

# $\alpha$ -Clustering in atomic nuclei from first principles with statistical learning and the Hoyle state character

文献阅读汇报:DOI: 10.1038/s41467-022-29582-0

Published in: Nature Commun. 13 (2022) 1, 2234

汇报人: 刘博然



December 19, 2024

## 1. 简介

### 1.1. 研究背景

### 1.2. 研究方法

## 2. 理论框架

### 2.1. Monte Carlo Shell Model

#### AFQMC

### 2.2. Convergence pattern of MCSM results

### 2.3. Q-aligned state and density profiles

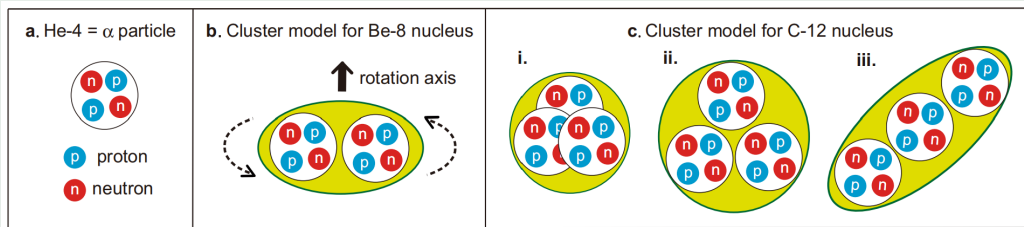
## 3. 结果

### 3.1. Be

### 3.2. C

## 研究背景及场景

- 核聚集现象的重要性：原子核的 cluster 结构是原子核以及平均场态的重要性质，其中一些核子形成了团簇结构例如  $\alpha$  粒子。

Figure: 1. 原子核中的  $\alpha$ clustering 示意图

## Multi-nucleon structure by CI simulation

目前的 Configuration Interaction(CI) 计算称为核物理中的壳模型 (SM) 计算。在各种类型的 SM 计算中, 本文工作中所采用的计算属于蒙特卡罗壳模型 (MCSM)

- 方法: No-Core MCSM: 其中所有核子都是活跃的。每个  $|\phi_{ni}\rangle$  是变形的单粒子壳模型态的斯莱特行列式。通过投影, 得到的态具有好的角动量量子数和宇称量子数。[1]
- NN 相互作用: JISP16 $\Rightarrow$  Be,Daejeon16 $\Rightarrow$ C.
  - ISP16 相互作用的核子间势是通过拟合 NN 散射数据和氦核性质确定的。此外, 还使用了轻核的结合能来进行微调。该模型未显式包含三核子相互作用, 但动量依赖的 NN 相互作用项产生了类似的效应。
  - Daejeon16 相互作用是 JISP16 的 successor, 它从手征有效场论推导到 N<sup>3</sup>LO 项, 并且利用了轻核的一些性质进行微调, 而不是使用三核子力。

[1]Martin Freer et al,Rev.Mod.Phys.90, 035004(2018)

## 1. 简介

### 1.1. 研究背景

### 1.2. 研究方法

## 2. 理论框架

### 2.1. Monte Carlo Shell Model

#### AFQMC

### 2.2. Convergence pattern of MCSM results

### 2.3. Q-aligned state and density profiles

## 3. 结果

### 3.1. Be

### 3.2. C

MCSM 是一种变分方法, 利用 Auxiliary field quantum Monte Carlo(AFQMC) 来确定一组低能量态  $|\Phi_n\rangle$ , AFQMC 方法:

- 采用相互作用玻色子模型 (IBM), IBM 哈密顿量:

$$H = \sum_{i,j=1}^{N_{sp}} \epsilon_{ij} b_i^\dagger b_j + \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l=1}^{N_{sp}} v_{ijkl} b_i^\dagger b_j^\dagger b_k b_l. \quad (1)$$

- H 写成单体算符  $O_\alpha$  的 quadratic form:

$$H = \sum_{\alpha=1}^{N_f} \left( E_\alpha O_\alpha + \frac{1}{2} V_\alpha O_\alpha^2 \right), \quad (2)$$

- 考虑虚时间演化算符  $e^{-\beta H}$

$$e^{-\beta H} = \prod_{n=1}^{N_t} e^{-\Delta\beta H} \quad (3)$$

- 通过在每个时间步长上应用 Hubbard-Stratonovich 变换，其算符可以表示为单体演化算符对辅助场  $\sigma_{\alpha n}$  的积分，其中  $\Delta\beta = \beta/N_t$

$$e^{-\beta H} \approx \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha,n} d\sigma_{\alpha n} \left( \frac{\Delta\beta |V_{\alpha}|}{2\pi} \right)^{1/2} G(\sigma) \prod_n e^{-\Delta\beta h(\vec{\sigma}_n)}, \quad (4)$$

- 高斯权重因子  $G(\sigma)$ :

$$G(\sigma) = e^{-\sum_{\alpha,n} (\Delta\beta/2) |V_{\alpha}| \sigma_{\alpha n}^2}, \quad (5)$$

单体哈密顿量  $h(\vec{\sigma}_n)$ , ( $\sigma_n$  第  $n$  个时间分段的辅助场)

$$h(\vec{\sigma}_n) = \sum_{\alpha} (E_{\alpha} + s_{\alpha} V_{\alpha} \sigma_{\alpha n}) O_{\alpha}, \quad (6)$$



- 1) 取初始相干态，其中  $|0\rangle$  是玻色子真空，振幅  $x_i$  可以通过变分法得到：

$$|\Psi^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_B!}} \left( \sum_{i=1}^{N_{\text{sp}}} x_i b_i^\dagger \right)^{N_B} |0\rangle \quad (7)$$

然后计算初始能量  $E^{(0)} = \langle \Psi^{(0)} | H | \Psi^{(0)} \rangle$

- 2) 根据高斯权重函数 (5) 随机给出一组辅助场  $\sigma$
- 3) 根据设置的辅助场  $\sigma$  计算波函数  $|\Phi(\sigma)\rangle$ ：

$$|\Phi(\sigma)\rangle \propto \prod_{n=1}^{N_t} e^{-\Delta\beta h(\vec{\sigma}_n)} |\Psi^{(0)}\rangle \quad (8)$$

- 4)  $|\Phi(\sigma)\rangle$  通过 Schmidt 方法对之前得到的其他 basis 正交归一化  $\Rightarrow$  确定新的 basis  $|\Phi'\rangle$ 。
- 5) 通过包含步骤 (4) 中获得的新 basis，我们对哈密顿算符  $H$  进行对角化，并得到更新的基态能量  $E$  及其波函数  $|\Psi\rangle$ 。(逐步扩大 basis 空间)
- 6) 重复步骤 (2) 至 (6)，直到基态能量  $E$  收敛。还可以通过计算角动量算符的期望值来确认收敛性。



# Convergence pattern of MCSM results

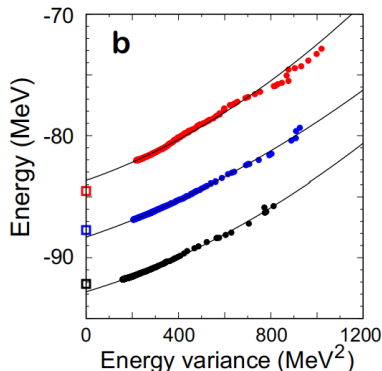
收敛



中山大学  
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

- 目前的 CI 计算是通过将哈密顿量  $H$  进行对角化来实现的，使用了一定数量的 MCSM 基矢量。通过增加基矢量的数量（记作  $k$ ），可以使给定量子数的最低能量本征值变小。
- 收敛性：为了观察随着  $k$  增加计算得到的本征值的收敛性，使用方差：

$$r_k = \langle \phi_k | H^2 | \phi_k \rangle - \langle \phi_k | H | \phi_k \rangle^2,$$



- $0_1^+$  (黑色)、 $2_1^+$  (蓝色) 和  $0_2^+$  (红色)。点表示实验值。实线表示多项式外推法。
- 随着  $k$  增加，给定量子数的能量本征值降低，且  $r_k$  基本上减小，并在  $k$  足够大时接近零。

# Q-aligned state and density profiles

提取原子核结构信息



中山大學  
SUN YAT-SEN UNIVERSITY

- Q-aligned: 将 MCSM 基矢量按照特定的方向对齐, 然后叠加起来, 使得其在  $J^\pi = 0^+$  (自旋/宇称) 的投影成为 MCSM 基态的过程。这个状态提供了一种从理论中获得原子核密度分布“快照”的方法。

■ 由 MCSM 计算出的具有  $J^\pi$  和其他量子数  $\xi$  的本征态表示为上述 MCSM 基矢量的叠加为:

$$\Psi(J^\pi, \xi) = \mathcal{N} \sum_i f_i^{(0)}(J^\pi, \xi) \hat{P}(J^\pi) \phi_i^{(0)} \quad (9)$$

- 随后用适当的欧拉角旋转  $\phi_i^{(0)}$ , 使得得到的基向量  $\phi_i$  的椭圆轴与预先固定的方向对齐 (如结果中所述)。这对于所有的  $i$  分别进行。然后定义 Q 对齐状态为:

$$\Omega(J^\pi, \xi) = \mathcal{N}' \sum_i f_i(J^\pi, \xi) \phi_i, \quad (10)$$

- 密度分布的分析: 通过计算 Q-aligned state 的密度分布, 可以观察到原子核中的  $\alpha$  粒子团簇。(结果图中)

## 1. 简介

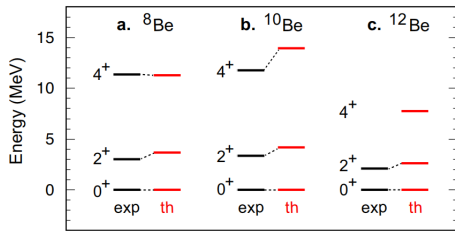
- 1.1. 研究背景
- 1.2. 研究方法

## 2. 理论框架

- 2.1. Monte Carlo Shell Model  
AFQMC
- 2.2. Convergence pattern of MCSM results
- 2.3. Q-aligned state and density profiles

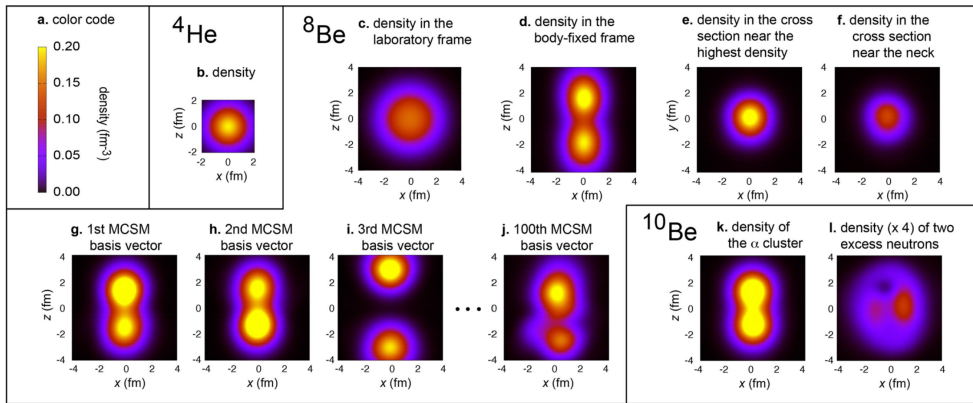
## 3. 结果

- 3.1. Be
- 3.2. C



**Figure:** 1. Excitation level energies of Be isotopes. 理论值 (th) 与实验值 (exp) 相比较

目前的 CI 模拟结果与实验结果有很好的-致性，并且该模拟是没有可调参数的第一原理计算。结果符合非球形刚体集体转动模型， $4^+$  态能量约为  $2^+$  态的 3 倍。



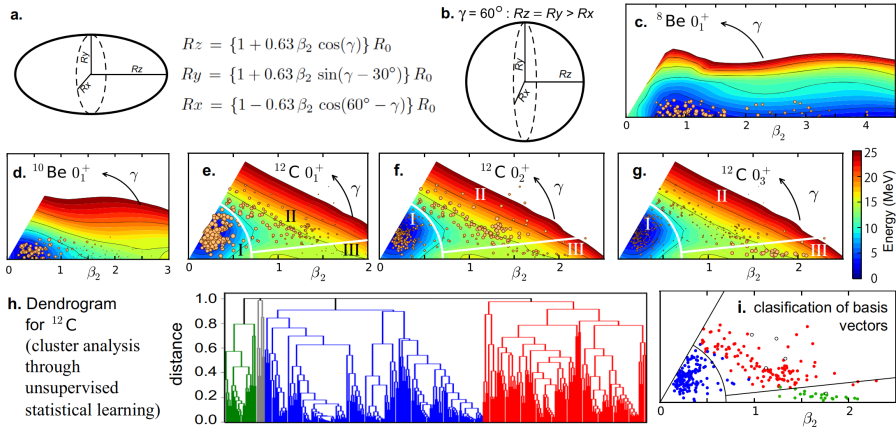
**Figure 2:** a 图例。b  $^4\text{He}$  ( $\alpha$  粒子) 的物质密度。c 实验室框架中  $^8\text{Be}$  的物质密度。d-f  $^8\text{Be}$  在 xz 平面 (d) 和 xy 平面 (e, f) 上的物质密度。g-j  $^8\text{Be}$  的 MCSM 基矢量的物质密度。k  $^{10}\text{Be}$  中  $\alpha$  团簇部分的物质密度。l  $^{10}\text{Be}$  中多余中子的密度。

# 结果

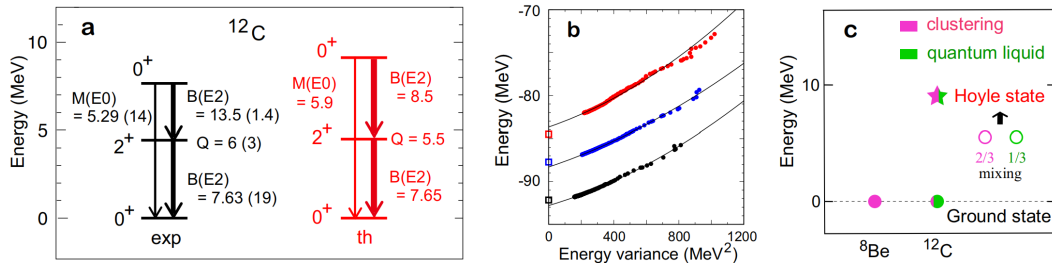
通过 T-plot 和统计学习方法来分析核的基态和 Hoyle 态



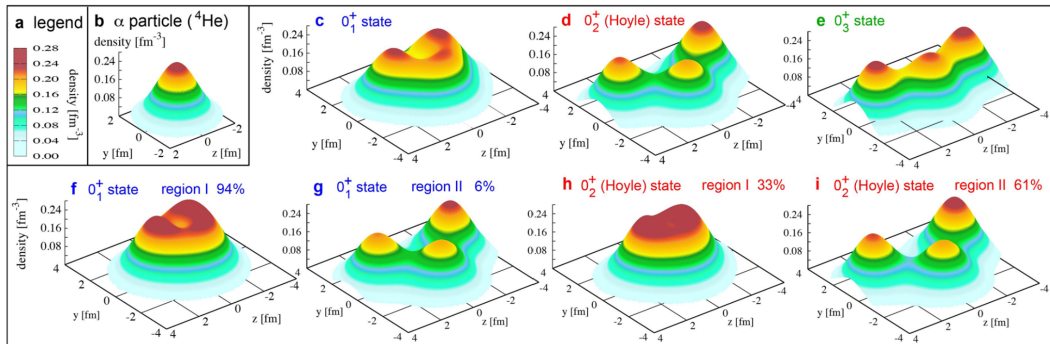
中山大学  
SUN YAT-SEN UNIVERSITY



**Figure:** h 通过 unsupervised 统计学习的 cluster 分析树状图分析的 MCSM 基向量。i 按照 h 中相同颜色分类的 T-plot 圆圈。



**Figure 4.** Properties of  $^{12}\text{C}$  nucleus. c Hoyle 状态 (星形) 的示意图, 包 cluster (粉红色) 和量子液体 (绿色) components (开圆圈)。描述了  $^8\text{Be}$  和  $^{12}\text{C}$  的基态性质。



**Figure 5.** Density profiles on the yz plane of  $\alpha$  or  $^{12}\text{C}$  nuclei. **b.**  $\alpha$  粒子基态的密度。 **c-e**  $^{12}\text{C}$  原子核  $0^+$  态的密度。 **f-i** 分解到各个区域。显示了指定区域内的概率。



Thank you for your attention!

Q&A