

# 原子核结构的相对论第一性原理研究\*

孟杰<sup>†</sup> 张开元

(北京大学物理学院 北京 100871)

2021-10-08 收到

<sup>†</sup> email: mengj@pku.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20211201

## Relativistic ab initio density functional theory for nuclear structure

MENG Jie<sup>†</sup> ZHANG Kai-Yuan

( School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China )

**摘要** 过去几十年中, 原子核物理的相对论密度泛函理论得到很大发展, 可以成功地描述各种原子核现象。文章阐述在相对论框架下研究原子核多体问题的必要性, 介绍原子核物理中相对论密度泛函理论的基本概念, 回顾相对论密度泛函理论在描述原子核基态、手征转动和动力学过程等方面的应用, 讨论基于原子核物理的相对论第一性原理研究, 即完全自洽的相对论 Brueckner—Hartree—Fock 理论, 构建微观普适的密度泛函的基本思想。

**关键词** 原子核结构, 相对论密度泛函理论, 相对论第一性原理计算, 相对论 Brueckner—Hartree—Fock 理论

**Abstract** Over the past decades, the relativistic density functional theory has been greatly developed and successfully applied to a variety of nuclear phenomena. We will briefly introduce the concept of this theory in nuclear physics, and review a few important applications such as studies on nuclear ground state properties and chiral rotations, as well as nuclear dynamics. Moreover, the ideas to build a microscopic and universal density functional based on the fully self-consistent relativistic Brueckner—Hartree—Fock calculations are discussed.

**Keywords** nuclear structure, relativistic density functional theory, relativistic ab initio theory, relativistic Brueckner—Hartree—Fock theory

## 1 原子核是相对论体系还是非相对论体系?

原子核是由质子和中子组成的量子多体系统。无论从1911年卢瑟福提出原子有核, 还是从更早一些放射性的发现算起, 原子核物理研究都已走过了百年的历程。但是, 关于原子核是相对论还是非相对论体系, 至今还有争议。

诺贝尔奖获得者玻尔和莫特松在其经典教科书中指出<sup>[1]</sup>, 根据费米气体模型, 核子的动能大约为40 MeV, 远小于其约1000 MeV的质量, 相对论效应很小, 因此可以将原子核看作非相对论体系。根据实验观测, 从原子核中移走核子需要的能量大约为10 MeV, 从而估计出原子核的平均势大约为-50 MeV, 以此平均势为基础建立的原子核壳模型自然是非相对论的模型, 原子核当然也被视为非相对论体系。

\* 国家重点研发计划(批准号: 2017YFE0116700, 2018YFA0404400)、国家自然科学基金(批准号: 11935003, 11875075, 11975031, 12070131001)、北京大学核物理与核技术国家重点实验室(编号: NPT2020ZZ01)资助项目

这个原子核被视为非相对论体系的结论，是在假设原子核体系服从非相对论量子力学的基础上提出的。而且，在非相对论理论中，为了正确描述特别稳定的原子核对应的核子数，即幻数，需要唯象地引入自旋轨道相互作用。而相对论理论则可以自然地给出自旋轨道相互作用。

随着核物理研究的深入，越来越多的证据更倾向于将原子核视为相对论体系<sup>[2]</sup>：

(1) 核子结合成原子核会放出能量，即质量亏损，而质量亏损就是一个相对论效应；

(2) 相对论协变性的要求可以减少模型参数，使模型有更好的预言能力，满足强相互作用的基本理论，即量子色动力学的精神；

(3) 在非相对论理论中，核子在约为  $-50 \text{ MeV}$  的平均势场中运动。而在相对论理论中，核子满足的运动方程中的标量势和矢量势约为  $500 \text{ MeV}$  量级，其相对论效应不可忽略；

(4) 相对论理论自然给出自旋轨道相互作用。非相对论理论需要唯象地引入自旋轨道相互作用；

(5) 长期存在的赝自旋对称性起源之谜，以及与之相应的反核子谱的自旋对称性，只能在相对论理论框架下得以解释；

(6) 对于时间反演对称性破缺的体系，奇时间势场在相对论框架下由矢量势的空间分量自然给出，而在非相对论框架下则需要引入额外的参数；

(7) 在对无限大核物质的第一性原理研究中，相对论 Brueckner—Hartree—Fock (RBHF) 方法可以较好地给出饱和点性质，而非相对论理论需要唯象地引入三体相互作用才能给出合理的描述；

(8) 相对论密度泛函理论在实际应用中有更好

的普适性，适用于描述更大范围的原子核性质。

基于以上原因，我们有足够的理由发展相对论理论来研究原子核性质。

## 2 原子核结构的相对论密度泛函

如何从强相互作用理论出发，对原子核的单核子运动和集体运动进行微观和自洽的统一描述，是核物理学家需要解决的问题。特别是，如何基于核子—核子相互作用，研究原子核的结构和反应，复杂原子核结构中出现的规律和简单模式，以及原子核性质随质量、同位旋、角动量和温度等的演化。

密度泛函理论最初在研究库仑系统时被提出，如今广泛应用于处理复杂的量子多体问题。它的基础是霍恩伯格—科恩 (Hohenberg—Kohn) 定理<sup>[3]</sup>。该定理指出，一个外场中的多粒子体系的基态能量，可以写为该体系密度的一个普适的泛函。密度泛函理论的实用性，取决于所构建的密度泛函是否准确。Kohn 和 Sham 提供了构建能量密度泛函的一个实用方法<sup>[4]</sup>。该方法将有相互作用的多体系统，映射到虚构的无相互作用系统，并假设该无相互作用系统的基态密度等于真实的基态密度，如图 1 所示。对该无相互作用系统应用 Hohenberg—Kohn 定理，可以导出一个自洽求解的单粒子运动方程。形式上，Kohn—Sham 密度泛函理论的求解，与 Hartree—Fock 方法类似。但是，它仅包括定域项，避免了处理复杂的非定域项。Hartree—Fock 理论中复杂的积分微分方程，被简化为简单的微分方程，即 Kohn—Sham 方程。密度泛函理论广泛地应用于化学、材料科学、凝聚态物理等领域。

在原子核物理中，密度泛函理论适用于描述核素图中几乎所有原子核的基态性质，是研究稳定原子核和远离稳定谷的奇特原子核的重要工具<sup>[5]</sup>。

库仑系统中，能量的密度泛函可以从库仑相互作用导出。原子核物理中的密度泛函理论是有效理论，原子核的基态能量是各种密度和流、以

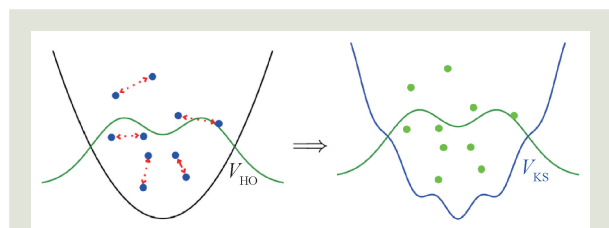


图 1 Kohn—Sham 密度泛函理论示意图。左图展示谐振子势场中的相互作用系统，右图展示 Kohn—Sham 势场中的无相互作用系统。两个系统的基态密度相同，由绿色实线表示<sup>[5]</sup>

及它们的梯度的泛函，通过拟合有限核的实验数据确定其中的参数。传统上，密度泛函理论在核物理中的应用，大多采用非相对论的形式。

与传统的非相对论原子核理论相比，相对论密度泛函理论从拉格朗日量出发，考虑了洛伦兹不变性，为构建有效核子—核子相互作用提供了更根本、更微观的方案。

在基于介子交换图像的相对论密度泛函理论中<sup>[6]</sup>，核子为狄拉克粒子，核子之间通过交换介子发生相互作用。交换的介子包括标量—同位旋标量、矢量—同位旋标量、标量—同位旋矢量和矢量—同位旋矢量等介子。为了对核物质和原子核表面性质进行合理描述，需要考虑核子—介子顶角的密度依赖性，即需要在拉格朗日量中引入非线性的介子自相互作用或者耦合参数的显式密度依赖。具体计算中，需要求解核子满足的狄拉克方程和介子满足的克莱因—戈尔登方程。由于涉及耦合的非线性微分积分方程组，求解颇为复杂。

利用核子之间的定域相互作用代替各个耦合道的介子交换，引入高阶耦合或者耦合参数的密度依赖性考虑介质效应，可导出基于点耦合相互作用的相对论密度泛函理论。由于避免了介子自由度，降低了求解的复杂性，易于推广进行超越平均场的计算，点耦合相对论密度泛函理论近年来得到了较快的发展。

基于介子交换和点耦合相互作用的相对论密度泛函理论，已成功地描述从有限原子核到无限大核物质，从稳定原子核到远离稳定谷的奇特原子核，从球形原子核到任意形状的原子核，从基态到激发态，从通常的核物质到具有奇异自由度的超核物质的性质。相对论密度泛函理论还被广泛用于研究致密星体的状态方程，以及天体环境下的核合成过程涉及到的重要核物理量。

现有的相对论密度泛函理论中，北京大学研究团队基于点耦合相互作用提出的PC-PK1 (PC是点耦合 point-coupling 的缩写，PK指北京大学，1是序号)<sup>[7]</sup>，给出了原子核质量最高精度的密度泛函描述，对原子核的基态性质描述取得了很大的成功。对于已有实验数据的575个偶偶原子核，

PC-PK1的描述精度达1.14 MeV。PC-PK1的成功之处在于，它正确地考虑了原子核性质的同位旋依赖性，很好地描述了球形原子核的质量。对于形变原子核，考虑动力学关联，可以进一步改善对原子核质量的描述。与之相比，一些密度泛函理论，由于没有正确描述原子核质量的同位旋依赖性，即使考虑动力学关联，也不能改善对原子核质量的整体描述。

除了描述基态性质，PC-PK1密度泛函理论还被推广用于描述原子核的激发态性质，例如磁转动、反磁转动、形状相变和手征转动等<sup>[2]</sup>。最近，有文献基于PC-PK1，在三维空间格点上，发展了不限制任何对称性的含时相对论密度泛函理论<sup>[8]</sup>，为研究原子核的动力学性质提供了新的途径。

### 3 原子核基态

自然界中稳定的原子核有244种，寿命大于十亿年的原子核有41种。通过对这些原子核的研究，建立了独立粒子壳模型和集体运动模型等原子核模型，构建了相应的核物理知识体系。自20世纪末起，随着稀有同位素大科学装置和相关探测设备的建造和运行，合成了大量远离稳定谷的原子核，也被称为奇特原子核。在这些原子核中，发现了许多与传统核物理知识相悖的新现象。例如，晕现象，即奇特原子核中出现的半径异常增大的现象<sup>[9]</sup>，对传统知识中的核物质不可压缩性提出了挑战；幻数的改变，即奇特原子核中传统幻数的消失和新幻数的出现，对传统的独立粒子壳模型提出了挑战。奇特原子核中的费米面接近连续谱阈值，部分核子处于弱束缚状态，对关联效应增强，能够将配对的核子散射到连续谱中。因此，研究奇特原子核性质必须考虑连续谱和核子配对等效应。

基于相对论密度泛函，利用博戈留波夫(Bogoliubov)准粒子变换考虑对关联，在坐标空间自洽求解准粒子运动方程，正确考虑连续谱效应，由此发展的相对论连续谱Hartree—Bogoliubov(RCHB)理论，微观自洽地描述了实验上发

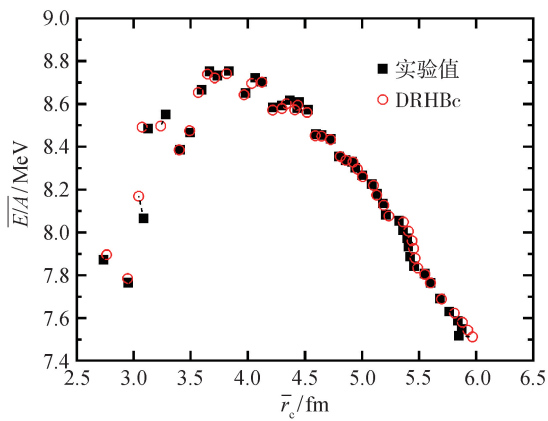


图2 根据文献[13]给出的计算方案, DRHBc理论计算的从氧到铜的每一个同位素链, 偶偶原子核的平均比结合能和平均电荷半径。实心方块表示实验值, 圆圈表示DRHBc理论的计算结果, 点线连接着同一个同位素链的实验和理论值

现的第一例晕现象, 揭示了连续谱对晕核的贡献, 在研究中等质量和重质量的奇特原子核时, 预言了由多个晕核子组成的巨晕现象<sup>[10]</sup>。基于RCHB理论, 利用PC-PK1密度泛函, 建立了迄今唯一考虑连续谱效应的RCHB原子核质量表<sup>[11]</sup>。

除了质子数和中子数都是幻数的原子核, 核素图中的大多数原子核, 形状都偏离球形。因此, 研究远离稳定谷的奇特原子核, 除了上面提到的连续谱和对关联效应, 还必须考虑形变自由度的影响。通过在坐标空间求解伍兹—萨克森(Woods—Saxon)势的狄拉克方程, 得到包含费米海和狄拉克海的单粒子空间, 构建完备的狄拉克Woods—Saxon基。利用正确考虑连续谱渐近行为的狄拉克Woods—Saxon基, 对原子核的密度和势场进行勒让德展开, 正确考虑轴对称形变、对关联和连续谱效应, 发展了微观自洽的形变相对论连续谱Hartree—Bogoliubov(DRHBc)理论<sup>[12]</sup>。基于DRHBc理论, 不仅预言了<sup>42,44</sup>Mg是形变晕核, 而且揭示了形变晕核中可能存在的形状退耦现象, 即核芯和晕核子部分具有不同的四极形变, 被认为是滴线附近原子核有趣的新现象之一。

DRHBc理论在RCHB理论的基础上考虑了形

变效应, 结合目前对原子核质量描述最为成功的相对论密度泛函PC-PK1, 有望构建包含连续谱和形变效应并且有预言能力的微观高精度原子核质量表。为此, 由北京大学发起, 联合韩国基础科学研究所、中国科学院理论物理研究所和香港大学等16个研究所和高校, 成立了DRHBc质量表合作组<sup>[13]</sup>。

目前, DRHBc质量表合作组已完成偶偶核的计算<sup>[13]</sup>。在质子数 $8 \leq Z \leq 120$ 范围内, 给出了2583个束缚偶偶原子核的质量。对于已有实验数据的638个偶偶核, DRHBc理论的描述精度为1.52 MeV, 是目前微观理论给出的最高精度之一。对于由上百个质量约为1000 MeV的核子组成的原子核, 精度已经高达 $10^{-5}$ 。如果考虑原子核的三轴形变自由度, 利用更微观的方法考虑动力学关联能, 有望进一步提高精度。对于已有电荷半径实验数据的369个偶偶原子核, DRHBc理论的描述精度达0.03 fm(1 fm= $10^{-15}$  m), 均方根偏差为0.70%。为了展示理论计算与实验值的整体符合程度, 图2给出了从氧到铜每一个同位素链, 偶偶原子核的平均比结合能

$$\overline{E/A} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \frac{E(Z, N_i)}{Z + N_i}$$

$$\overline{r_c} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m r_c(Z, N_i)$$

和相应的平均电荷半径。对于中重质量原子核, DRHBc理论很好地再现了实验结果。对Mg同位素链, 理论值和实验值有一定的偏差, 有望通过考虑三轴形变自由度和超越平均场效应解决。

为了进一步检验DRHBc理论的预言能力, 图3(a)给出了超重偶偶原子核计算结果与最新质量评估数据AME2020的偏差<sup>[14]</sup>。作为对比, 图3(b), (c)给出了高精度的宏观微观质量模型WS4<sup>[15]</sup>和FRDM<sup>[16]</sup>的相应结果。DRHBc理论对实验值的预言精度为0.635 MeV, 相应的WS4和FRDM精度分别为0.515 MeV和0.910 MeV。对全部实验和经验数据, DRHBc理论的预言精度为0.642 MeV, 相应的WS4和FRDM精度分别为1.360 MeV和2.831 MeV。由于DRHBc理论正确地描述了原子核质量的同位旋依赖性, 因此预言能力有更高的可靠性。

## 4 原子核的手征转动

手征对称性在自然界中广泛存在，如人的左右手、海螺壳的螺旋性、化学分子的手性等。几何学中，如果一个图像与其镜像不同，或者不能通过转动或平移操作，使其与镜像重合，则称该图像是手性的，或者说具有手征性。化学中，手性分子的研究和应用是一个非常活跃的领域，涉及有机化学、生物化学和超分子化学等领域，2001年和2021年的诺贝尔化学奖就与手性分子合成有关。粒子物理学中，手征对称性是区分无质量粒子的内禀自旋平行或者反平行于其动量的动力学性质。

1997年，Frauendorf和孟杰预言了原子核中的手征对称性<sup>[18]</sup>。他们指出，一个具有特殊三轴形变的原子核，处于高角动量轨道上的核子粒子和空穴，相应的角动量方向将分别沿原子核质量分布的短轴和长轴，其余核子组成的原子核核芯，最大的转动惯量方向对应中间轴。这样的体系，粒子、空穴和核芯的角动量相互垂直，与总角动量一道，在本体系中形成能量完全简并的左手和右手体系。在实验室坐标系中，由于手征对称性破缺，在一定的角动量范围内，将出现两条能量近简并的转动带，即原子核中手征对称性的实验信号。

2001年，美国纽约大学石溪分校的科学家，利用耶鲁大学的实验设施，在中子数为75的<sup>130</sup>Cs，<sup>132</sup>La，<sup>134</sup>Pr和<sup>136</sup>Pm 4个原子核中，观测到理论预言的手征双重带，证实了手征对称性的存在<sup>[19]</sup>。迄今为止，实验上已经在质量数为80、100、130和190的核区，发现了50余例手性原子核，即存在手征双重带的原子核。目前，研究手性原子核的理论模型包括粒子转子模型、倾斜轴推转方法、无规相位近似方法、集体哈密顿量方法和投影壳模型等。

2006年，意大利等国的科学家测量了<sup>134</sup>Pr的电磁跃迁几率，结果发现与理论预期不符，为手性原子核的研究蒙上了阴影。为了解决该问题，同时针对当时的手性原子核理论多基于唯象模型，亟需发展微观理论预言手性原子核，以配合实验探索。北京大学研究团队发展相对论密度泛函理论，微观描述原子核形变以及高角动量轨道的核子粒子和空穴，正确预言手性原子核。他们发现，一个原子核中可能存在基于不同三轴形变或者核子粒子空穴激发的多对手征双重带现象，并把这一现象命名为多重手征双带，简称M $\chi$ D<sup>[20]</sup>。M $\chi$ D的预言激发了美国阿贡国家实验室等多个实验室进行相关实验。2013年，在实验和理论同行的共同努力下，在<sup>133</sup>Ce中发现两对手征双重带，证实了M $\chi$ D的理论预言<sup>[21]</sup>。

最近，无需假设任何对称性，在三维格点空间发展的含时相对论密度泛函理论已被成功用于研究手征原子核的动力学性质<sup>[22]</sup>。无需引入参数，理论计算结果不仅很好地再现了<sup>135</sup>Nd中观测到的两对手征双重带的能谱，而且揭示了原子核手征转动的动力学新机制，即图4所示的手征进动。

以<sup>135</sup>Nd为例，推转相对论密度泛函理论计算，在给定角动量时，给出 $(\theta_j, \varphi_j)$ 平面上的能量曲面，如图5(a)所示角动量为 $I=31/2 \hbar$ 时的能量曲面。其中， $\theta_j$ 是原子核总角动量和长轴的夹角，即极角， $\varphi_j$ 是总角动量在中-短平面上的投影和短轴的夹角，即方位角。图中，两个极小点的能

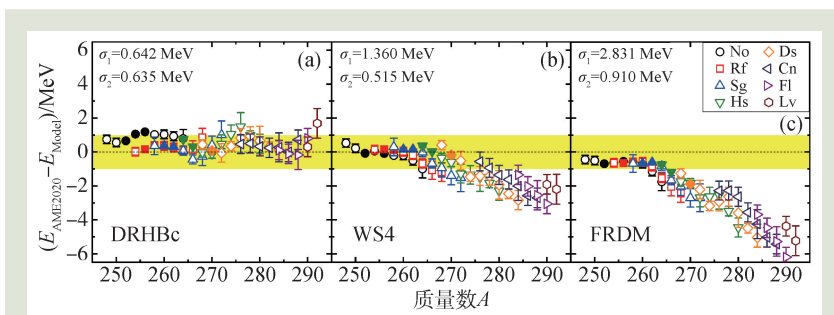


图3 超重偶偶原子核的最新质量评估数据 AME2020，对 DRHBc 理论(a)，和高精度宏观微观质量模型 WS4(b)以及 FRDM(c)预言能力的检验。AME2020 给出的 10 个质量实验数据用实心符号表示，46 个质量经验值用空心符号表示。 $\sigma_1$  表示对全部数据的描述精度， $\sigma_2$  表示对 10 个实验数据的描述精度<sup>[17]</sup>

量简并,  $\theta_j$  相同,  $\varphi_j$  符号相反, 分别对应着角动量  $I=31/2 \hbar$  时的左手态和右手态。由于推转相对论密度泛函理论计算是在固定于原子核上的坐标系中进行的, 因此只能给出一对能量简并的手征双重带。

为了微观自洽地给出  $^{135}\text{Nd}$  中观测到的手征双重带的能级差, 需要考虑超越平均场近似的关联效应。对于给定角动量, 从推转相对论密度泛函理论给出的能量曲面上的任意一点出发, 在实验室坐标系下进行含时演化, 即可得到总角动量的极角  $\theta_j$  和方位角  $\varphi_j$  随时间的演化。演化路径在

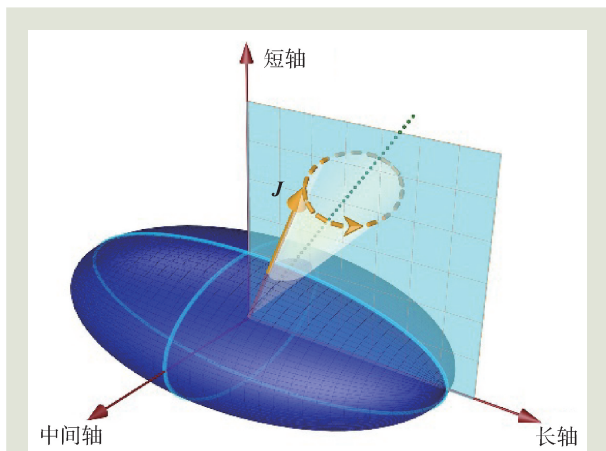


图4 手性原子核的手征进动示意图。原子核的总角动量  $J$  绕着本体系中点虚线所示的轴转动<sup>[21]</sup>

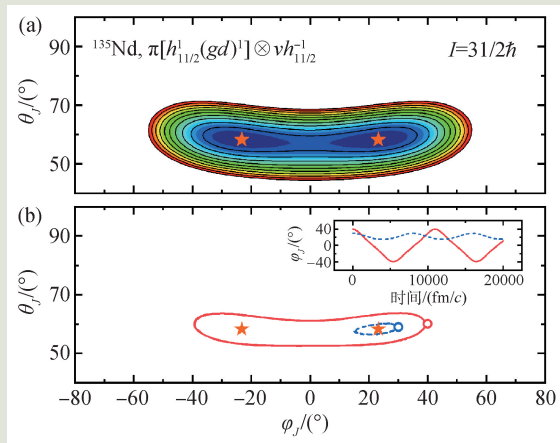


图5 (a) $^{135}\text{Nd}$ 在角动量  $I=31/2\hbar$  时, 推转相对论密度泛函理论计算出, 在角动量取向角  $(\theta_j, \varphi_j)$  平面的能量曲面, 对应的粒子空穴组态为  $\pi[h_{11/2}^1(gd)] \otimes \nu h_{11/2}^{-1}$ , 五角星表示能量极小值; (b) 从圆圈表示的两个不同的初始态出发, 含时相对论密度泛函理论在  $(\theta_j, \varphi_j)$  平面上给出的演化路径分别用实线和虚线表示。插图展示方位角  $\varphi_j$  随时间的演化<sup>[21]</sup>

$(\theta_j, \varphi_j)$  平面上形成闭合的曲线。图 5(b) 给出从两个不同的初始态出发, 总角动量在  $(\theta_j, \varphi_j)$  平面的演化路径, 分别用实线和虚线表示。如果初始态的能量低于两个极小值之间的位垒, 如图中虚线所示, 演化路径为椭圆, 以相应的极小值为中心, 即总角动量围绕能量极小所对应的轴转动。根据方位角  $\varphi_j$  随时间的演化, 利用傅里叶变换, 可提取手征激发能, 给出手征双重带的能级差, 从而微观自洽地描述实验上观测到的手征双重带和原子核手征转动的动力学机制, 即手征进动。如果初始能量高于两个极小值之间的位垒, 如图 5(b) 中实线所示, 演化路径会经过两个极小值对应的区域, 这涉及左手态与右手态之间的量子隧穿, 需要更复杂的重新量子化或生成坐标方法进行处理。

## 5 原子核的动力学性质

原子核的动力学过程, 如散射、裂变和聚变等, 同样可以基于相对论密度泛函理论进行研究。

Hoyle 态, 即  $^{12}\text{C}$  的第二个  $0^+$  态, 对于宇宙核合成和生命起源至关重要。在 Hoyle 态中, 三个  $^4\text{He}$  的结团是否为链式结构, 一直是实验和理论研究的热点。推转相对论密度泛函理论研究表明, 让原子核转动或者增加中子数目都有助于增强链式结构的稳定性<sup>[23]</sup>。利用含时相对论密度泛函理论, 研究  $^4\text{He} + ^8\text{Be}$  和  $^4\text{He} + ^{10}\text{Be}$  的共振散射, 通过考察密度分布及其随时间的演化, 揭示了链式结构的动力学特征<sup>[24]</sup>。

对于初始质心能量为 2 MeV 的正面碰撞, 图 6 展示了含时相对论密度泛函理论给出的  $^4\text{He} + ^8\text{Be}$  和  $^4\text{He} + ^{10}\text{Be}$  在  $xz$  平面的密度分布随时间的演化。两个碰撞体系随着时间演化, 均出现链式结构。对于  $^4\text{He} + ^8\text{Be}$ , 链式结构持续至 3100 fm/c ( $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$ ,  $c$  是光速), 随后开始弯曲, 形成如图 6(c) 所示的类三角结构, 最后演化成如图 6(d) 所示的近球形形状。演化过程中出现的弯曲, 破坏了体系的轴对称性, 导致了链式结构的不稳定, 表明不假设任何对称性, 微观地研究

原子核链式结构动力学性质的重要性。对于  ${}^4\text{He} + {}^{10}\text{Be}$ ，链式结构可以持续至 5000 fm/c 以上。随着时间演化， ${}^4\text{He}$  结团和  ${}^{10}\text{Be}$  结团的位置会发生交换，出现准周期振荡，如图 6(f), (g) 所示。与  ${}^4\text{He} + {}^8\text{Be}$  相比，增加的两个中子减慢了结团结构的准周期振荡，即动力学同位旋效应，导致  ${}^4\text{He} + {}^{10}\text{Be}$  碰撞产生的链式结构更加稳定。

## 6 原子核结构的相对论第一性原理研究

相对论密度泛函理论基于一个普适的拉氏量密度，可以对核素图中几乎所有原子核的基态和激发态性质进行描述。然而，相对论密度泛函中涉及到的十余个参数不能从第一性原理导出，而是通过拟合原子核的实验数据确定。在这个意义上，相对论密度泛函理论是一个有效理论。特别是，在原子核结构研究中有重要影响的张量力，其效应与自旋轨道势的效应耦合在一起，难以通过实验数据唯一确定。此外，利用第一性原理计算，研究特殊的物理观测量，可以为相对论密度泛函的构建提供重要参考。

由于过高的计算机资源需求，过去数十年中，一直没有实现原子核真正意义上的相对论第一性原理计算。通常的做法是，首先通过自洽的核物质相对论 Brueckner—Hartree—Fock (RBHF) 计算，提取有效相互作用的密度依赖性，然后将其映射到有限原子核，进行有限原子核的相对论 Hartree—Fock 计算，即有效密度近似 (EDA)。然而，这种映射并不唯一，有很大的不确定性<sup>[25]</sup>。

原子核结构的相对论第一性原理计算最近取得了突破。从相对论形式的真实核子—核子相互作用 Bonn 势出发，利用完全自洽的狄拉克 Woods—Saxon 基求解了有限原子核的 RBHF 方程，不引入任何自由参数，实现了原子核基态性质的相对论第一性原理计算<sup>[25, 26]</sup>。

以  ${}^{16}\text{O}$  为例，利用德国 Bonn 大学发展的三种核子—核子相互作用 Bonn A, Bonn B, Bonn C,

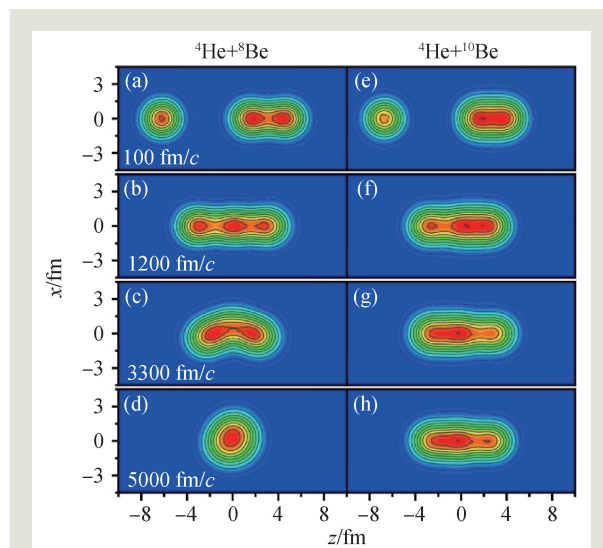


图6 初始质心能量为 2 MeV 的正碰过程中，含时相对论密度泛函理论在  $t=100, 1200, 3300, 5000$  fm/c 时刻，给出的  ${}^4\text{He}+{}^8\text{Be}$ (左)和  ${}^4\text{He}+{}^{10}\text{Be}$ (右)在  $xz$  平面的密度分布<sup>[24]</sup>

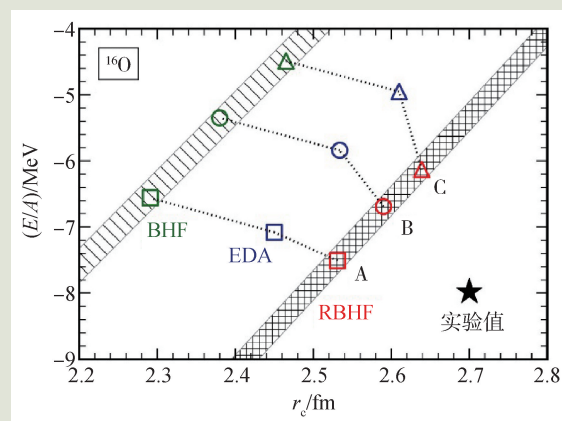


图7 利用 Bonn A 和 B 以及 C 三种核子—核子相互作用，以  ${}^{16}\text{O}$  为例，相对论第一性原理 RBHF 计算给出的比结合能和电荷半径，与实验值、非相对论 BHF 计算和采用 EDA 近似的结果比较。线性条带突出显示 RBHF 和 BHF 的计算结果<sup>[25]</sup>

图 7 展示了完全自洽的 RBHF 理论计算给出的比结合能和电荷半径，以及与实验值、非相对论 BHF 计算结果和采用 EDA 近似的比较。结果表明，相对论第一性原理计算，显著改善了对结合能和电荷半径的描述。RBHF 计算结果显著优于 EDA 近似，这表明自洽性十分重要。

关于 RBHF 理论的成功和影响，可参见综述文献[25]。它回顾了基于唯象平均场、有效核子—核子相互作用和真实核子—核子相互作用建

立模型, 研究原子核结构的历史。综述了完全自洽的RBHF理论对有限核和中子滴系统的研究现状。提出了基于真实核子—核子相互作用, 进行核物质和有限原子核的第一性原理计算, 建立相对论第一性原理密度泛函的基本思想。

## 7 总结和展望

经过几十年的努力, 基于密度泛函理论和量子场论建立起来的相对论密度泛函理论, 得到很大发展, 解决了非相对论理论中难以解释的赝自旋对称性起源之谜, 自洽包含了非相对论理论中需要唯象引入的自旋轨道势和奇时间场, 成功地描述了各种原子核现象。基于真实核力的相对论第一性原理计算, 自然给出核物质饱和点性质, 无需像非相对论计算那样唯象引入三体相互作用。近来, 不假设任何对称性, 在三维坐标格点空间发展的含时相对论密度泛函理论, 微观地揭

示了原子核手征转动的动力学新机制和原子核链式结构的动力学特征, 有望在原子核的聚变和裂变反应以及超重原子核合成等方面发挥重要作用。

原子核物理的相对论第一性原理研究, 即完全自洽的相对论 Brueckner—Hartree—Fock 理论, 在描述无限大核物质和有限原子核等方面取得了很大成功, 表明了相对论第一性原理计算的可行性和优越性。基于相对论第一性原理研究, 可以为构建普适的相对论密度泛函提供重要参考。例如, 通过相对论第一性原理研究原子核系统, 提取难以通过实验数据确定的张量力效应等。此外, 对实验无法提供的高密度核物质性质等, 相对论第一性原理研究可以提供重要参考和约束, 指导构建基于第一性原理的普适的相对论密度泛函理论, 实现对原子核的结构和反应性质以及中子星等致密天体状态方程的完全微观自洽描述。

## 参考文献

- [1] Bohr A, Mottelson B R. Nuclear Structure Vol. I. New York: Benjamin Inc., 1969
- [2] Meng J ed. Relativistic Density Functional for Nuclear Structure. Singapore: World Scientific, 2016; Meng J, Zhao P W. AAPS Bulletin, 2021, 31:2
- [3] Hohenberg P, Kohn W. Phys. Rev., 1964, 136: B864
- [4] Kohn W, Sham L J. Phys. Rev., 1965, 140: A1133
- [5] Drut J, Furnstahl R, Platter L. Prog. Part. Nucl. Phys., 2010, 64: 120
- [6] Serot B D, Walecka J D. Relativistic Nuclear Many-Body Theory. Boston MA: Springer US, 1992
- [7] Zhao P W, Li Z P, Yao J M *et al.* Phys. Rev. C, 2010, 82: 054319
- [8] Ren Z X, Zhao P W, Meng J. Phys. Rev. C, 2020, 102: 044603
- [9] Tanihata I, Hamagaki H, Hashimoto O *et al.* Phys. Rev. Lett., 1985, 55: 2676
- [10] Meng J, Toki H, Zhou S G *et al.* Prog. Part. Nucl. Phys., 2006, 57: 470
- [11] Xia X W, Lim Y, Zhao P W *et al.* At. Data Nucl. Data Tables, 2018, 121-122: 1
- [12] Zhou S G, Meng J, Ring P *et al.* Phys. Rev. C, 2010, 82: 011301 (R)
- [13] Zhang K, Cheoun M K, Choi Y B *et al.* (DRHBc Mass Table Collaboration). Phys. Rev. C, 2020, 102: 024314
- [14] Wang M, Huang W, Kondev F *et al.* Chin. Phys. C, 2021, 45: 030003
- [15] Wang N, Liu M, Wu X *et al.* Phys. Lett. B, 2014, 734: 215
- [16] Möller P, Sierk A, Ichikawa T *et al.* At. Data Nucl. Data Tables, 2016, 109-110: 1
- [17] Zhang K, He X, Meng J *et al.* Phys. Rev. C, 2021, 104: L021301
- [18] Frauendorf S, Meng J. Nucl. Phys. A, 1997, 617: 131
- [19] Starosta K, Koike T, Chiara C J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2001, 86: 971
- [20] Meng J, Peng J, Zhang S Q *et al.* Phys. Rev. C, 2006, 73: 037303
- [21] Ayangeakaa A D, Garg U, Anthony M D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2013, 110: 172504
- [22] Ren Z X, Zhao P W, Meng J. How atomic nuclei rotate chirally? Submitted, 2021
- [23] Zhao P W, Itagaki N, Meng J. Phys. Rev. Lett., 2015, 115: 022501
- [24] Ren Z X, Zhao P W, Meng J. Phys. Lett. B, 2020, 801: 135194
- [25] Shen S, Liang H, Long W H *et al.* Prog. Part. Nucl. Phys., 2019, 109: 103713
- [26] Shen S, Hu J, Liang H *et al.* Chin. Phys. Lett., 2016, 33: 102103