

文章编号: 1007-4627(2018)04-0429-10

投影后变分新方法对原子核低激发态的描述

高早春, 陈永寿

(中国原子能科学研究院, 北京 102413)

摘要: 对我们近几年发展的投影后变分 (VAP) 新方法做了比较全面的介绍。首先介绍了对 *JTA* 投影波函数的变分计算, 指出自旋投影是获得很好壳模型近似的关键因素。基于这一结论, 将 VAP 简化, 并推广应用于所有晕态。即采用基于 HF 真空态的自旋投影波函数, 通过变分, 得到了与壳模型结果非常接近的 VAP 晕态能量及相应波函数。为进一步描述非晕态, 依据柯西交错定理, 可靠地对 VAP 低激发态能量之和进行最小化。如果这些能量值之和达到极小值, 则与该极小对应的各态也就被确定下来。通过 VAP 计算, 所得原子核非晕态能量与壳模型精确值非常接近。最近, 在 VAP 计算中加入宇称投影, 在 *psd* 模型空间中计算了 ^{12}C 的正负宇称晕态, 同样得到了比较好的壳模型近似。值得指出的是, 该方法具有普适性, 可广泛应用于不同量子多体体系的低激发态研究中。

关键词: 柯西交错定理; 投影后变分; 低激发态; 壳模型; USDB 相互作用

中图分类号: O571.53 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.35.04.429

1 引言

对于一个复杂的量子多体体系, 根据量子力学原理, 其能谱及其波函数应通过求解体系的薛定谔方程而获得。在核结构理论研究中, 人们可以通过满空间壳模型 (SM) 计算, 给出薛定谔方程的精确本征解, 从而可以全面描述原子核的各种性质。然而, 受组态空间限制, 只有采用比较小的价核子模型空间才能够实现满空间壳模型计算。对于稍大点的模型空间, 相应组态空间变得极其巨大, 这将导致壳模型计算需要巨大存储空间, 同时计算量也变得异常庞大, 因而精确求解本征波函数会变得非常困难。为了避免这一困难, 人们只能将组态空间大幅压缩, 以便能在当今的计算机上实现壳模型计算。然而, 在这种被压缩的组态空间中进行壳模型计算, 所得波函数及相应能量只能是近似的。很自然, 人们会想尽办法, 使得到的近似波函数尽可能接近精确解。为此, 人们提出了各种壳模型方法, 如组态空间截断^[1], 量子蒙特卡洛方法^[2-3]以及 VAMPIR 方法^[4]等, 以期得到很好的壳模型近似结果。

理论上, 原子核哈密顿量的本征态个数在有限组态空间里等于这个组态空间的维度数, 而在希尔伯特空间里则为无穷个。然而实验上, 所观测的核态往往都是数目不是很多的低激发态 (包括基态)。因此, 在当今的壳模型计算中, 人们往往只算感兴趣的少数低激发态, 而

不需要把所有本征态全部算出, 这实际上为壳模型计算节约了大量计算资源。即便这样, 基于上述原因, 精确的壳模型计算仍然难以推广至较大的模型空间中, 还是需要采用近似方法精简计算。

在原子核低激发态中, 最重要的态当然是处于能量最低的基态。对于基态的处理, 最简单的方法就是平均场近似。由于原子核由全同费密子构成, 其波函数遵守交换反对称性, 因此人们往往采用考虑这种反对称性的 Hartree-Fock (HF) 或者更一般的 Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 平均场方法研究原子核的基态性质。由于其简单性, HF 与 HFB 方法容易推广至整个核区。

恰恰也是由于平均场近似的简单性, 其给出的基态波函数与相同哈密顿量的本征基态往往相去甚远。显然, 平均场波函数需要改进。为此人们根据具体研究的问题, 进一步发展了各种超越平均场方法, 如组态混合, 生成坐标法, 对称性恢复 (即投影) 等方法, 以期对原子核基态乃至低激发态给予更好描述。

由于原子核是一个孤立的量子体系, 其哈密顿量应具有转动不变性和空间反射对称性, 相应地, 其本征态具有确定的自旋和宇称, 这与实验上每条原子核能级都有确定自旋和宇称相一致。然而在平均场计算中, 这些对称性往往被破坏, 因此, 一个自然的改进就是采用投影方法恢复体系对称性, 使得投影的基态平均场波函数具有确定的自旋和宇称。对于 HFB 平均场, 还有粒子

收稿日期: 2018-09-10; 修改日期: 2018-10-19

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11575290)

作者简介: 高早春 (1973-), 男, 安徽宿松人, 研究员, 博士, 从事理论核物理研究, E-mail: zcgao@ciae.ac.cn.

数不再是好量子数, 这时, 需要对 HFB 波函数做额外的粒子数投影。

对已经达到自洽的平均场波函数做投影, 一般会得到比平均场更好的波函数, 这种做法被称为变分后投影 (Projection After Variation, PAV)。实际上, 如果能实现直接对投影波函数变分, 即投影后变分 (Variation After Projection, VAP), 会得到比 PAV 还好的波函数。尽管与 PAV 计算比较, VAP 计算要复杂得多, 但是后者能给出非常接近壳模型精确解的投影波函数。由于 VAP 波函数的这一优越性质, VAP 方法非常值得深入探讨。目前, 发展得比较完善的 VAP 方法就是 Schmid 等^[4]建立的 VAMPIR 方法。

近年来, 我们采用新的计算技巧^[5], 提出了与 VAMPIR 很不相同的 VAP 计算方法, 得到了很好的壳模型近似波函数。到目前为止, VAP 方法不仅可以给出很好的近似基态, 也能得到很好的近似低激发态。本文试图将这一新的 VAP 方法做一较为通俗的介绍, 供同行参考。

2 投影后变分 (VAP) 理论及计算

2014 年, 我们提出了一个普遍公式, 用于计算单体算符和两体算符关于任意 HFB 真空态之间的矩阵元^[5]。这为我们开展超越平均场理论计算提供了很好的理论基础。在此基础上, 我们逐步建立了基于壳模型哈密顿量的 VAP 理论及其计算程序。这里分三个小节逐一展开论述。

2.1 偶偶核基态的 VAP 计算

在原子核平均场理论中, HFB 方法被广泛应用, 并在描述整个核区的粗块性质上取得很大的成功。基于 Gogny 力的 HFB 计算表明, 对于所有计算的 1712 个原子核, 其 HFB 能量极小对应的 HFB 真空态都具有轴对称性^[6]。对 HFB 真空态做投影, 可以得到投影的 HFB 真空态, 由此可以开展基于 HFB 真空态的 VAP 计算。为了检验投影 HFB 波函数的质量, 需要与相同哈密顿量的本征态作比较。然而很遗憾, Gogny 力 (以及 Skyrme 力) 的本征值求解目前还无法实现, 因此, 只能采用可精确求解的壳模型哈密顿量进行这样的对比。基于壳模型哈密顿量的 HFB 及其 VAP 计算已经有一些前人工作^[4, 7-9]。最近我们也开展了类似研究^[10]。但与前人不同, 我们首次实现了 JTA (自旋即角动量 (J)、同位旋 (T) 以及质量数 (A)) 同时投影的 VAP 计算。

对于一个给定的 HFB 真空态 $|\Phi\rangle$, 可对其进行投影以获得有确定 JTA 的波函数,

$$|\Psi_{JTA, MM_T}\rangle = \sum_{KK_T} f_{KK_T} P_{MK}^J P_{M_T K_T}^T P^A |\Phi\rangle, \quad (1)$$

其中: P_{MK}^J , $P_{M_T K_T}^T$ 和 P^A 分别是自旋、同位旋以及质量数投影算符。同位旋投影算符与自旋投影算符形式一样, 不同之处在于前者定义在同位旋空间。

投影波函数 $|\Psi_{JTA, MM_T}\rangle$ 相应的能量为

$$E_{JTA} = \langle \Psi_{JTA, MM_T} | \hat{H} | \Psi_{JTA, MM_T} \rangle. \quad (2)$$

实际上 E_{JTA} 及相应系数 f_{KK_T} 由以下 Hill-Wheeler 方程和归一化条件同时确定:

$$\sum_{KK_T} \langle \Phi | (\hat{H} - E_{JTA}) P_{K'K}^J P_{K'_T K_T}^T P^A |\Phi\rangle f_{KK_T} = 0, \quad (3)$$

$$\sum_{K'K'_T K_T} f_{K'K'_T}^* f_{KK_T} \langle \Phi | P_{K'K}^J P_{K'_T K_T}^T P^A |\Phi\rangle = 1. \quad (4)$$

为搞清楚各种投影的作用, 我们也可将以上各式中的自旋投影去掉, 只做同位旋 (T) 和质量数 (A) 投影, 这样可以得到 T, A 确定但 J 不确定的波函数 $|\Psi_{TA, M_T}\rangle$ 及其能量 E_{TA} , 方便与 JTA 投影的结果作比较。

改变 HFB 真空态, 相应各种能量如 HFB 能量 $E_{\text{HFB}} = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$, E_{JTA} 以及 E_{TA} 都会相应改变。显然每种能量都有各自的极小值。一般而言, 这些不同定义的能量极小对应的 HFB 真空态是不一样的。

为方便对 HFB 真空态进行变分, 我们采用 Thouless 公式^[11]表示 HFB 真空态 $|\Phi\rangle$,

$$|\Phi\rangle = \mathcal{N} e^{\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} d_{\mu\nu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger}} |\Phi_0\rangle, \quad (5)$$

其中 $|\Phi_0\rangle$ 为随机选取的初始 HFB 真空态, 在整个 VAP 计算中固定不变。 $|\Phi\rangle$ 通过 Thouless 参数 $d_{\mu\nu}$ 唯一确定。 \mathcal{N} 是归一化因子。为方便推导, 我们简记

$$A_{\mu\nu}^{\dagger} = a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu}^{\dagger}. \quad (6)$$

特别注意一点, a_{μ}^{\dagger} 对应的真空态是 $|\Phi_0\rangle$ 而不是 $|\Phi\rangle$ 。为简化计算, 我们对 HFB 真空态 $|\Phi_0\rangle$ 和 $|\Phi\rangle$ 加以下约束: (1) 具有时间反演对称性; (2) 全部 $d_{\mu\nu}$ 均为实数; (3) 在 HFB 变换中, 不考虑质子与中子之间的混合; (4) 具有绕 z -轴转 180° 对称性, 从而确保四极矩分量 $Q_{2\pm 1} = 0$ 。

我们采用 USDB 相互作用^[12], 对 sd 壳偶核的基态进行了系统的 VAP 计算, 得到了每个核的 E_{HFB} ,

E_{JTA} 以及 E_{TA} 的能量极小值, 如图 1 所示。我们看到, $E_{HFB}-E_{SM}$ 普遍处于较高位置, 说明 HFB 平均场与壳模型结果相差很远。 E_{TA} 稍低, 说明 TA 投影对 HFB 波函数有改进, 但是与壳模型波函数相差还是比较大, 结果也并不理想。进一步考虑自旋投影, 我们看到 E_{JTA} 一下子非常接近壳模型能量 E_{SM} 。我们自然会想到这样好的近似应该是自旋投影导致的。为验证这一点, 我们直接采用 HF 真空态, 并且只做自旋投影, 得到投影的 HF 能量 E_{PHF} , 通过 VAP 计算得到 E_{PHF} 的极小值。该能量也显示于图 1 中。我们看到 E_{PHF} 在 E_{JTA} 之上, 但仍比 E_{TA} 更显著接近壳模型能量。这些结果明确告诉我们, 自旋投影是获得很好壳模型近似的关键因素。由于这个原因, 就很容易理解包含自旋投影的一些核理论模型会比较成功, 如投影壳模型^[13]。

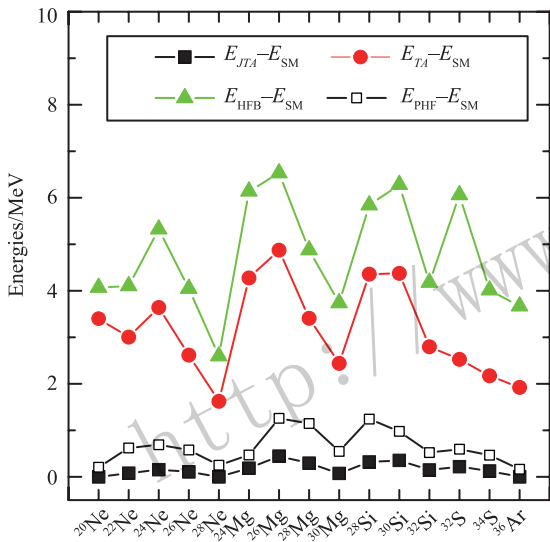


图 1 (在线彩图) 计算的 E_{HFB} , E_{JTA} , E_{TA} 以及 E_{PHF} 能量极小值与壳模型精确值 E_{SM} 之差, 所有结果均采用 USDB 相互作用

前面提及各种能量极小对应的平均场是不同的。为对所得平均场有一直观认识, 我们利用下式提取了平均场的四极矩 Q 和 γ 自由度,

$$Q \cos \gamma = \langle \Psi | \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \frac{r^2}{b^2} Y_{20} | \Psi \rangle, \quad (7)$$

$$Q \sin \gamma = \langle \Psi | \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \frac{r^2}{b^2} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{22} + Y_{2-2}) | \Psi \rangle. \quad (8)$$

这里 $|\Psi\rangle$ 代表某种形式的内禀态。由于波函数 $|\Psi_{TA,MT}\rangle$ 没有做自旋投影, 也可视为内禀态。当 $|\Psi\rangle = |\Psi_{TA,MT}\rangle$ 时记相应 Q 和 γ 为 Q_{TA} 和 γ_{TA} 。我们将图 1 中各能量对应的 Q, γ 值作于图 2 中。由图 2 明显看出, 在没有自

旋投影的计算中, 即图 2(a) 和 (b) 的结果, 所得形状几乎都是轴对称的 ($\gamma = 0^\circ$ 或 60°), 这与 HFB 的计算结果^[6]一致。有趣的是, 一旦引入自旋投影, 如图 2(c) 和 (d) 的结果, 所有计算的原子核都变成非轴对称的了。看起来, 由自旋投影导致的三轴形变是个普遍现象。需要指出的是, 这种现象在以往的三轴自旋投影的计算中也出现过, 如文献^[14-15], 但在这里我们通过变分给出能量极小的形变, 更加明确了这一结论。

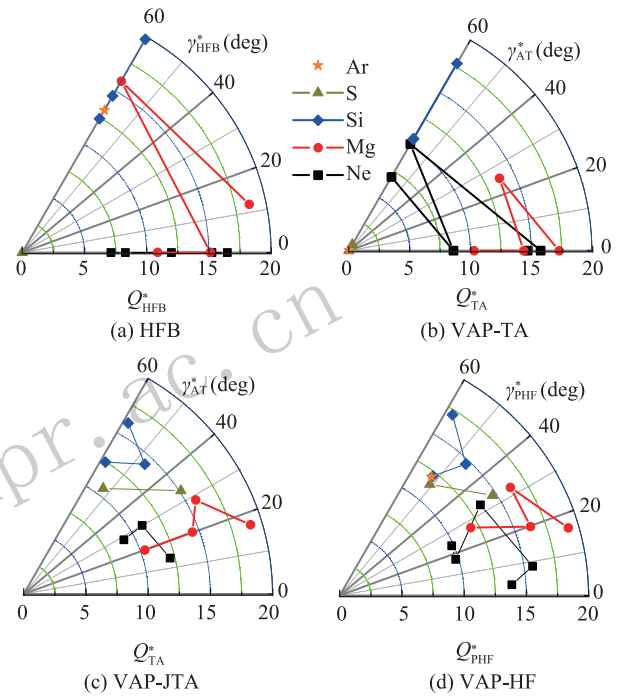


图 2 (在线彩图) 与图 1 各能量极小对应的 Q^*, γ^* 值星号表示对应能量达到极小, 取自文献^[10]。

2.2 任意晕态的 VAP 计算

在上一节的 VAP 计算中, 我们采用了 HFB 平均场。如果把所有 JTA 量子数全部投影出来, 需要计算 7 重积分 (自旋 J 投影 3 维, 同位旋 T 投影 3 维, 质量数 A 投影 1 维), 计算量非常大。在 VAMPIR 方法中, 则是将自旋 J 、质子数 Z 和中子数 N 作投影, 也需要 5 重积分, 计算量仍然很大。另一方面, 由上节讨论我们已经知道, 自旋投影是获得很好壳模型近似的关键因素。为此, 我们开展了一种更简单的 VAP 计算, 即采用 HF 真空态, 只做自旋投影。这就只需 3 重积分, 计算量大大削减。即便如此简单的 VAP 计算, 我们给出的基态 E_{PHF} 能量与壳模型基态能量之差均不超过 1.5 MeV (见图 1)。这一很好结果使我们有信心将基于 HF 真空态的 VAP 应用于 $J > 0$ 的晕态计算中。

需要指出的是, 上节采用的 HF 真空态实际上具有时间反演对称性。这不利于将 VAP 计算推广至奇粒子

体系, 如奇 A 核和奇奇核。同时, 也不利于计算偶偶核的奇自旋态。采用时间反演对称的非轴对称真空态, 虽然也可以投影出偶偶核的 $3^+, 5^+$ 等态, 并且这些态一般被看作 $K=2$ 的 γ 带成员, 但是, 很难把所有偶偶核奇自旋晕态看成是 γ 带成员, 例如当 $K=1$ 带中的 $3^+, 5^+$ 态能量最低时。此外, 1^+ 态根本不能从时间反演对称的真空态中产生出来。为了能将 VAP 计算推广至任意原子核的晕态, 这里将对 HF 真空态不作任何约束。即时间反演对称性破缺, $d_{\mu\nu}$ 可为复数, 即

$$d_{\mu\nu} = x_{\mu\nu} + iy_{\mu\nu}, \quad (9)$$

其中 $x_{\mu\nu}$ 与 $y_{\mu\nu}$ 均为实数。此外, HF 真空态也不具有绕 z -轴转 180° 对称性。在这种情况下, 四极矩分量 $Q_{2\pm 1}$ 一般不为零, 从这样的 HF 平均场提取形变比较麻烦, 这里暂不讨论, 而只专注研究 VAP 波函数的近似性。

我们首先介绍任意 HF 真空态的构建方法。本质上, HF 真空态是 HFB 真空态的特殊形式。在价核子模型空间里, 记单粒子球形谐振子基为 $|i\rangle \equiv |Nljm\rangle$ 。相应的产生消灭算符分别为 c_i^\dagger 和 c_i 。采用 Ring 和 Schuck 的教科书写法^[11], HFB 变换可写为

$$\begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix}. \quad (10)$$

最简单的 HFB 变换就是让 $U = I$, $V = 0$ 。 I 表示单位矩阵。这时 HFB 真空态就是真实的真空态, 记为 $|0\rangle$ 。显然有 $c_i|0\rangle = 0$ 。基于这一最简单变换, 我们将 U , V 的前 n 列进行互换, 得到新的 U , V 矩阵。这时对应的真空态记为 $|\Phi_{00}\rangle \equiv \prod_{i=1}^n c_i^\dagger|0\rangle$, 即前 n 个 $|i\rangle$ 轨道被占据的 Slater 行列式。相应的准粒子产生算符形式变为

$$\beta_{00,\mu}^\dagger = \begin{cases} c_\mu^\dagger, & \mu > n \\ c_\mu, & \mu \leq n \end{cases}. \quad (11)$$

基于 $|\Phi_{00}\rangle$ 态, 我们可以利用 Thouless 公式构建一个任意的初始 HF 态 $|\Phi_0\rangle$,

$$|\Phi_0\rangle = \mathcal{N}_0 e^{\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} d_{0,\mu\nu} \beta_{00,\mu}^\dagger \beta_{00,\nu}^\dagger} |\Phi_{00}\rangle. \quad (12)$$

为了确保粒子数不被破坏, 上式中, 有些 $d_{0,\mu\nu}$ 必须保持永远为零。事实上, 由式(11), 只有当 $\mu > n$ 且 $\nu \leq n$, 或者 $\mu \leq n$ 且 $\nu > n$ 时, $d_{0,\mu\nu}$ 才可以不为零。结合 $d_{0,\mu\nu}$ 的反对称性, 容易得到非零的独立 $d_{0,\mu\nu}$ 的个数 D_{VAP} 可由下式算出,

$$D_{\text{VAP}} = N * (M_N - N) + Z * (M_Z - Z), \quad (13)$$

其中 M_N, M_Z 分别为单中子单质子模型空间维度数。让非零 $d_{0,\mu\nu}$ 随机取值, 由式(12)即可产生粒子数与 $|\Phi_{00}\rangle$ 相同的随机 $|\Phi_0\rangle$ HF 真空态。 $|\Phi_0\rangle$ 即为我们进行变分的出发点。有了 $|\Phi_0\rangle$, 采用 Thouless 公式(5)就能得到可变的 HF 真空态 $|\Phi\rangle$ 。注意对式(5)中的非零 $d_{\mu\nu}$ 的约束与 $d_{0,\mu\nu}$ 完全一样, 以确保 $|\Phi\rangle$ 也是 HF 真空态。因此非零 $d_{\mu\nu}$ 的个数也由公式(13)给出。不同之处为 $d_{0,\mu\nu}$ 随机确定, 即变分的出发点随机选取, 而 $d_{\mu\nu}$ 作为变分参数, 最后由变分能量取极小得到。显然, 最后变分收敛的能量极小值不应依赖出发点 $|\Phi_0\rangle$ 的选取。

有了 $|\Phi\rangle$, 我们就可以建立相应的只有自旋投影的如下 Hill-Wheeler 方程,

$$\sum_K (H_{K'K} - E_J N_{K'K}) f_K = 0 \quad (14)$$

及归一化条件

$$\sum_{K'K} f_{K'}^* f_K N_{K'K} = 1, \quad (15)$$

其中

$$H_{K'K} = \langle \Phi | \hat{H} P_{K'K}^J | \Phi \rangle, \quad (16)$$

$$N_{K'K} = \langle \Phi | P_{K'K}^J | \Phi \rangle. \quad (17)$$

求解上面方程得到若干能量 E_J 及相应 f_K , 即波函数

$$|\Psi_{J,M}\rangle = \sum_K f_K P_{MK}^J | \Phi \rangle. \quad (18)$$

对于晕态描述, 我们只取其中最低的能量 E_J 及其相应波函数 $|\Psi_{J,M}\rangle$ 。

显然, 如上节讨论一样, E_J 及 $|\Psi_{J,M}\rangle$ 随 $|\Phi\rangle$ 变化。自然地, 我们需要通过改变 $|\Phi\rangle$, 找到 E_J 的极小值, 即做投影后变分 (VAP) 计算。在具体 VAP 计算中, 为了提升计算效率, 需要同时知道 E_J 随 $|\Phi\rangle$ 变化的情况, 即梯度 ∇E_J 。 ∇E_J 的分量实际上就是偏导数 $\frac{\partial E_J}{\partial x_{\mu\nu}}$ 和 $\frac{\partial E_J}{\partial y_{\mu\nu}}$, 具体计算公式为^[16]

$$\frac{\partial E_J}{\partial x_{\mu\nu}} = \frac{\sum_{K'K} [f_{K'}^* f_K (\frac{\partial H_{K'K}}{\partial x_{\mu\nu}} - E_J \frac{\partial N_{K'K}}{\partial x_{\mu\nu}})]}{\langle \Psi_{J,M} | \Psi_{J,M} \rangle}. \quad (19)$$

其中

$$\frac{\partial H_{K'K}}{\partial x_{\mu\nu}} = \langle \Phi | \hat{H} P_{K'K}^J A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle + \langle \Phi | A_{\mu\nu} \hat{H} P_{K'K}^J | \Phi \rangle - 2H_{K'K} \text{Re} \langle \Phi | A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle, \quad (20)$$

$$\frac{\partial N_{K'K}}{\partial x_{\mu\nu}} = \langle \Phi | P_{K'K}^J A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle + \langle \Phi | A_{\mu\nu} P_{K'K}^J | \Phi \rangle - 2N_{K'K} \text{Re} \langle \Phi | A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle. \quad (21)$$

把 $x_{\mu\nu}$ 换为 $y_{\mu\nu}$, 即可算出 $\frac{\partial E_J}{\partial y_{\mu\nu}}$, 这时需要用到公式

$$\frac{\partial H_{K'K}}{\partial y_{\mu\nu}} = i(\langle \Phi | \hat{H} P_{K'K}^J A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle - \langle \Phi | A_{\mu\nu} \hat{H} P_{K'K}^J | \Phi \rangle) + 2H_{K'K} \text{Im} \langle \Phi | A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle, \quad (22)$$

$$\frac{\partial N_{K'K}}{\partial y_{\mu\nu}} = i(\langle \Phi | P_{K'K}^J A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle - \langle \Phi | A_{\mu\nu} P_{K'K}^J | \Phi \rangle) + 2N_{K'K} \text{Im} \langle \Phi | A_{\mu\nu}^\dagger | \Phi \rangle. \quad (23)$$

有了能量 E_J 及其梯度 ∇E_J , 似乎就可以采用如 BFGS 等准牛顿法迭代求 E_J 的极小了。这个办法在上节的 VAP 计算中似乎还比较奏效。然而在时间反演对称性破缺下, 采用这种方法进行 VAP 计算, 其收敛速度非常缓慢, 有时根本不收敛。在目前没有其他办法的情况下, 我们不得不考虑计算 E_J 的 Hessian 矩阵。

在一个多元函数的泰勒展开式中, 一次项系数为梯度的分量, 二次项系数即为 Hessian 矩阵元, 也就是函数的二阶偏导数。理论上, 如果函数值达到极小, 则此时 Hessian 矩阵是正定或半正定的。如果是正定的, 则极小点是唯一的。如果是半正定的, 则极小点不唯一。我们将看到, VAP 收敛后, Hessian 是半正定的, 表明极小点不唯一, 这极可能是准牛顿法在 VAP 计算中不太奏效的原因所在, 因为在准牛顿法中, 一般假定 Hessian 是正定的。

对 Hessian 矩阵的计算比梯度计算要复杂得多, 基本思路是对式 (19) 再进行一次偏导。受篇幅限制详细过程见文献[16]。有了 E_J 的 Hessian 矩阵, 我们可以采用严格的信赖区域牛顿法进行 VAP 迭代计算了[17]。

这里仍然采用 UDSB 相互作用, 对若干 sd 壳原子核的晕态进行了 VAP 计算。由于选取的 HF 真空态具有一般性, 因此也可用于描述奇 A 核和奇奇核。因此, 当前的 VAP 可以用于统一描述偶偶核, 奇 A 核和奇奇核的晕态。实际上, 我们计算了 ^{24}Mg , ^{25}Mg , ^{26}Mg 和 ^{26}Al 这四个代表性原子核, 结果如图 3 所示。

从图 3 可以看出 VAP 能量非常接近壳模型能量。这再次表明, 自旋(角动量)投影是获得很好壳模型近似的关键因素。能量接近精确解, 往往其对应的波函数也具有很好的近似性。采用与 VAP 能量对应的 VAP 波函数, 用于计算 $B(E2)$, 所得结果与壳模型结果如图 4 所示。可以看出 VAP 给出的 $B(E2)$ 跃迁矩阵元与壳模型结果也十分接近。

本节最后讨论一下能量 E_J 的 Hessian 矩阵。数学上, Hessian 矩阵的正定性由其本征值正负号直观得到。由图 5 可以看出, 在初始 HF 态处, 所得 Hessian

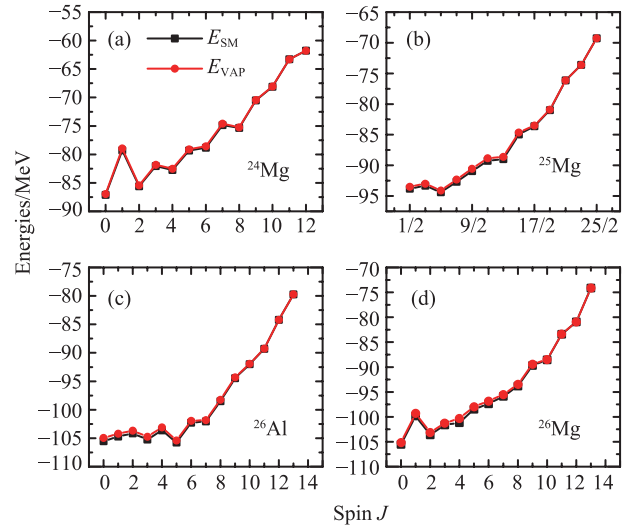


图 3 (在线彩图) 计算的 VAP 能量与壳模型能量的比较, 采用的相互作用为 USDB, 取自文献[16]

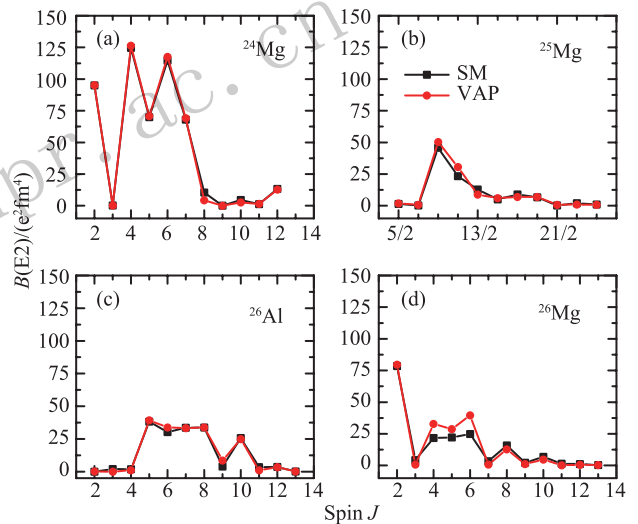


图 4 (在线彩图) 由图 3 对应的波函数计算的值 $B(E2)$, 取自文献[16]

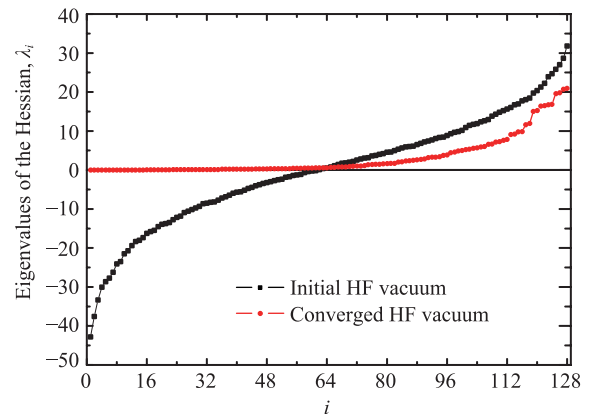


图 5 (在线彩图) ^{24}Mg 基态投影能量的 Hessian 本征值。黑色点表示 VAP 初始 Hessian 的本征值; 红色点表示 VAP 收敛后 Hessian 本征值; 取自文献[16]。

矩阵的本征值有正有负, 表明在非极小处 Hessian 是个不定矩阵。这与准牛顿法中假定 Hessian 正定的情形很不相同。当 VAP 能量收敛后, 对应的 Hessian 矩阵渐渐趋近于半正定了。

2.3 任意非晕态的 VAP 新算法

VAP 对原子核晕态的很好描述使我们有信心将其推广至描述非晕态。在这之前, VAMPIR 方法已经采用 Gram-Schmidt 正交化方法实现了对原子核非晕态的描述。为方便与我们的工作进行比较, 这里简单介绍一下 Gram-Schmidt 正交化处理方法。对于基态, 我们用试探波函数 $|\Phi_1\rangle$ 描述, 对 $|\Phi_1\rangle$ 变分使能量期望值

$$E_1 = \frac{\langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_1 | \Phi_1 \rangle} \quad (24)$$

取极小。这个极小值就是理论给出的基态能量。对于第一激发态, 我们需要用第二个试探波函数 $|\Phi_2\rangle$ 描述。如果仿照基态做法直接求 $\langle \Phi_2 | \hat{H} | \Phi_2 \rangle$ 的能量极小值, 则必然又会回到基态, 而得不到第一激发态的信息。这源于没有考虑 $|\Phi_1\rangle$ 与 $|\Phi_2\rangle$ 的正交性。采用 Gram-Schmidt 正交化方法, 即将 $|\Phi_2\rangle$ 中, 与 $|\Phi_1\rangle$ 重叠的部分去掉, 剩下的部分就是

$$|\Psi_2\rangle = |\Phi_2\rangle - \langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle |\Phi_1\rangle. \quad (25)$$

显然我们有 $\langle \Phi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$ 。固定 $|\Phi_1\rangle$, 对 $|\Psi_2\rangle$ 变分, 求

$$E_2 = \frac{\langle \Psi_2 | \hat{H} | \Psi_2 \rangle}{\langle \Psi_2 | \Psi_2 \rangle} \quad (26)$$

极小, 就可以得到第一激发态能量, 并将 $|\Psi_2\rangle$ 作为第一激发态波函数。为方便推导, 我们记

$$|\Psi_1\rangle = |\Phi_1\rangle. \quad (27)$$

依此类推, 我们固定前 $n-1$ 个 $|\Phi_i\rangle$, 对 $|\Phi_n\rangle$ 进行变分得到第 $n-1$ 个激发态能量

$$E_n = \frac{\langle \Psi_n | \hat{H} | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle}, \quad (28)$$

其中

$$|\Psi_n\rangle = |\Phi_n\rangle - \sum_{i=1}^{n-1} \langle \Phi_i | \Phi_n \rangle |\Phi_i\rangle. \quad (29)$$

若试探波函数 $|\Phi_i\rangle$ 取为一个投影的 HFB 真空态, 则以上过程就是 EXCITED VAMPIR^[4] 方法。为了更进一步改进波函数, $|\Phi_i\rangle$ 也可取为若干投影 HFB 真空态的线性叠加, 这就是 EXCITED FED VAMPIR(EFV)^[4, 18] 方法的基本思路。

显然在 VAMPIR 激发态的计算中, 迭代过程的每一步都不可避免地要进行 Gram-Schmidt 正交化处理, 在计算的核态较多时会越来越麻烦。这里我们并不打算采取以上思路开展 VAP 计算, 而是提出了一套完全不同的全新算法^[19]。该方法基于矩阵理论中的柯西交错定理, 将所考虑的低激发态同时进行变分, 并同时得到所有低激发态。各态的正交性由求解 Hill-Wheeler 方程得到保证。

首先介绍一下柯西交错定理。记任意 n 阶厄密矩阵 A_n 的本征态为 $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$, 任意 m 阶厄密矩阵 B_m 的本征态为 $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_m$ 。设厄密矩阵 A_n 基于 B_{n-1} 构建而成

$$A_n = \begin{pmatrix} B_{n-1} & \mathbf{y} \\ \mathbf{y}^\dagger & a \end{pmatrix}, \quad (30)$$

其中: a 是一个任意实数; \mathbf{y} 是一个任意 $n-1$ 维复数矢量, 则有如下柯西交错定理^[20]:

$$\mu_1 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \mu_j \leq \lambda_j \leq \mu_{j+1} \leq \dots \leq \lambda_{n-1} \leq \mu_n. \quad (31)$$

反复利用柯西交错定理, 可以得到以下结论: 对于任意厄密矩阵 A_n 的主子矩阵 (Principle submatrix) B_m , 有如下关系,

$$\mu_j \leq \lambda_j \leq \mu_{j+n-m} \quad (1 \leq j \leq m). \quad (32)$$

由于么正变换不改变厄密矩阵的本征值, 以上结论很容易推广为庞加莱分离定理 (Poincaré separation theorem)^[20]: 假定厄密矩阵 A_n 定义在一个 n 维空间里, 在该空间取 m 个正交归一复矢量 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m$, 由此构建一个 m 阶厄密矩阵 B_m 如下:

$$(B_m)_{ij} = \mathbf{u}_i^\dagger (A_n) \mathbf{u}_j, \quad (33)$$

则我们仍然有不等式 (32) 成立。

更一般的情形下, 若矢量 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m$ 彼此不是正交归一的, 但假定它们还是彼此独立 (若有冗余矢量去掉即可), 例如此处将要采用的投影波函数, 则一般要去求解如下广义本征方程

$$\sum_{j=1}^m [(B_m)_{ij} - \lambda_k (N_m)_{ij}] f_j^k = 0, \quad (34)$$

其中 $(B_m)_{ij} = \mathbf{u}_i^\dagger (A_n) \mathbf{u}_j$, $(N_m)_{ij} = \mathbf{u}_i^\dagger \mathbf{u}_j$ 。为了求解式 (34), 首先要对角化 N_m , 得到

$$\sum_{j=1}^m (N_m)_{ij} R_j^k = n_k R_i^k, \quad (35)$$

其中 $n_k > 0$ 和 R^k ($k = 1, 2, \dots, m$) 分别是 N_m 的本征值和本征矢。由此, 我们可以在非正交归一矢量 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m$ 张开的子空间中构造一套正交归一的新矢量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m$ 。

$$\mathbf{v}_k = \sum_{i=1}^m \frac{R_i^k \mathbf{u}_i}{\sqrt{n_k}}。 \quad (36)$$

这样, 我们又可以构造一个新的厄密矩阵 C_m , 其矩阵元为 $(C_m)_{ij} = \mathbf{v}_i^\dagger(A_n)\mathbf{v}_j$ 。容易证明, 式 (34) 的本征值与 C_m 的完全相同。通常, 我们就是通过对角化 C_m 得到 λ_k 的。根据庞加莱分离定理得知, 不等式关系式 (32) 此时仍然成立。

对于给定的哈密顿量 \hat{H} , 满空间壳模型精确解记为 $e_1 \leq e_2 \leq \dots$ 。这里, 假定我们只对最低 m 个核态感兴趣。实际上, 壳模型也只计算少数低激发态。在所有近似壳模型计算中, 人们总是希望能找到一个合适的组态子空间, 使所得近似能量尽可能接近精确解。记在某子空间中壳模型近似能量为 $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_m$, 由柯西交错定理及庞加莱分离定理, 总有

$$E_j \geq e_j \quad (1 \leq j \leq m)。 \quad (37)$$

故, 我们可以定义非负能量差

$$\delta E_j = E_j - e_j \geq 0 \quad (38)$$

以及 δE_j 之和

$$\Delta E = \sum_{j=1}^m \delta E_j = \sum_{j=1}^m E_j - \sum_{j=1}^m e_j。 \quad (39)$$

若 $\Delta E = 0$, 必有所有的 $\delta E_j = 0$, 即有 $E_j = e_j$ 。这意味着我们得到了壳模型的精确解。但在壳模型近似计算中通常 $\Delta E > 0$, 显然, 我们期望选取最优化的壳模型子空间, 使 ΔE 的值越小越好。当 ΔE 达到最小值时, 所有 m 个近似低激发态也就同时被确定下来。这些态的近似性好坏只能通过与壳模型直接比较才能得到检验。

我们注意到, 对于给定的哈密顿量 \hat{H} , 其本征值 e_i 是确定不变的, 即等式 (39) 右侧第二项是个常数。由此可知, 求 ΔE 的极小值等价于求这 m 个最低能量和 $\sum_{j=1}^m E_j$ 的极小值。事实上, 对后者求极小值更为实际, 因为在大多数情况下, e_j 无法得到。为方便起见, 记近似能量之和为

$$S_m = \sum_{j=1}^m E_j。 \quad (40)$$

壳模型子空间基矢的选取方式灵活, 这里我们仍然沿用上节投影 HF 真空态。但如果只选取一个投影 HF 真空态显然不够, 我们需要若干个 (记为 n 个) 独立的投影 HF 真空态, 将其作为基矢构造一个维数不太大的组态子空间, 以足够同时描述 m 个低激发态。在这个组态子空间里, 原子核波函数可写成如下形式:

$$|\Psi_{JM}\rangle = \sum_{k=1}^n \sum_{K=-J}^J f_{Kk} P_{MK}^J |\Phi^k\rangle, \quad (41)$$

其中 $|\Phi^k\rangle$ 为互不相同的 HF 真空态, 由指标 k 区分。 $|\Phi^k\rangle$ 的构造方式与上节完全相同。

对于一组给定的 $|\Phi^k\rangle$ 真空态, 可以建立相应的 Hill-Wheeler 方程

$$\sum_{Kk} (H_{K'k',Kk} - EN_{K'k',Kk}) f_{Kk} = 0 \quad (42)$$

及归一化条件

$$\sum_{K'k',Kk} f_{K'k'}^* f_{Kk} N_{K'k',Kk} = 1, \quad (43)$$

其中

$$H_{K'k',Kk} = \langle \Phi^{k'} | \hat{H} P_{K'K}^J | \Phi^k \rangle, \quad (44)$$

$$N_{K'k',Kk} = \langle \Phi^{k'} | P_{K'K}^J | \Phi^k \rangle。 \quad (45)$$

求解方程 (42), 可以得到能量 $E_1 \leq E_2 \leq \dots$ 及相应波函数 $|\Psi_{JM}^1\rangle, |\Psi_{JM}^2\rangle, \dots$ 。显然这些能量随选取的 $|\Phi^k\rangle$ 变化而相应变化。我们需要找到一组这样的 $|\Phi^k\rangle$ 态, 使得 S_m 取极小值。在 VAP 计算中, 与上节讨论类似, 数值上也需计算 S_m 的梯度及 Hessian^[16, 19], 以保证迭代稳定, 且快速收敛。

我们首先尝试最简单的 VAP 非晕态计算, 即取两个独立的 HF 真空态 ($n = 2$), 计算两个最低能量 E_1 和 E_2 ($m = 2$)。仍然采用 UDSB 相互作用, 还是计算 ^{24}Mg , ^{25}Mg , ^{26}Mg 和 ^{26}Al 这 4 个原子核, 但需要更多地算出次晕态能量, 结果如图 6 所示。容易看出无论是晕态还是次晕态, VAP 能量与壳模型能量非常接近, 初步验证了新方法的有效性。更细致的比较发现 VAP 能量 E_j 与壳模型能量 e_j 之间的确存在确定的 $E_j \geq e_j$ 关系, 数值上验证了柯西交错定理及庞加莱分离定理的有效性。

在实际应用中, 仅仅计算两个最低核态往往不够, 为此我们尝试选取 10 个不同的 HF 真空态, 同时计算 10 个相同自旋的低激发态, 这里只算 0^+ 态。我们对 sd 壳偶偶核的 10 个最低 0^+ 态进行了系统的 VAP 计

算, 并与相应壳模型结果进行了比较, 结果如图 7 所示。可以清楚地看出, 无论是较低激发态还是较高激发态, VAP 都能给出很好的近似结果。更细致的比较表明 $E_j \geq e_j$ 关系依然成立。

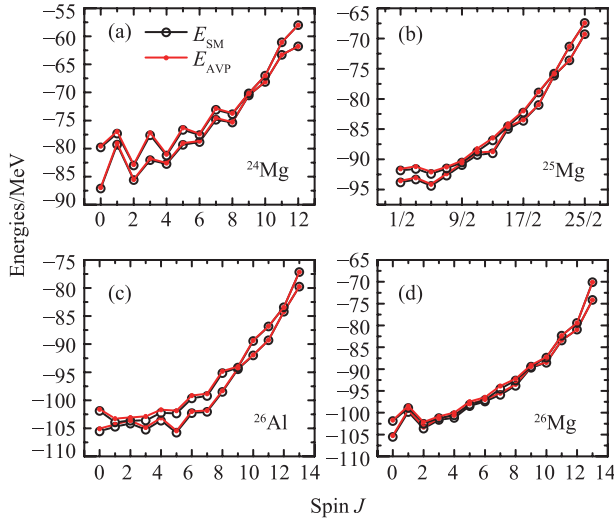


图 6 (在线彩图) 计算的 VAP 晕态和次晕态能量与相应壳模型能量的比较
采用的相互作用为 USDB。取自文献[19]。

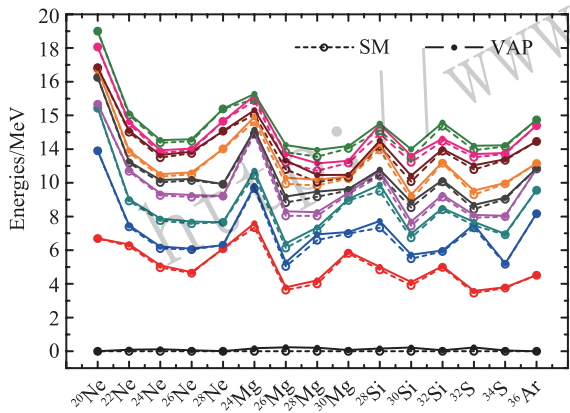


图 7 (在线彩图) sd 壳偶偶核最低 10 个 0^+ 态的 VAP 能量与相应壳模型能量的比较
采用的相互作用为 USDB。取自文献[19]。

最后, 我们将新算法与 VAMPIR 算法作个简单比较。采用两个独立的 HF 真空态 ($n = 2$) 计算 ^{24}Mg 的 0^+ 基态 ($m = 1$)。壳模型计算出精确的基态能量为 -87.104 MeV。在我们的 VAP 计算中, 同时对两个 HF 真空态变分, 得到收敛的能量极小为 -87.039 MeV。若采用 VAMPIR 算法, 则首先对第一个 HF 真空态变分, 得到能量极小为 -86.936 MeV。固定这个已获得的 HF 真空态, 再加入第二个 HF 真空态, 并对这第二个 HF 真空态进行变分, 所得能量极小进一步降低至 -87.008 MeV。可以看出, VAMPIR 得到的能

量高于我们的 VAP 能量 -87.039 MeV, 表明 VAMPIR 算法给出的波函数并不是最优化的。有趣的是, 如果将第二个所得 HF 真空态固定, 回头再对第一个 HF 真空态变分, 我们发现能量极小居然又进一步降为 -87.015 MeV。很显然, VAMPIR 的这一问题, 来源于基矢波函数是一个接一个先后加进来的, 这是该模型的一个先天缺陷。在包含激发态的计算中, VAMPIR 的这种非最优化现象同样存在。而在我们的 VAP 算法中, 基矢波函数同时变分, 从而得到了最充分的优化。

2.4 VAP 新算法在 psd 壳中的应用

以上 VAP 计算仅限于一个主大壳, 即 sd 壳。这在很多实际问题的分析中肯定不够, 因而需要进一步扩展模型空间。最近, 我们又将 VAP 模型空间作了进一步扩展, 即将 sd 壳扩展为 psd 壳, 也就是包含 $N = 1, 2$ 两个主大壳。

由于包含多个主大壳, 会带来两个问题。其一, HF 真空态的空间反射对称性可能会被破坏, 宇称不再是好量子数; 其二, 需要处理质心问题。

对于前一个问题, 必须对 HF 真空态作自旋投影的同时, 还要进行宇称投影。这时 VAP 波函数形式为

$$|\Psi_{J,M}^\pi\rangle = \sum_K f_K P_{MK}^J P^\pi |\Phi\rangle, \quad (46)$$

其中 $P^\pi = \frac{1}{2}(1 + \pi\hat{P})$ 为宇称投影算符, \hat{P} 为宇称算符, $\pi = \pm 1$ 为宇称量子数。由于宇称投影的加入, VAP 的计算量会额外增加一倍。

对于质心问题, 我们采用文献[21]中的做法, 即在原壳模型哈密顿量 H_{SM} 上加一质心谐振子项。即我们采用如下哈密顿量进行壳模型计算,

$$H = H_{SM} + \beta \left\{ \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 R^2 - \frac{3}{2} \hbar \omega \right\}, \quad (47)$$

其中: $M = Am$ 为体系总质量; m 为核子质量; A 为质量数; $\hat{P} = \sum_{i=1}^A \hat{p}_i$ 为总动量算符; $\hat{R} = \frac{\sum_{i=1}^A r_i}{A}$ 为质心坐标。如果 β 取一足够大的数, 这将从能量上有效降低质心运动波函数与原子核内部运动波函数的混杂。

我们以定义在 psd 壳的哈密顿量 PSDMK^[22] 为例开展 VAP 计算。作为初步应用, 对每组自旋宇称, 取两个独立的 HF 真空态 ($n = 2$), 并且仅计算能量最低态, 即只计算晕态 ($m = 1$)。我们计算了 ^{12}C 的自旋 $J \leq 4$ 的晕态, 所得结果如图 8 所示。计算中已经考虑了质心修正, 并取式 (47) 中的 $\beta = 10$ 。由图可见, 采用两个投影的 HF 真空态描述 ^{12}C 的晕态, 还是可以给出较好的壳模型近似。显然, 如果图 8 的 VAP 近似还

达不到要求, 则可以进一步增加 HF 真空态数 n 以得到更好的壳模型近似。

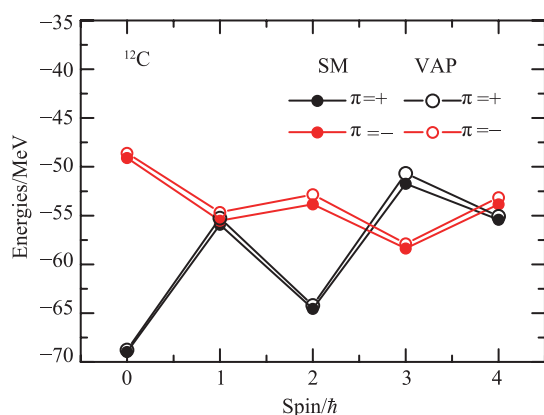


图 8 (在线彩图) ^{12}C 正负宇称晕态的 VAP 能量与相应壳模型能量的比较
采用的相互作用为 PSDMK。

3 总结

本文将近几年来我们逐步建立的投影后变分 (VAP) 新方法做了比较系统的阐述。首先, 作为初步尝试, 开展了偶偶核基态的 VAP 计算, 平均场选取为 HFB 真空态。我们得出两个主要结论: (1) 角动量投影是获得很好壳模型近似的关键因素; (2) 在平均场框架下, 原子核形状普遍具有轴对称性, 但在 VAP 框架下, 原子核形状则普遍具有非轴对称性。基于以上结论, 我们将平均场选取为更简单的 HF 真空态 (即 Slater 行列式, SD)。对于 HF 真空态, 粒子数是好量子数, 故只须对其做角动量投影, 这就省去了 VAMPIR 计算中必需的粒子数投影。考虑时间反演对称性破缺, VAP 可以计算各种原子核的转晕态, 其结果与壳模型非常接近。为了完善 VAP 计算, 需要将 VAP 扩展至非转晕激发态的计算。我们基于柯西交错定理, 提出了计算原子核任意低激发态的新算法。计算结果表明, 所得原子核激发态能量都非常接近相应壳模型精确解。最近, 我们将模型空间进一步扩展至多个大壳。通过引入宇称投影, 实现了同一核中正负宇称态的完整描述。至此, 我们的 VAP 方法可以计算原子核的所有各种低激发态。

需要指出, 不等式 (37) 是在纯数学定理基础上推出来的, 与具体物理没有任何关系。因此, 这里介绍的新方法应该具有普遍性, 可应用于各种量子多体体系的理论计算中, 例如量子化学中多电子体系^[23]等。

此外, 利用不等式 (37) 计算低激发态, 对试探波函数的形式也没有任何限制。虽然本文采用的波函数为投影的 HF 真空态, 但是, 也可以根据实际问题研究的

方便, 灵活采用其他形式的试探波函数, 例如不做投影的 HF 真空态。如果采用若干未做投影的 HF 真空态, 并同时变分, 利用不等式 (37) 也可以同时得到量子多体体系的低激发态。这实际上就是将 HF 方法进一步发展为可以计算低激发态的又一类超越平均场方法。目前我们还没有基于这一方法开展实际计算, 但是期待它能够重核区中得到实际应用。

参考文献:

- [1] HOROI M, BROWN B A, ZELEVINSKY V. *Phys Rev C*, 1994, **50**: 2274.
- [2] KOONIN S E, DEAN D J, LANGANKE K. *Phys Rep*, 1997, **278**: 1.
- [3] OTSUKA T, HONMA M, MIZUSAKI T, *et al.* *Prog Part Nucl Phys*, 2001 **47**: 319.
- [4] SCHMID K W. *Prog Part Nucl Phys*, 2004, **52**: 565.
- [5] HU Qingli, GAO Zaochun, CHEN Yongshou. *Phys Lett B*, 2014, **734**: 162.
- [6] DELAROCHE J P. *Phys Rev C*, 2010, **81**: 014303.
- [7] MAQBOOL I, SHEIKH J A, GANAI P A, *et al.* *J Phys G*, 2011, **38**: 045101.
- [8] RODRÍGUEZ-GUZMÁN R, ALHASSID Y, BERTSCH G F. *Phys Rev C*, 2008, **77**: 064308.
- [9] ROBLEDO L M, BERTSCH G F. *Phys Rev C*, 2011, **84**: 014312.
- [10] GAO Zaochun, HOROI M, CHEN Y S. *Phys Rev C*, 2015, **92**: 064310.
- [11] RING P, SCHUCK P. *The Nuclear Many-Body Problem*[M]. New York: Springer Verlag, 1980.
- [12] BROWN B A, RICHTER W A. *Phys Rev C*, 2006, **74**: 034315.
- [13] SUN Y. *Phys Scr*, 2016, **91**: 043005.
- [14] HAYASHI A, HARA K, RING P. *Phys Rev Lett*, 1984, **53**: 337.
- [15] ENAMI K I. *Prog Theor Phys (Kyoto)*, 2000, **104**: 757.
- [16] TU Ya, HE Yan, Gao Zaochun, *et al.* *Phys Rev C*, 2017, **95**: 064307.
- [17] NORCEDAL J, WRIGHT S J. *Numerical Optimization*[M]. New York: Springer Verlag, 2006.
- [18] SCHMID K W, ZHENG R R, GRÜMMER F, *et al.* *Nucl Phys A*, 1989, **499**: 63.
- [19] WANG Jiaqi, GAO Zaochun, Ma Yingjun, *et al.* *Phys Rev C*, 2018, **98**: 021301(R).
- [20] HORN R A, JOHNSON C R. *Matrices Analysis*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.
- [21] GLOECKNER D H, LAWSON R D. *Phys Lett B*, 1974, **53**: 313.
- [22] MILLNER D J, KURATH D. *Nucl Phys A*, 1975, **255**: 315.
- [23] JIMÉNEZ-HOYOS C A, RODRÍGUEZ-GUZMÁN R, SCUSERIA G E. *J Chem Phys*, 2013, **139**: 224110.

New Variation After Projection Calculations for Low-lying Nuclear States

GAO Zaochun¹⁾, CHEN Yongshou

(China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

Abstract: We present a comprehensive introduction in our newly developed Variation After Projection (VAP) calculations for the low-lying nuclear states. First, we discussed the VAP calculation with a fully *JTA*-projected wavefunction for the ground state in even-even nucleus. This leads to the conclusion that the spin projection plays a key role in obtaining a good shell model approximation. With this conclusion, we simplified the VAP with a time-odd Hartree-Fock mean field, on which only spin projection is required. Due to the time reversal symmetry breaking, this VAP now can be applied to the yrast states in all kinds of nuclei. It turns out that our VAP yrast energies as well as the corresponding VAP wavefunctions are very close the exact ones from the full shell model calculations. Such good approximation encourages us to extend the VAP calculations further to the non-yrast nuclear states. For this purpose, we proposed a new algorithm in our VAP based on the Cauchy's interlacing theorem. This theorem ensures that the sum of the calculated lowest projected energies with the same quantum numbers can be safely minimized. After minimization, all the calculated states can be determined simultaneously. Again, all the calculated VAP energies are very close to the exact shell model results. Recently, we have added the parity projection into the VAP, and the yrast states with both parity in ^{12}C have been calculated in the *psd* model space. This time, we still have good shell model approximation for both parity states. Finally, we should point out that the present algorithm should be applicable to the low-lying states in different quantum many-body systems.

Key words: Cauchy's interlacing theorem; variation after projection; low-lying states; shell model; USDB interaction

Received date: 10 Sep. 2018; **Revised date:** 19 Oct. 2018

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(11575290)

1) E-mail: zcgao@ciae.ac.cn.