。

H. H. Li, [J.G. Li,*](#) M. R. Xie, W. Zuo, PLB(2025)

存在 $Z=8, 20$ 和 28 的丰质子反转岛，且其形变比镜像的丰中子核大

3. 丰中子核中发现的新幻数在丰质子核中是否存在?



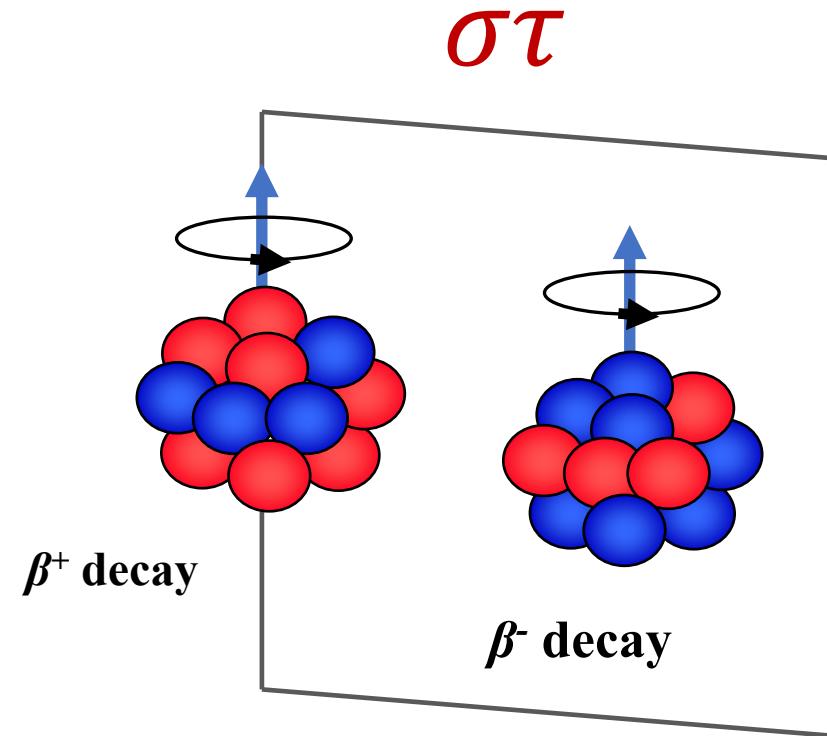
- ✓ ^{22}O , ^{24}O 是双幻核
- ✓ 预言 ^{22}Si , ^{24}S 也是双幻核
- ✓ ^{22}Si 中存在较大 MED 值

- ✓ $^{52}\text{Ca}(N=32)$, $^{54}\text{Ca}(N=34)$ 是双幻核
- ✓ 预言 $^{52}\text{Ge}(Z=32)$, $^{54}\text{Se}(Z=34)$ 也是双幻核

H. H. Li, [J.G. Li](#),* M. R. Xie, W. Zuo, PLB(2025)

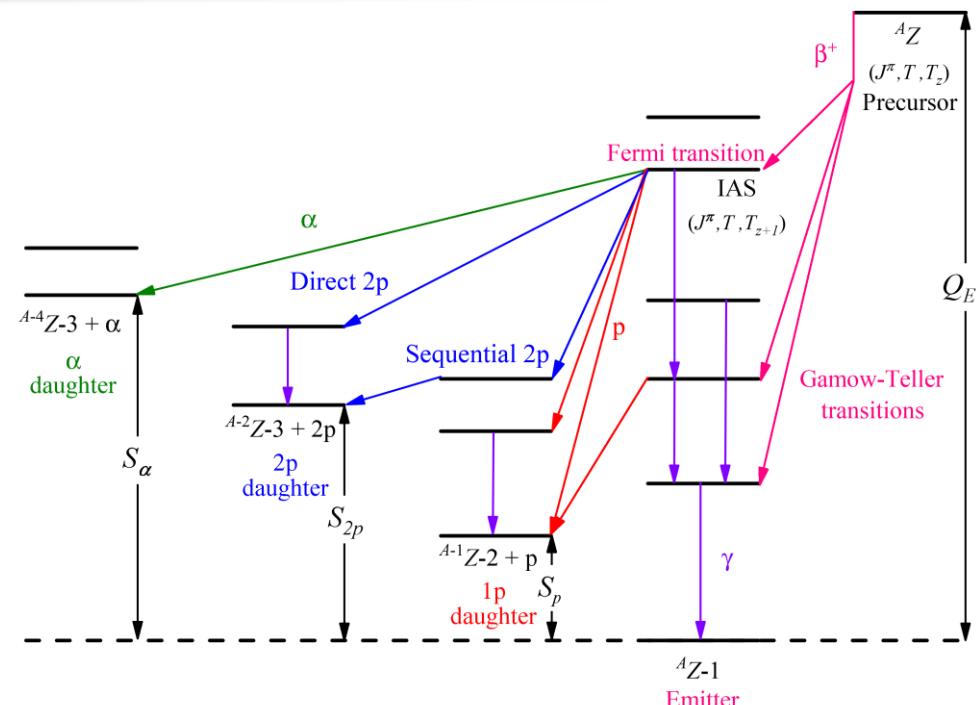
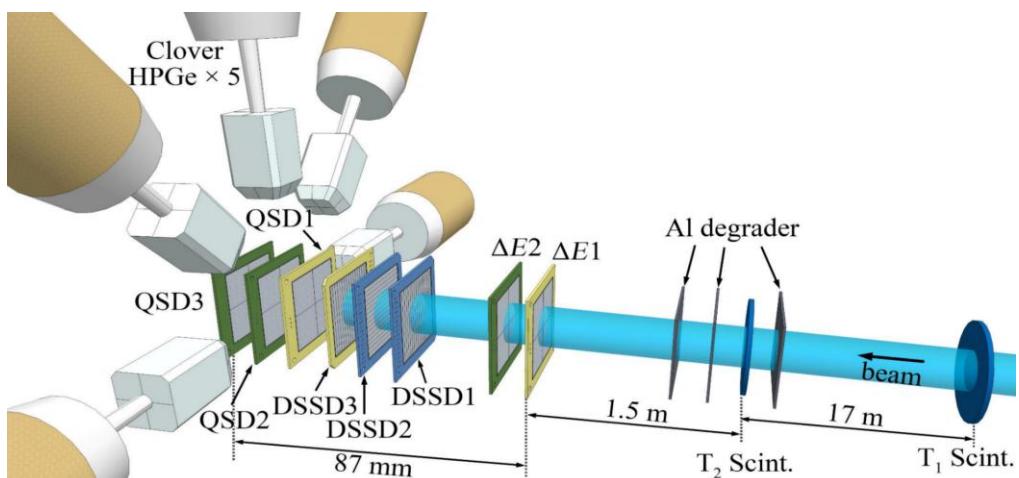
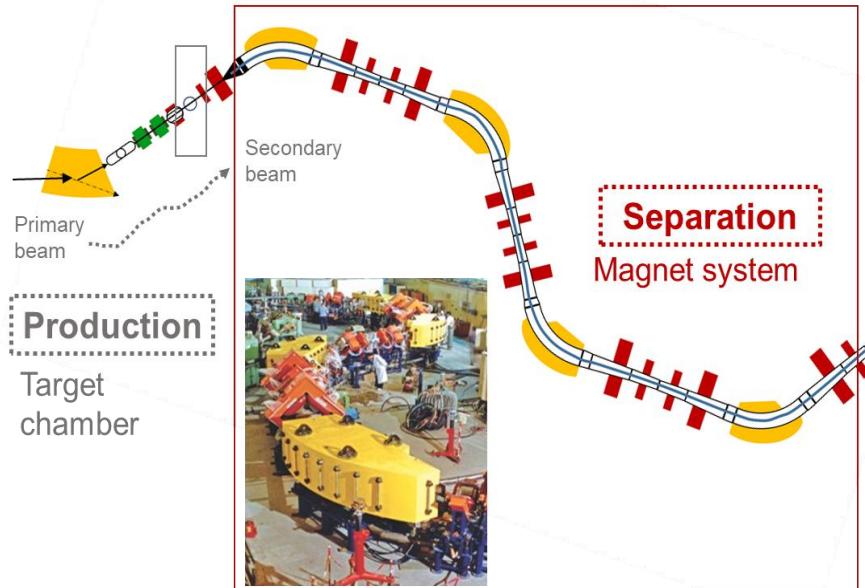
第一性原理计算探究

镜像原子核 β 衰变中的同位
旋对称性破缺



mirror nuclei
exchange the proton and neutron number

近物所 β 衰变实验工作



PHYSICAL REVIEW LETTERS 125, 192503 (2020)

PHYSICAL REVIEW LETTERS 129, 242502 (2022)

Editors' Suggestion

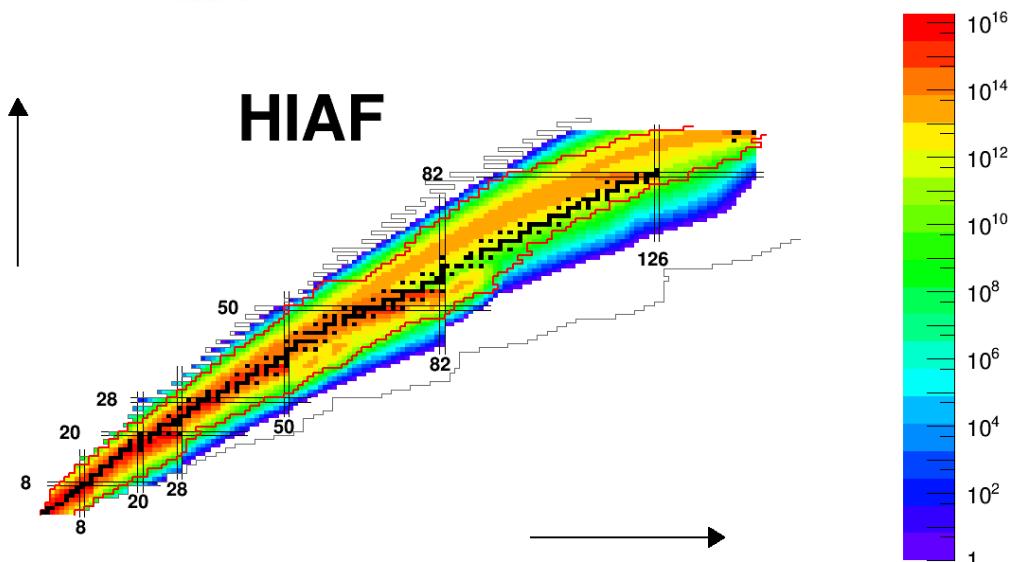
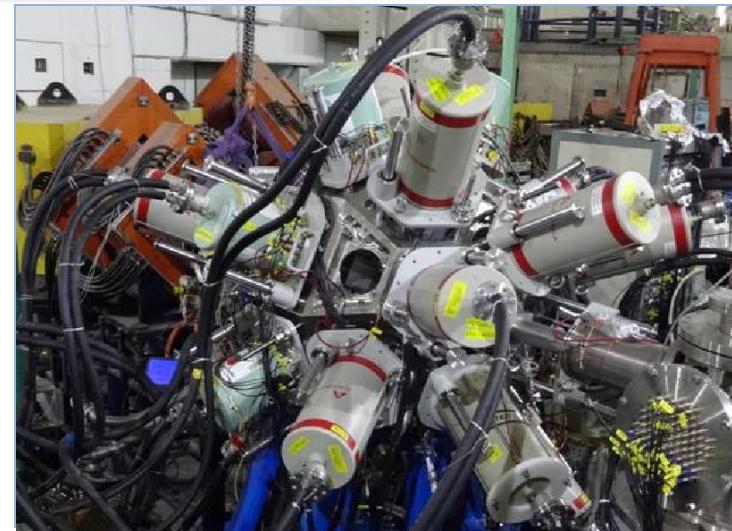
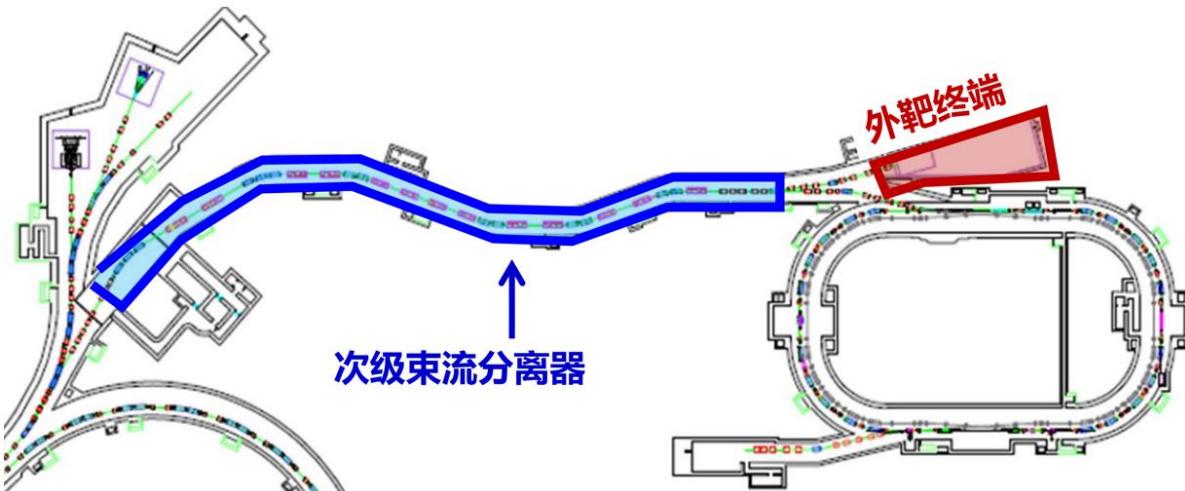
Large Isospin Asymmetry in $^{22}\text{Si}/^{22}\text{O}$ Mirror Gamow-Teller Transitions Reveals the Halo Structure of ^{22}Al

J. Lee (李晓菁),^{1,*} X. X. Xu (徐新星),^{1,2,3,4,5,†} K. Kaneko (金子和也),⁶ Y. Sun (孙扬),^{7,2,3,‡} C. J. Lin (林承键),^{3,8,§} L. J. Sun (孙立杰),^{3,7,9} P. F. Liang (梁鹏飞),¹ Z. H. Li (李智煥),¹⁰ J. Li (李晶),¹⁰ H. Y. Wu (吴鸿毅),¹⁰ D. Q. Fang (方德清),^{11,12} J. S. Wang (王建松),^{2,4,13} Y. Y. Yang (杨彦云),^{2,4} C. X. Yuan (袁岑溪),¹⁴ Y. H. Lam (蓝乙华),² Y. T. Wang (王廷玉),^{12,15} K. Wang (王康),^{2,12} J. G. Wang (王建国),² J. B. Ma (马军兵),² J. J. Liu (刘嘉健),^{1,2} P. J. Li (李朋杰),¹ Q. Q. Zhao (赵青青),¹ L. Yang (杨磊),³ N. R. Ma (马南茹),³ D. X. Wang (王东翔),³ F. P. Zhong (钟福鹏),³ S. H. Zhou (周善豪),³ F. Yang (杨峰),³ H. M. Jia (贾会明),³ P. W. Wen (温培威),³ M. Pan (潘敏),^{3,10} H. L. Zang (臧宏亮),¹⁰ X. Wang (王翔),¹⁰ C. G. Wu (武晨光),¹⁰ D. W. Luo (罗迪雯),¹⁰ H. W. Wang (王宏伟),¹² C. Li (李琛),¹² C. Z. Shi (施晨钟),¹² M. W. Nie (聂茂武),¹² X. F. Li (李秀芳),¹² H. Li (李贺),¹² P. Ma (马朋),² Q. Hu (胡强),² G. Z. Shi (石国柱),² S. L. Jin (金仕纶),² M. R. Huang (黄美容),² Z. Bai (白真),² Y. J. Zhou (周远杰),² W. H. Ma (马维虎),² F. F. Duan (段芳芳),^{17,2} S. Y. Jin (金树亚),^{2,4} Q. R. Gao (高祺锐),² X. H. Zhou (周小红),^{2,4,5} Z. G. Hu (胡正国),^{2,4,5} M. Wang (王猛),^{2,4,5} M. L. Liu (柳敏良),^{2,4} R. F. Chen (陈若富),^{2,4} and X. W. Ma (马新文)²

Observation of a Strongly Isospin-Mixed Doublet in ^{26}Si via β -Delayed Two-Proton Decay of 2p

J. J. Liu (刘嘉健),¹ X. X. Xu (徐新星),^{1,2,3,4,5,*} L. J. Sun (孙立杰),^{6,7,†} C. X. Yuan (袁岑溪),⁸ K. Kaneko (金子和也),⁹ Y. Sun (孙扬),^{6,7} P. F. Liang (梁鹏飞),² H. Y. Wu (吴鸿毅),¹⁰ G. Z. Shi (石国柱),¹ C. J. Lin (林承键),^{3,11} J. Lee (李晓菁),² S. M. Wang (王思航),^{12,13} C. Qi (齐元冲),¹⁴ J. G. Li (李健国),¹ H. H. Li (李红惠),¹ Lat Samy Xayavong, ¹⁵ Z. H. Li (李智煥),¹⁰ P. J. Li (李朋杰),¹ Y. Y. Yang (杨彦云),¹⁶ H. Jian (简惠),¹ Y. F. Gao (高雨帆),¹⁴ R. Fan (范锐),^{1,4} S. X. Zhu (查思贤),^{1,4} F. C. Dai (戴凡超),^{1,4} H. F. Zhu (朱浩锐),^{1,4} J. H. Li (李金海),^{1,4} Z. F. Chang (常志芳),^{1,4} S. L. Qin (秦淑莲),^{1,4} Z. Z. Zhang (张朝展),^{1,4} B. S. Cai (蔡博帅),⁸ R. F. Chen (陈若富),¹ J. S. Wang (王建松),^{1,6,11} D. X. Wang (王东翔),^{1,11} F. F. Duan (段芳芳),^{1,18} Y. H. Lam (蓝乙华),^{1,4} P. Ma (马朋),¹ Z. H. Gao (高志高),^{1,10} Q. Hu (胡强),¹ Z. Bai (白真),¹ J. B. Ma (马军兵),¹ J. G. Wang (王建国),¹ C. G. Wu (武晨光),¹⁰ D. W. Luo (罗迪雯),¹⁰ Y. Jiang (蒋颖),¹⁰ Y. Liu (刘洋),¹⁰ D. S. Hou (侯东升),^{1,4} R. Li (李锐),^{1,4} N. R. Ma (马南茹),³ W. H. Ma (马维虎),^{1,12} G. M. Yu (余功明),^{1,19} D. Patel, ^{1,20} S. Y. Jin (金树亚),^{1,4} Y. F. Wang (王煜峰),^{1,21} L. Y. Hu (胡力元),¹⁹ X. Wang (王翔),¹⁰ H. L. Zang (臧宏亮),¹⁰ Q. Hu (胡强),¹⁰ K. L. Wang (王凯龙),¹ B. Ding (丁兵),¹ Q. Q. Zhao (赵青青),² L. Yang (杨晶),^{1,3} P. W. Wen (温培威),³ F. Yang (杨峰),³ H. M. Jia (贾会明),³ G. L. Zhang (张高龙),^{22,23} M. Pan (潘敏),^{22,23} X. Y. Wang (王小雨),²² H. H. Sun (孙浩瀚),^{1,4,5} H. S. Xu (徐璐璐),^{1,4,5} X. H. Zhou (周小红),^{1,4,5} Y. H. Zhang (张玉虎),^{1,4,5} Z. G. Hu (胡正国),^{1,4,5} M. Wang (王猛),^{1,4,5} M. L. Liu (柳敏良),¹ H. J. Ong (翁惠仁),^{1,23} and W. Q. Yang (杨维青),¹

近物所 β 衰变实验工作-IMP-DRAGON



- 精细衰变谱学:**
- 衰变寿命
 - 衰变能量
 - 衰变纲图
 - 衰变分支比
 - 激发态能级寿命 (LaBr_3)

研究原子核结构、检验理论模型、寻找新物理，如新幻数、形状共存、集体性质等

关于 ^{22}Al 的质子晕性质存在很多争议

极大的 δ

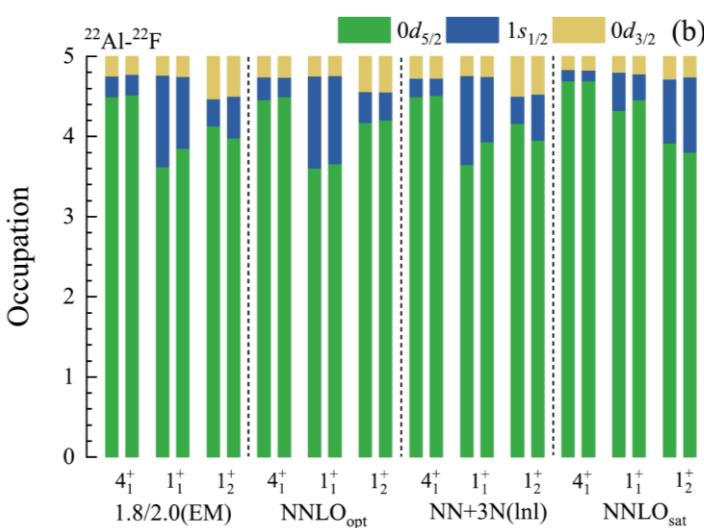
| $^{22}\text{Si} \rightarrow ^{22}\text{Al}$ $Q_{\text{EC}} = 13963 \text{ keV}$ | | | | | | $^{22}\text{O} \rightarrow ^{22}\text{F}$ $Q_{\beta^-} = 6490 \text{ keV}$ | | | | | |
|---|-------------|-----------|---------------|-------------|---------------|--|--------|---------------|--------------|---------------|-------------------------|
| Experiment | | | Calculations | | | Experiment | | | Calculations | | |
| I_i^π | E_x (MeV) | $br\%$ | $\log(f t^+)$ | E_x (MeV) | $\log(f t^+)$ | E_x (MeV) | $br\%$ | $\log(f t^-)$ | E_x (MeV) | $\log(f t^-)$ | Experiment Calculations |
| 1_1^+ | 0.905 | 5.3 (10) | 5.09 (9) | 1.12 [1.69] | 4.81 [4.52] | 1.625 | 29 (4) | 4.6 (1) | 1.98 [1.56] | 4.32 [4.56] | 209 (96) |
| 1_2^+ | 2.145 | 56.5 (51) | 3.83 (5) | 2.43 [2.55] | 3.71 [3.72] | 2.572 | 68 (6) | 3.8 (1) | 2.58 [2.51] | 3.72 [3.68] | 7 (28) |

J. Lee et al. PRL. 125.192503 (2020)

$$\delta = (|M_{\text{GT}}^-|^2 - |M_{\text{GT}}^+|^2) / |M_{\text{GT}}^+|^2$$

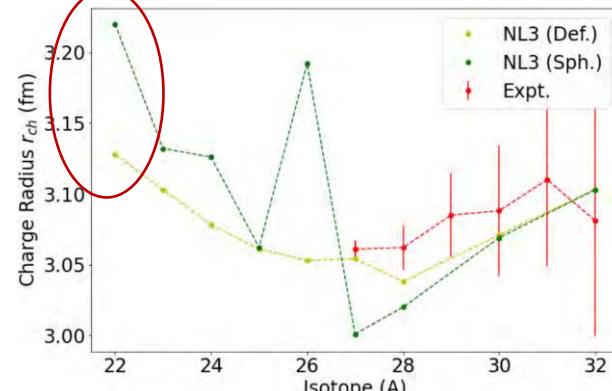
$$M_{\text{GT}}^\pm = \langle f | \mathcal{O}(\text{GT}_\pm) | i \rangle$$

实验测量



M. Z. Sun et al., CPC. 48.034002 (2024)

相对论平均场计算：形变密度计算
随着中子数的减小，电荷半径持续增大



Brooke Jayne Rickey, Doctoral dissertation

Data from R. N. Panda et al., Physics of Atomic Nuclei 81 (2018)

弱束缚

| Atom | Events | ME _{IMS} (keV) | ME _{AME20} (keV) | Δ ME (keV) | Δ ME _{th1} (keV) | Δ ME _{th2} (keV) | S_p/S_{2p} (keV) | $N_p(2s_{1/2})$ |
|------------------|--------|-------------------------|---------------------------|-------------------|----------------------------------|----------------------------------|---------------------|-----------------|
| ^{22}Al | 296 | 18103(10) | 18200(400) # | -97(400) | 125(69) | 134(16) | 90(10)/3825(10) | 0.246 |
| ^{23}Si | 7 | 23537(119) | 23950(500) # | -413(514) | 297(145) | 243(155) | 1855(119)/1945(119) | 0.575 |
| ^{26}P | 284 | 10998(11) | 10970(200) # | 28(200) | -129(69) | -205(12) | 118(15)/3531(11) | 0.722 |
| ^{27}S | 32 | 17418(39) | 17490(400) # | -72(400) | -515(104) | -516(41) | 869(41)/987(40) | 1.421 |
| ^{28}S | 189 | 4178(14) | 4070(160) | 108(160) | -181(69) | -209(15) | 2240(14)/3259(14) | 1.184 |
| ^{31}Ar | 188 | 11290(16) | 11330(200) # | -40(200) | -277(80) | -429(26) | 674(29)/194(21) | 1.760 |

Y. Yu et al., PRL. 133.2222501 (2024)

包括连续态耦合的粒子+转子模型：
出现大的形变时可形成基态质子晕。
S. E. Campbell et al., PRL. 132.152501 (2024)

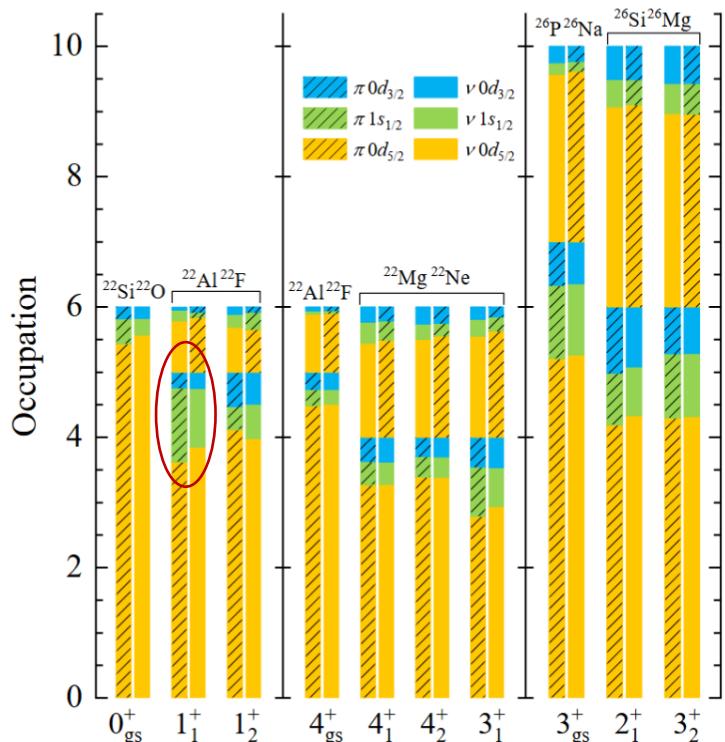
用相对论密度泛函理论对空间分布
进行计算：不支持 ^{22}Al 基态的晕结构。

P. Papakonstantinou et al., arXiv:2501.07759
(2025)

存在较大争议！

通过镜像核 β 衰变对称性破缺研究 ^{22}Al 质子晕性质

| $^{22}\text{Si} \rightarrow ^{22}\text{Al}$ | | | $^{22}\text{O} \rightarrow ^{22}\text{F}$ | | | δ (%) | | | MED (keV) | | | | |
|---|-----------------------|--------|---|------------|--------|--------------|---------|-----|-----------|-------|------|-------|-----------|
| J_i^π | $ M_{\text{GT}}^+ ^2$ | | $ M_{\text{GT}}^- ^2$ | | | Expt. | OB+TB | OB | Expt. | OB+TB | OB | Expt. | EM1.8/2.0 |
| 1_1^+ | 0.0310 (58) | 0.0837 | 0.1028 | 0.096 (20) | 0.4381 | 0.4656 | 209(96) | 424 | 353 | -720 | -472 | | |
| 1_2^+ | 0.563 (61) | 0.8008 | 0.8334 | 0.60 (12) | 0.6205 | 0.6175 | 7(28) | -23 | -26 | -427 | -396 | | |



$$\delta = (|M_{\text{GT}}^-|^2 - |M_{\text{GT}}^+|^2)/|M_{\text{GT}}^+|^2$$

$$M_{\text{GT}}^\pm = \langle f || \mathcal{O}(\text{GT}_\pm) || i \rangle$$

Halo-like structure



Large MED
Large δ

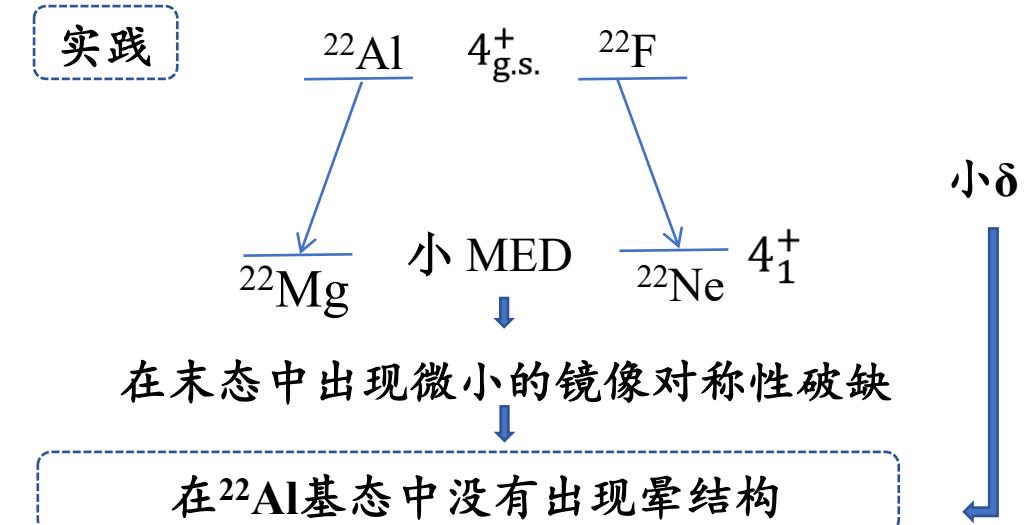
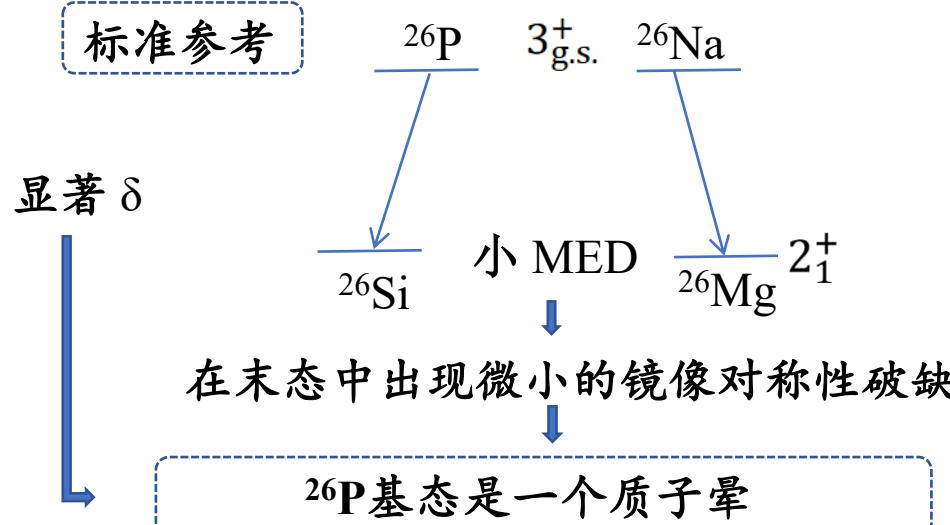
我们的结果支持一个类似质子晕的结构
存在于 ^{22}Al 非束缚激发态 1_1^+ 中。

L. Y. Shen, M. R. Xie, Q. Yuan and J. G. Li*, submitted to PRC

通过镜像对称性破缺研究 ^{22}Al 质子晕性质



| J_i^π | $ M_{\text{GT}}^+ ^2$ | | | $ M_{\text{GT}}^- ^2$ | | | δ (%) | | MED (keV) | |
|--|-----------------------|-----------|--------|-----------------------|--------|-----------|--------------|-----------|-----------|-----------|
| | Expt. | EM1.8/2.0 | Expt. | EM1.8/2.0 | Expt. | EM1.8/2.0 | Expt. | EM1.8/2.0 | Expt. | EM1.8/2.0 |
| $^{26}\text{P}/^{26}\text{Na} \rightarrow ^{26}\text{Si}/^{26}\text{Mg}$ | 2_1^+ | 0.3630 | 0.2322 | 0.5272 | 0.4617 | 46(13) | 99 | -13(16) | -30 | |
| | 3_2^+ | 0.0692 | 0.0470 | 0.1288 | 0.1565 | 86(86) | 233 | -165(20) | -68 | |
| $^{22}\text{Al}/^{22}\text{F} \rightarrow ^{22}\text{Mg}/^{22}\text{Ne}$ | 4_1^+ | | 0.0283 | 0.0066 | 0.0196 | | -31 | -49.2 | 72 | |
| | 4_2^+ | 0.4160 | 0.5869 | 0.5586 | 0.8553 | 34.3 | 46 | -229.4 | -237 | |
| | 3_1^+ | 0.1316 | 0.2229 | 0.1884 | 0.3824 | 43.2 | 72 | -188.1 | -285 | |

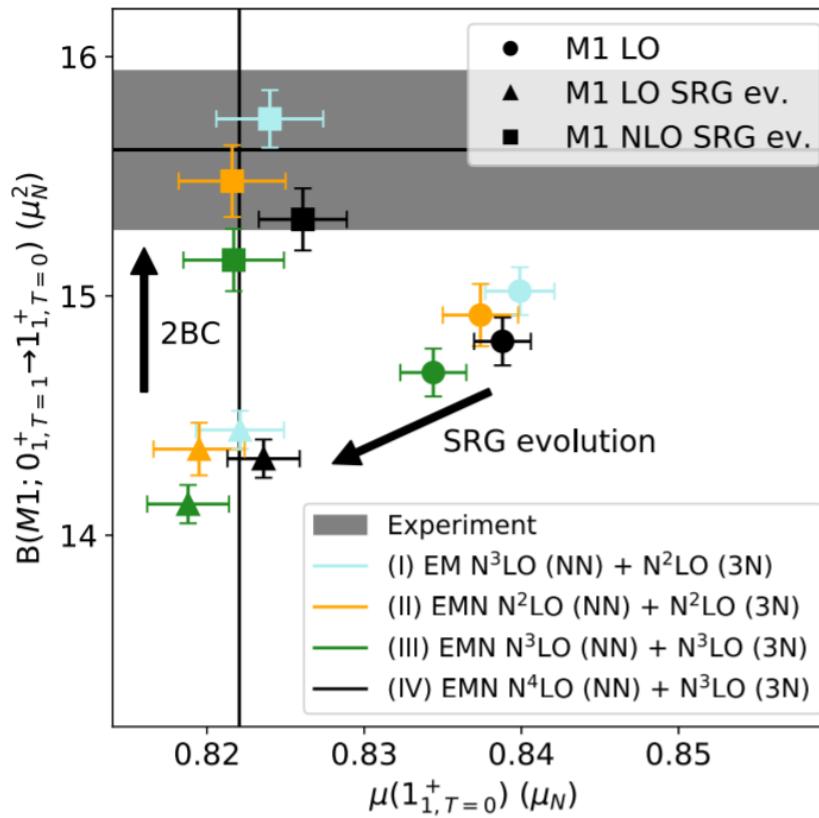


^{22}Al 基态不是一个质子晕态

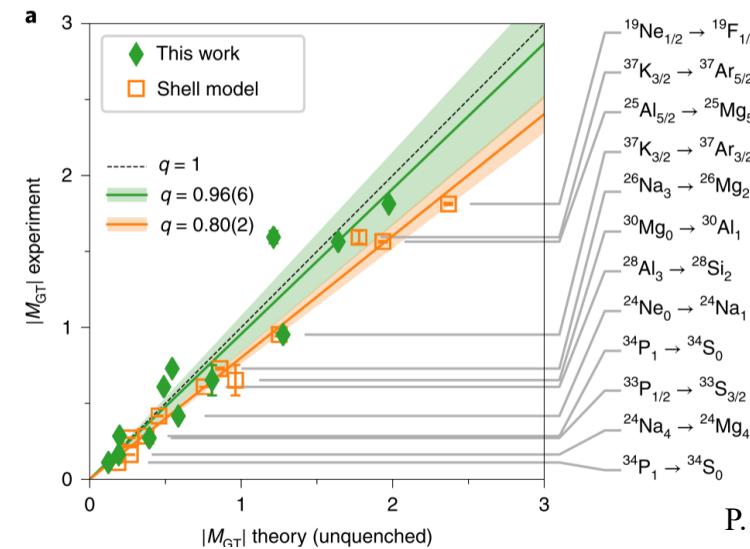
L. Y. Shen, M. R. Xie, Q. Yuan and J. G. Li*, submitted to PRC

两体流对电磁观测量与GT跃迁的修正

□ 更准确地描述磁矩与M1跃迁

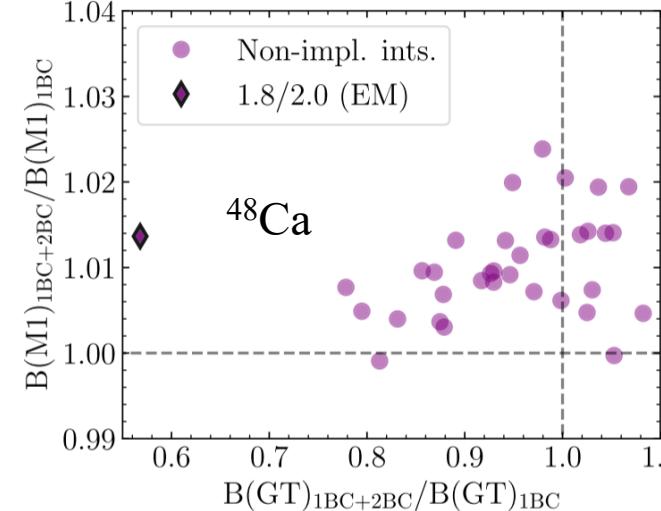


U. Friman-Gayer et al., PRL 126, 102501 (2021)



P. Gysbers et al., Nature Physics 15, 428–431 (2019)

□ 有助于解决GT跃迁中的 quenching puzzle



C. Bräse et. al., arXiv:2504.08711

□ 2BC对M1和GT跃迁的不同修正效果

手征有效场论两体流简介

手征有效场论以核子和 π 介子为自由度，考虑低能 QCD 的所有基本对称性，并按照 Q/Λ_χ 的幂次展开，其中 Q 为动量（一般取 π 介子质量）， Λ_χ 为手征对称性破缺的能标（一般取 ρ 介子质 $\sim 1\text{GeV}$ ）。

- 核力，核流的逐阶展开

原子核流算符：描述核子与外部探针（如光子或弱场）的相互作用的算符
矢量流，轴矢流，.....

一体流算符：描述单个核子与外部电磁或弱场的相互作用。

两体流算符：描述核子之间，以及与外部电磁或弱场的相互作用。

Table 1 Chiral expansion of the nuclear electromagnetic current operator up to $N^3\text{LO}$. LO, NLO, NNLO and $N^3\text{LO}$ refer to chiral orders Q^{-3} , Q^{-1} , Q^0 and Q , respectively. The single-nucleon contributions are given in Eqs. (2.7) and (2.16) of [149]

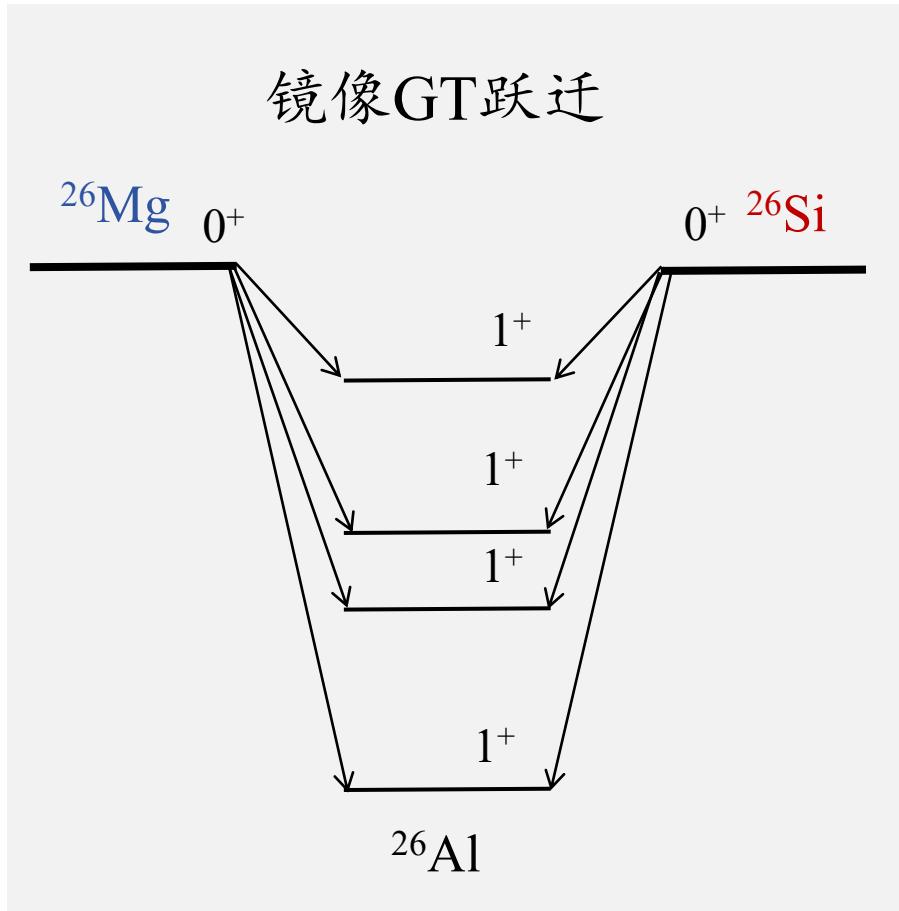
| Order | Single-nucleon | Two-nucleon | Three-nucleon |
|----------------|---|--|---------------|
| LO | — | — | — |
| NLO | $V_{1N:\text{static}}$ $+V_{1N:1/m}$ | $V_{2N:1\pi}$, Eq. (78) | — |
| NNLO | $V_{1N:\text{static}}$ | — | — |
| $N^3\text{LO}$ | $V_{1N:\text{static}}$ $+V_{1N:1/m}$ $+V_{1N:\text{off-shell}}$ | $V_{2N:1\pi}$, Eq. (82) $+V_{2N:2\pi}$, Eq. (299) $+V_{2N:\text{cont}}$, Eq. (89) | — |

Table 3 Chiral expansion of the nuclear axial current operator up to $N^3\text{LO}$. LO, NLO, NNLO and $N^3\text{LO}$ refer to chiral orders Q^{-3} , Q^{-1} , Q^0 and Q , respectively

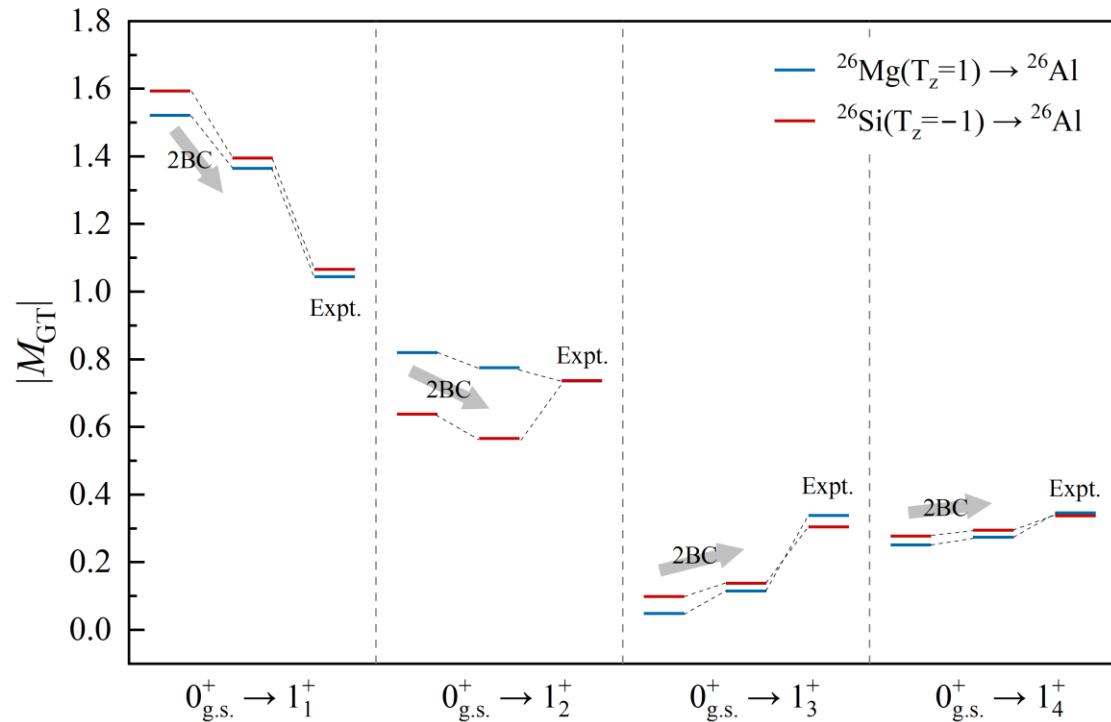
| Order | Single-nucleon | Two-nucleon | Three-nucleon |
|----------------|--|---|---|
| LO | $A_{1N:\text{static}}$, Eq. (102) | — | — |
| NLO | $A_{1N:\text{static}}$, Eq. (105) | — | — |
| NNLO | — $+A_{2N:\text{cont}}$, Eq. (141) | $A_{2N:1\pi}$, Eq. (127) | — |
| $N^3\text{LO}$ | $A_{1N:\text{static}}$, Eq. (114) $+A_{1N:1/m, \text{UT}'}$, Eq. (109) $+A_{1N:1/m^2}$, Eq. (111) | $A_{2N:1\pi}$, Eq. (129) $+A_{2N:1\pi, \text{UT}'}$, Eq. (136) $+A_{2N:1\pi, 1/m}$, Eq. (133) $+A_{2N:2\pi}$, Eq. (138) $+A_{2N:\text{cont}, \text{UT}'}$, Eq. (145) $+A_{2N:\text{cont}, 1/m}$, Eq. (144) | $A_{3N:\pi}$, Eq. (148) $+A_{3N:\text{cont}}$, Eq. (151) |

Hermann Krebs, Eur. Phys. J. A 56, 234 (2020)

探究T=1中镜像核GT跃迁差异及两体流贡献



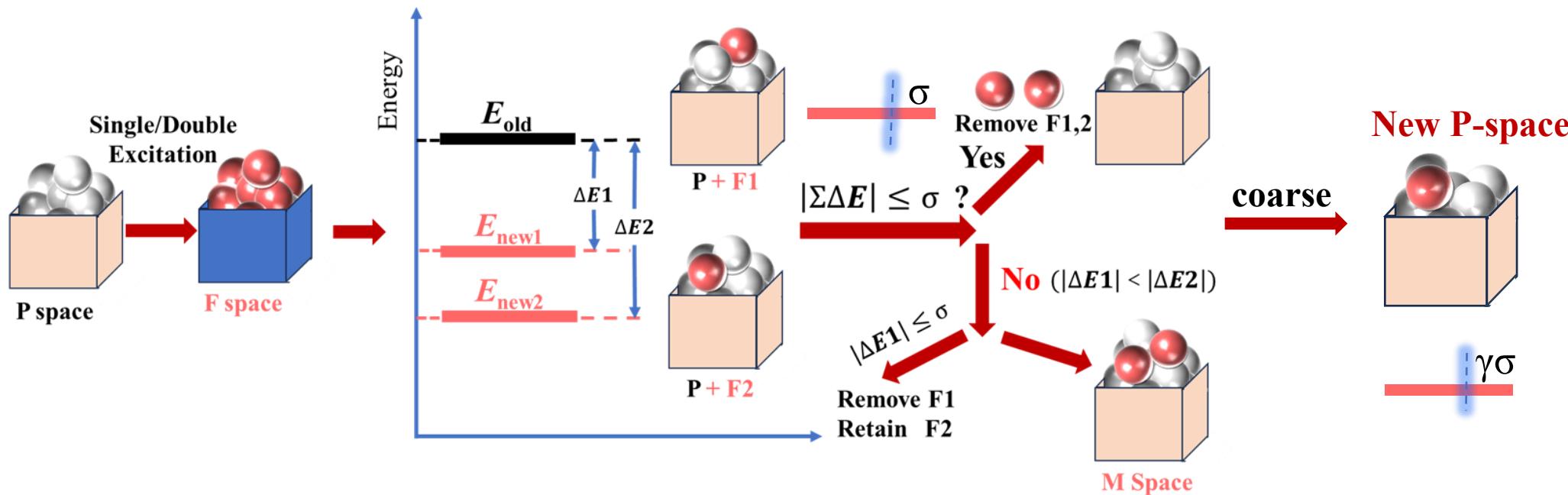
➤ 初步计算结果



- 镜像 $|M_{\text{GT}}|$ 基本一致；
- 两体流对理论计算结果有显著改善。

未来将重点关注 β 衰变中的对称性破缺，探究同位旋非守恒力的影响；

什么是Adaptive Configuration Interaction方法?



Calculation ΔE :

对 F 中每个 SD 都有：

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \langle \Psi_P^{(1)} | \hat{H} | \Psi_P^{(1)} \rangle & \langle \Psi_P^{(1)} | \hat{H} | \Phi_F^{(k)} \rangle \\ \langle \Phi_F^{(k)} | \hat{H} | \Psi_P^{(1)} \rangle & \langle \Phi_F^{(k)} | \hat{H} | \Phi_F^{(k)} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_P & V \\ V^* & E_F \end{pmatrix}$$

对角化 2×2 矩阵，得到两个本征值： λ_1 和 λ_2 ($\lambda_1 \leq \lambda_2$)；选择其中与 E_p 差异最小的得到 $\Delta E = \lambda - E_p$ ，此处称为 ϵ

Chose important SDs:

每个 SD 都有对应的贡献 ϵ ，将 SD 按照 $|\epsilon|$ 降序排序；从小往大累加 $|\epsilon|$ 至规定的阈值 σ ，将这些 SD 舍弃：

$$\sum_{\Phi_I \in F^{(k)} \setminus Q^{(k)}} |\epsilon(\Phi_I)| \leq \sigma.$$

Removed $\Sigma \epsilon = PT$

Coarsening wave function:

对角化总模型空间得到的本征态：

$$|\Psi_P^{(k)}\rangle = \sum_{\mu=1}^{d_k} C_\mu |\Phi_\mu\rangle$$

保留前 $\sum |C_\mu|^2 \geq 1 - \gamma * \sigma$ 的 SDs；作为新的 P 空间进行迭代直至收敛

使用二阶微扰的思想计算激发空间对初始空间的贡献，实现重要组态的筛选

Jeffrey B. Schriber, et al., J. Chem. Phys. 144, 161106 (2016)

Jeffrey B. Schriber, et al., J. Chem. Theory Comput. 13, 5354-5366, (2017)

- 我们使用ACI在pf-shell进行中等规模的计算。 ^{52}Fe : 6p6n, $D=109954620$, 1×10^8

当只存在 σ 截断, 不使用粗粒化时:

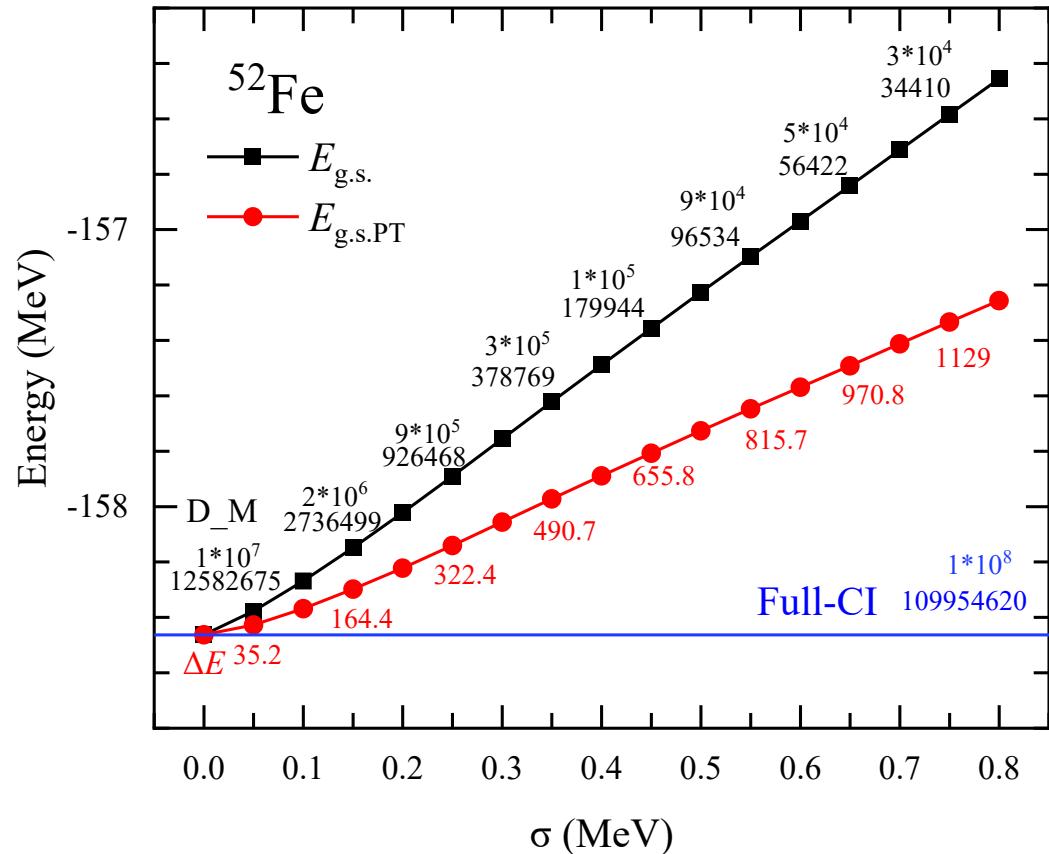
全空间为 1×10^8 , 经测试:

我们通过 1×10^7 个斯莱特行列式, 在 PT 修正之后得到能量损失 $\Delta E = 35.2 \text{ keV}$ 的收敛解。

通过 1×10^5 个斯莱特行列式, 在 PT 修正之后得到能量损失 $\Delta E = 655.8 \text{ keV}$ 的收敛解。

全空间斯莱特行列式较多, 由于被截断斯莱特行列式过多产生的突变并没有出现。

但在初始 $\sigma = 0.05 \text{ MeV}$ 时出现了非线性的结果



I. ^{52}Fe 基态不同截断参数下的维度变化

对于中等维度的原子核体系, 截断效果较为显著

初步进展

➤ 我们使用ACI在pf-shell进行中等规模的计算。 ^{56}Ni : 8p8n, $D=1087455228$, 1×10^9

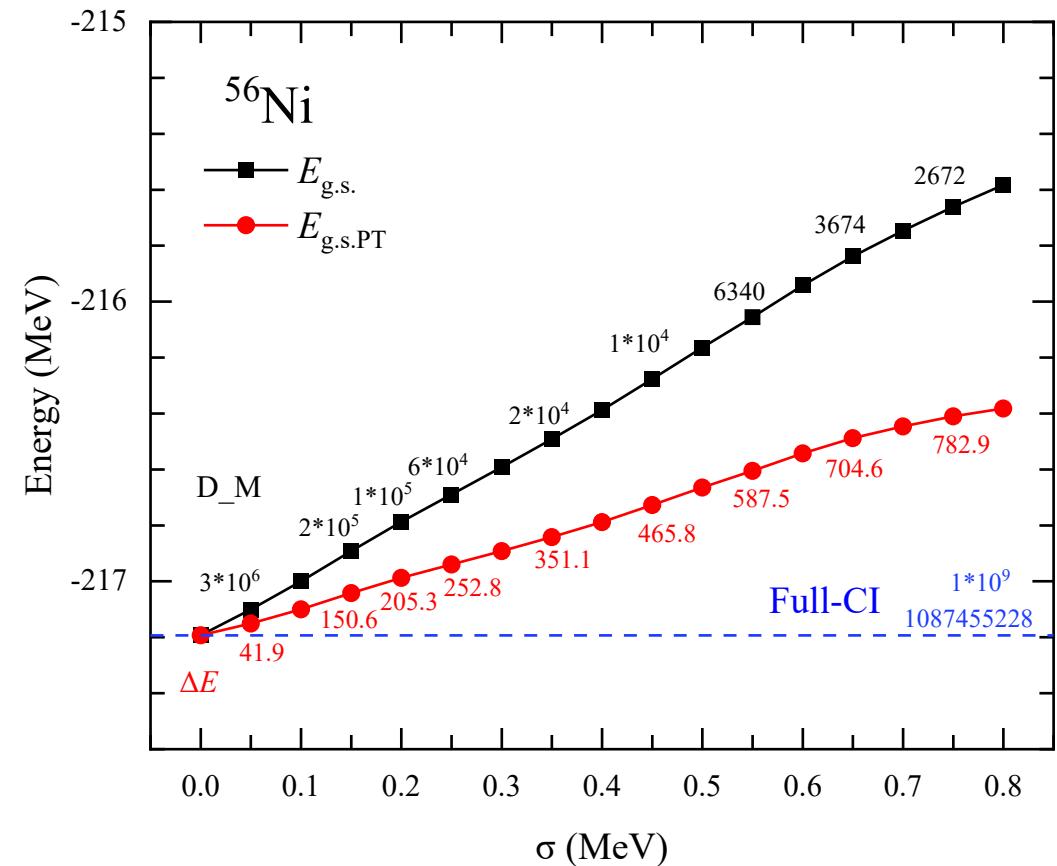
当只存在 σ 截断, 不使用粗粒化时:

全空间为 1×10^9 , 这里的基态精确能量来自于 k-shell 无截断的结果。

经测试:

我们通过 3×10^6 个斯莱特行列式, 在 PT 修正之后得到能量损失 $\Delta E = 41.9 \text{ keV}$ 的收敛解。

通过 1×10^5 个斯莱特行列式, 在 PT 修正之后得到能量损失 $\Delta E = 205.3 \text{ keV}$ 的收敛解。

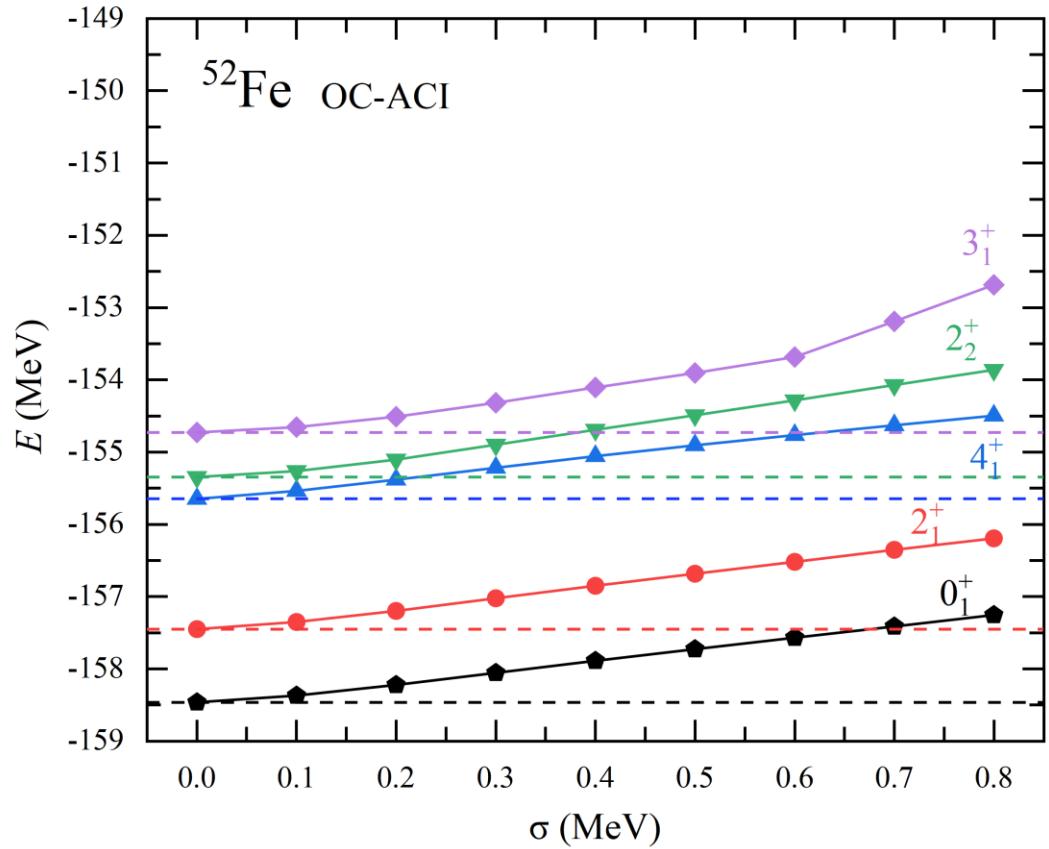


II. ^{56}Ni 基态不同截断参数下的维度变化

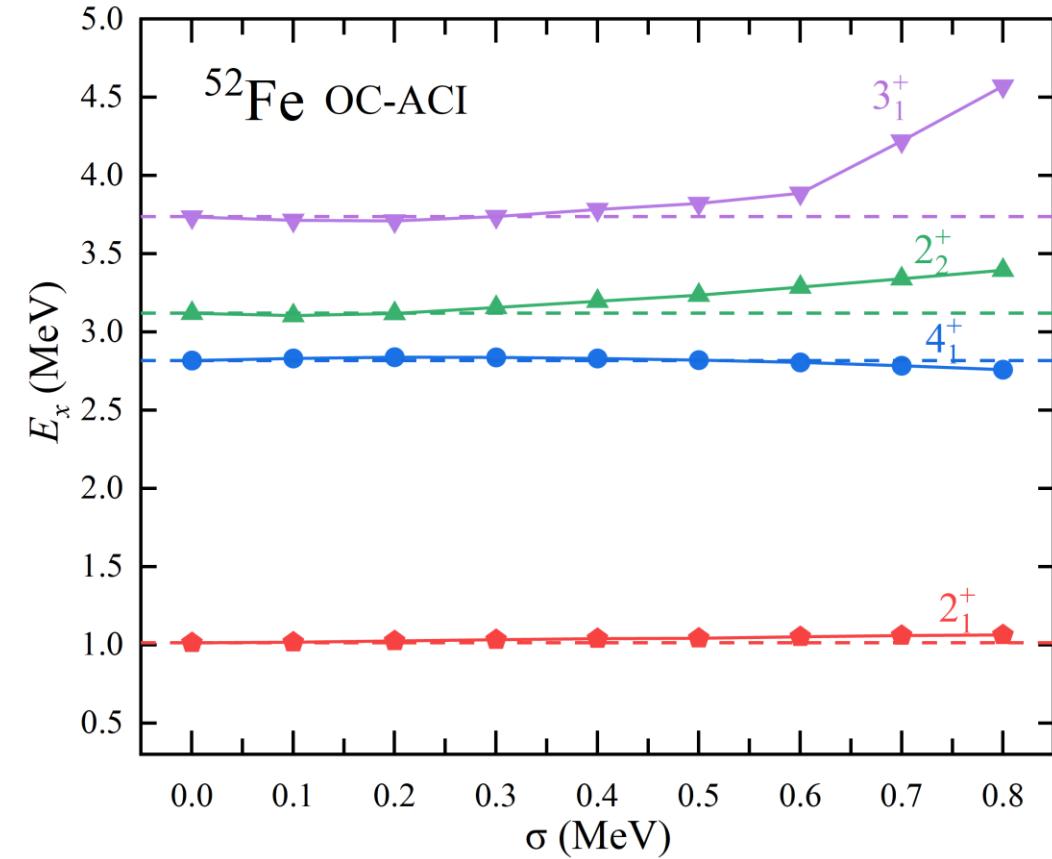
对于更大维度的原子核体系, 截断效果更显著

初步进展

- 我们计算了 ^{52}Fe 的前五个态来评估 ACI 方法对激发态的计算情况：



X. ^{52}Fe 基态和低激发态计算结果



XI. ^{52}Fe 低激发态激发能计算结果

小截断范围内的激发态结果依旧呈现线性趋势

总结

1. 第一性原理计算探究镜像原子核能级差异

- ✓ Thomas-Ehrman shift主要是由弱束缚的价质子占据 $1s_{1/2}$ 导致；
- ✓ 同位旋对称性破缺效应导致 ^{22}Si 的 2^+ 激发能较低；
- ✓ 同位旋对称性破缺对丰质子原子核壳结构演化的影响；

2. 第一性原理计算探究镜像原子核 β 衰变中的同位旋对称性破缺

- ✓ ^{22}Al 基态不具有晕核的特性；
- ✓ 镜像原子核 β 衰变中同位旋对称性。

3. 自适应重要组态选择壳模型

请各位老师批评指正！