

## 刚性对称陀螺分子Stark效应的精确解

陈昌远 孙国华 王晓华 孙东升 尤源 陆法林 董世海

### Exact solutions to Stark effect of rigid symmetric-top molecules

Chen Chang-Yuan Sun Guo-Hua Wang Xiao-Hua Sun Dong-Sheng You Yuan Lu Fa-Lin Dong Shi-Hai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 180301 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210214

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210214>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

非对称双原子分子在输运扩散中的取向效应

Orientation effect of asymmetric diatomic molecules in transport diffusion

物理学报. 2018, 67(22): 226601 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181376>

广义(3+1)维Zakharov-Kuznetsov方程的对称约化、精确解和守恒律

Symmetry reductions, exact equations and the conservation laws of the generalized (3+1) dimensional Zakharov-Kuznetsov equation

物理学报. 2017, 66(8): 080201 <https://doi.org/10.7498/aps.66.080201>

基于调制光晶格的中性分子束光学Stark减速与囚禁的理论研究

Theoretical research on optical Stark deceleration and trapping of neutral molecular beams based on modulated optical lattices

物理学报. 2018, 67(20): 203702 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181348>

可积系统多孤子解的全反演对称表达式

Full reversal symmetric multiple soliton solutions for integrable systems

物理学报. 2020, 69(1): 010503 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191172>

Stark效应诱导的类氢离子 $2s_{1/2}-1s_{1/2}$ 跃迁几率的理论研究

Theoretical investigation on Stark-induced transition probabilities of hydrogen-like ions

物理学报. 2021, 70(17): 173201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210181>

一类多能级Rosen-Zener模型的精确解

Exact solution to a kind of multi-level Rosen-Zener models

物理学报. 2019, 68(13): 133201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190353>

## 刚性对称陀螺分子 Stark 效应的精确解\*

陈昌远<sup>1)†</sup> 孙国华<sup>2)</sup> 王晓华<sup>1)</sup> 孙东升<sup>1)</sup>尤源<sup>1)</sup> 陆法林<sup>1)</sup> 董世海<sup>3)4)‡</sup>

1) (盐城师范学院物理与电子工程学院, 盐城 224007)

2) (Catedrática CONACYT, CIC, Instituto Politécnico Nacional, CDMX 07700, Mexico)

3) (湖州师范学院量子物理研究中心, 湖州 313000)

4) (Laboratorio de Información Cuántica, CIDETEC, Instituto Politécnico Nacional, UPALM, CDMX 07700, Mexico)

(2021 年 1 月 28 日收到; 2021 年 5 月 5 日收到修改稿)

提出了一种精确求解位于外电场中刚性对称陀螺分子转动能级和相应解析波函数的新方法. 首先利用不同形式的函数变换和变量代换将位于外电场中对称陀螺分子的极角  $\theta$  方向的方程转化为合流 Heun 微分方程, 然后根据合流 Heun 微分方程和合流 Heun 函数具有的特点, 找到描述同一本征态的线性相关的两个解, 构造 Wronskian (朗斯基) 行列式, 得到精确的能谱方程. 最后利用 Maple 软件计算出不同量子态的本征值, 再将得到的本征值代入本征函数进行归一化运算最终得到用合流 Heun 函数表示的解析的归一化本征函数. 这些结果可为深入研究对称陀螺分子的 Stark 效应提供有益的帮助.

**关键词:** 精确解析解, Stark 效应, 刚性对称陀螺分子, 合流 Heun 函数

**PACS:** 03.65.Ge, 03.65.Db, 02.30.-f, 02.30.Gp

**DOI:** 10.7498/aps.70.20210214

## 1 引言

对称陀螺分子可分为两大类: 一类为长对称陀螺分子, 其 3 个惯量主轴的转动惯量为  $I_A < I_B = I_C$ , 这时旋转对称轴为  $A$ ; 另一类为扁对称陀螺分子, 其 3 个惯量主轴的转动惯量为  $I_A = I_B < I_C$ , 这时旋转对称轴为  $C$ . 为了统一处理这两种情况, 人们取旋转对称轴为运动坐标系的  $z'$  轴方向, 并约定其转动惯量为  $I_C$ , 其余相等的两个转动惯量为  $I_B$ . 引入参数  $a = I_B/I_C$ , 于是长对称陀螺分子  $a > 1$ , 扁对称陀螺分子  $a < 1$ . 按惯例采用欧拉角  $(\theta, \phi, \chi)$ , 则位于外电场中对称陀螺分子的哈密顿量为<sup>[1-3]</sup>

$$H = -\frac{\hbar^2}{2I_b} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \left( \frac{\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} + a \right) \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - \frac{2 \cos \theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \phi} \right] - D \varepsilon \cos \theta, \quad (1)$$

式中  $D$  是对称陀螺分子的电偶极矩, 其方向在运动坐标系的  $z'$  轴方向; 电场  $\varepsilon$  的方向在空间固定坐标系的  $z$  轴方向. 由于附加项的出现, 该方程至今都没有完整的精确解. 当附加项系数  $D\varepsilon$  很小时, 人们常用微扰理论来研究对称陀螺分子的 Stark 能级. 文献 [1, 2] 给出能级准确到 2 级近似的结果, 文献 [3-10] 给出能级更高级修正的结果, 其中文献 [3, 6, 7] 还列出了用  $100 \times 100$  以及  $200 \times 200$  矩阵对角化方法得到的计算精度很高的精确值. 以前的工作人们只专注于如何得到较为准确的

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11975196) 和墨西哥国立理工大学基金 (批准号: 20210414) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [chency@yctu.edu.cn](mailto:chency@yctu.edu.cn)

‡ 通信作者. E-mail: [dongsh2@yahoo.com](mailto:dongsh2@yahoo.com)

能量本征值, 而忽略了对本征函数的研究, 这无疑影响了人们对刚性对称陀螺分子的 Stark 效应的全面了解.

那么有什么方法既可获得准确的本征能量, 又能得到解析的归一化波函数呢? 根据我们最近对一维 Mathieu 势的 Schrödinger 方程<sup>[11]</sup>和刚性转子 Stark 效应精确解的研究<sup>[12]</sup>, 以及对  $s = 0$  时角向 Teukolsky 方程<sup>[13,14]</sup>精确解的研究, 本文提出一种能精确求解对称陀螺分子 Stark 效应的新方法. 首先进行分离变量和变量代换  $x = \cos \theta$  ( $0 \leq \theta \leq \pi, 1 \geq x \geq -1$ ), 再利用不同形式的函数变换和变量代换方法把关于  $x$  的微分方程转化为合流 Heun 微分方程, 然后根据该方程及其解析解, 即合流 Heun 函数的特性, 给出对应于同一本征态线性相关的两个解, 并以此构造朗斯基行列式, 给出精确的能量值必须满足的方程. 借助于 Maple 软件中的合流 Heun 函数及其一阶导数进行编程运算就能计算出精确的能量本征值, 然后进行归一化运算给出的就是用合流 Heun 函数表示的归一化的解析的本征函数. 由于本文提出的方案不仅能得到精确的本征值, 而且还给出用合流 Heun 函数表示的解析的归一化本征函数. 所以其结果将对研究对称陀螺分子的 Stark 效应的能级分裂和振子

强度等一系列实际问题带来极大的方便.

## 2 朗斯基行列式

令  $\psi(\theta, \phi, \chi) = e^{iM\phi} e^{iK\chi} \Theta(\theta)$ , 并作变量代换  $x = \cos \theta$ , 则定态 Schrödinger 方程  $H\psi = E\psi$  可以分离变量, 得到关于  $x$  的微分方程为

$$(1-x^2) \frac{d^2\Theta(x)}{dx^2} - 2x \frac{d\Theta(x)}{dx} + \left[ \lambda' - aK^2 + bx - \frac{(M-Kx)^2}{1-x^2} \right] \Theta(x) = 0, \quad (2)$$

式中  $\lambda' = 2I_B E / \hbar^2$ ;  $b = 2I_B \varepsilon D / \hbar^2$ ;  $M = 0, \pm 1, \dots, \pm J, K = 0, \pm 1, \dots, \pm J$ , 其中  $J = 0, 1, 2, \dots$  为对称陀螺分子的角动量量子数,  $M$  是角动量在空间固定坐标系  $z$  方向的投影量子数,  $K$  是角动量在空间运动坐标系  $z'$  方向的投影量子数. (2) 式是典型的施图姆-刘维尔边值问题, 当  $x \rightarrow \pm 1$  时, 本征函数  $\Theta(x)$  必须满足有限值这一自然边界条件. 当没有外电场, 即 (2) 式中  $b = 0$  时, 微分方程 (2) 是可以精确求解的, 其结果为<sup>[1,2]</sup>

$$E_{J|K|} = \frac{\hbar^2}{2I_B} [J(J+1) + (a-1)K^2], \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \psi_{JMK}(\theta, \phi, \chi) = N_{JMK} e^{iM\phi} e^{iK\chi} & \left( \frac{1-\cos\theta}{2} \right)^{\frac{|K-M|}{2}} \left( \frac{1+\cos\theta}{2} \right)^{\frac{|K+M|}{2}} \\ & \times {}_2F_1 \left( -n, J+1 + \frac{|K+M|}{2} + \frac{|K-M|}{2}, 1+|K-M|, \frac{1-\cos\theta}{2} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

$$N_{JMK} = \left[ \frac{(2J+1)(J+|K+M|/2+|K-M|/2)!(J-|K+M|/2+|K-M|/2)!}{8\pi^2(|K-M|!)^2(J-|K+M|/2-|K-M|/2)!(J+|K+M|/2-|K-M|/2)!} \right]^{1/2}, \quad (5)$$

$J = n + |K+M|/2 + |K-M|/2 = 0, 1, 2, \dots$ , (6) 式中  ${}_2F_1$  是  $n$  阶的超几何多项式. 从 (3)–(6) 式可以看到, 对于同样的状态  $(JKM)$ , 长对称陀螺分子和扁陀螺分子的能级是不一样的, 但波函数的表达式相同. 下面的研究表明, 该特点在讨论对称陀螺分子的 Stark 效应时保持不变.

为了统一研究长对称陀螺分子和扁对称陀螺分子, 引入参数

$$\lambda = \lambda' - (a-1)K^2. \quad (7)$$

当计算出精确的  $\lambda$  值后, 不同类型的对称陀螺分子的能级为

$$E = \frac{\hbar^2}{2I_B} [\lambda + (a-1)K^2]. \quad (8)$$

考虑到本征函数  $\Theta(x)$  在  $x \rightarrow \pm 1$  时应满足有界的自然边界条件, 首先对 (2) 式作如下形式的函数变换:

$$\Theta(x) = (1-x)^{\frac{|K-M|}{2}} (1+x)^{\frac{|K+M|}{2}} F(x). \quad (9)$$

把 (9) 式代入 (2) 式得到  $F(x)$  所满足的微分方程:

$$(1-x^2)\frac{d^2F(x)}{dx^2} + 2[m' - (m+1)x]\frac{dF(x)}{dx} + [\lambda - m(m+1) + bx]F(x) = 0, \quad (10)$$

式中

$$m = (|K+M| + |K-M|)/2, \\ m' = (|K+M| - |K-M|)/2. \quad (11)$$

如果对 (10) 式作变量代换  $z=(1-x)/2$  ( $-1 \leq x \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ ), 则 (10) 式可转化为下列合流 Heun 微分方程:

$$\frac{d^2F(z)}{dz^2} + \left( \frac{|K-M|+1}{z} + \frac{|K+M|+1}{z-1} \right) \frac{dF(z)}{dz} + \left\{ \frac{\lambda - m(m+1) + b}{z} + \frac{b - [\lambda - m(m+1)]}{z-1} \right\} F(z) = 0. \quad (12)$$

将 (12) 式和标准的合流 Heun 微分方程 [15,16]

$$\frac{d^2F(z)}{dz^2} + \left( \alpha + \frac{\beta+1}{z} + \frac{\gamma+1}{z-1} \right) \frac{dF(z)}{dz} + \left( \frac{\mu}{z} + \frac{\eta}{z-1} \right) F(z) = 0 \quad (13)$$

相比较, 得到如下各参数:

$$\alpha = 0, \quad \beta = |K-M|, \quad \gamma = |K+M|, \\ \mu = b + [\lambda - m(m+1)], \\ \nu = b - [\lambda - m(m+1)]. \quad (14)$$

由于  $\beta = |K-M| \geq 0$ , 所以 (12) 式的解

$$F(z) = \text{HeunC}(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, z) \\ = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta) z^n \quad (0 \leq z < 1) \quad (15)$$

是一个无穷级数, (15) 式中

$$\delta = \mu + \nu - [\alpha(\beta + \gamma + 2)/2] = 2b, \quad (16)$$

$$\eta = [\alpha(\beta + 1)/2] - [(\beta + \gamma + \beta\gamma)/2] - \mu \\ = -\lambda - b + (M^2 + K^2)/2. \quad (17)$$

$\text{HeunC}(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, 0) = 1$ , 系数  $v_{-1} = 0, v_0 = 1$ , 相邻 3 个系数之间满足递推关系  $A_n v_n = B_n v_{n-1} + C_n v_{n-2}$ . 根据 (9) 式得到在北极 ( $\theta=0, x=1, z=0$ ) 收敛的解为

$$\Theta_1(x) = (1-x)^{\frac{|K-M|}{2}} (1+x)^{\frac{|K+M|}{2}} H(1), \quad (18)$$

式中

$$H(1) = \text{HeunC}(0, |K-M|, |K+M|, 2b, \\ -\lambda - b + (M^2 + K^2)/2, (1-x)/2). \quad (19)$$

当合流 Heun 函数  $\text{HeunC}(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, z)$  满足如下两个限制条件 [15,16]:

$$\Delta_{N+1}(\mu) = 0, \quad \mu + \nu + N\alpha = 0 \quad (20)$$

时中断为一个  $N$  次多项式, 从而满足在  $z=1$  处的自然边界条件. 然而由 (14) 式可知, 当  $b \neq 0$  时, (20) 式中的第 2 个条件是不满足的.

正如上面分析的, 由于限制条件 (20) 式中的第 2 个是不成立的, 所以只能保持 (18) 式为无穷级数的形式. 当参数  $(K, M, b)$  取确定值时, 正确的  $\lambda$  值应该使得这个无穷级数解在 ( $\theta = \pi, x = -1, z = 1$ ) 时也是有界的. 因此找到正确的本征值  $\lambda$  是解决这一问题的关键. 根据合流 Heun 微分方程及其解析解合流 Heun 函数的特性, 如果对 (10) 式作变量代换,  $z' = 1 - z = (1+x)/2$  ( $-1 \leq x \leq 1, 0 \leq z' \leq 1$ ), 那么 (10) 式将被修改为如下的合流 Heun 微分方程:

$$\frac{d^2F(z')}{dz'^2} + \left( \alpha' + \frac{\beta'+1}{z'} + \frac{\gamma'+1}{z'-1} \right) \frac{dF(z')}{dz'} + \left( \frac{\mu'}{z'} + \frac{\eta'}{z'-1} \right) F(z') = 0, \quad (21)$$

式中参数

$$\alpha' = -\alpha = 0, \quad \beta' = \gamma = |K+M|, \\ \gamma' = \beta = |K-M|, \quad \mu' = -\nu = \lambda - m(m+1) - b, \\ \nu' = -\mu = -[\lambda - m(m+1)] - b, \\ \delta' = -\delta, \quad \eta' = \eta + \delta. \quad (22)$$

由于  $\beta' = |K+M| \geq 0$ , 所以 (21) 式的解也是合流 Heun 函数

$$F(z') = \text{HeunC}(\alpha', \beta', \gamma', \delta', \eta', z') \\ = \text{HeunC}(-\alpha, \gamma, \beta, -\delta, \eta + \delta, 1-z) \\ (0 \leq z' < 1). \quad (23)$$

(23) 式同样也不满足 (20) 式中的第 2 个条件. 这样由 (9) 式就得到在南极 ( $\theta = \pi, x = -1, z' = 0$ ) 收敛的解为

$$\Theta_2(x) = (1-x)^{\frac{|K-M|}{2}} (1+x)^{\frac{|K+M|}{2}} H(2), \quad (24)$$

式中

$$H(2) = \text{HeunC}(0, |K+M|, |K-M|, -2b, \\ -\lambda + b + (M^2 + K^2)/2, (1+x)/2). \quad (25)$$

注意到 (18) 式和 (24) 式都是微分方程 (2) 的解, 因此对于同一本征态, 它们只是数学表达形式

不同而已. 如果本征值  $\lambda$  是正确的值, 那么这两个函数在南北极就应该都收敛, 在开区间  $(-1, +1)$  必须是线性相关的 [17-19]. 这样对于两个不为 0 的任意常数  $C_1$  和  $C_2$  应该有  $C_1\Theta_1(x) + C_2\Theta_2(x) = 0$ , 将 (18) 式和 (24) 式代入约去共同因子就得到  $C_1H(1) + C_2H(2) = 0$ , 对其求一阶导数得  $C_1H'(1) +$

$C_2H'(2) = 0$ , 由此就能得到如下的朗斯基行列式

$$\begin{vmatrix} H(1) & H(2) \\ H'(1) & H'(2) \end{vmatrix} = 0, \quad (26)$$

注意到复合函数的求导规则并采用 Maple 软件中的有关定义展开 (26) 式得

$$\begin{aligned} & \text{HeunC}(0, |K - M|, |K + M|, 2b, -\lambda - b + (M^2 + K^2)/2, (1 - x)/2) \\ & \times \text{HeunCPrime}(0, |K + M|, |K - M|, -2b, -\lambda + b + (M^2 + K^2)/2, (1 + x)/2) \\ & + \text{HeunC}(0, |K + M|, |K - M|, -2b, -\lambda + b + (M^2 + K^2)/2, (1 + x)/2) \\ & \times \text{HeunCPrime}(0, |K - M|, |K + M|, 2b, -\lambda - b + (M^2 + K^2)/2, (1 - x)/2) = 0. \end{aligned} \quad (27)$$

当参数  $(K, M, b)$  取确定值时, 由方程 (27) 可以求得精确的  $\lambda$  值. 由于两个本征函数在整个开区间  $(-1, +1)$  都是线性相关的, 所以为了方便起见取  $x = 0$ .

### 3 本征值和归一化的本征函数

根据无量纲参数  $a = I_B/I_C$ ,  $b = 2I_B\varepsilon D/\hbar^2$  的定义可知, 它们的取值均为正实数. 因此对应于

(2) 式的施图姆-刘维尔边值问题的算符

$$L = -\frac{d}{dx}(1 - x^2)\frac{d}{dx} - bx + \frac{(M - Kx)^2}{1 - x^2} \quad (28)$$

是一个厄米算符 [17-19], 所以本征值  $\lambda$  只能取实数值. 由于不同本征值的本征函数必须是相互正交的, 所以它们组成了函数空间的一个正交归一完备系.

首先讨论下列函数:

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= \text{HeunC}(0, |K - M|, |K + M|, 2b, -\lambda - b + (M^2 + K^2)/2, 0.5) \\ & \times \text{HeunCPrime}(0, |K + M|, |K - M|, -2b, -\lambda + b + (M^2 + K^2)/2, 0.5) \\ & + \text{HeunC}(0, |K + M|, |K - M|, -2b, -\lambda + b + (M^2 + K^2)/2, 0.5) \\ & \times \text{HeunCPrime}(0, |K - M|, |K + M|, 2b, -\lambda - b + (M^2 + K^2)/2, 0.5). \end{aligned} \quad (29)$$

显然, 它表示的是  $f(\lambda)$  随本征值  $\lambda$  的变化情况, 其与横轴交点的函数值是 0, 而对应的  $\lambda$  值就是相应的本征值. 作为示例, 图 1 分别给出了几种情况下  $f(\lambda)$  随  $\lambda$  的变化曲线. 其中图 1(a) 是  $b = 1$ ,  $K = 0$ ,  $M = 0, 1, 2, 3, 4$  的情况; 图 1(b) 是  $b = 5$ ,  $K = 1$ ,  $M = 0, 1, 2, 3, 4$  的情况; 图 1(c) 是  $b = 10$ ,  $K = 2$ ,  $M = 0, -1, -2, -3$  的结果; 图 1(d) 是  $b = 20$ ,  $K = 3$ ,  $M = 0, -1, -2, -3$  的结果. 按惯例, 约定  $J = n + |K + M|/2 + |K - M|/2$ , 则图中每一条曲线和横轴的第 1 个交点对应于  $n = 0$ ,  $J = |K + M|/2 + |K - M|/2$ , 就是相应  $\lambda$  的最小值, 下一个交点  $n = 1$ ,  $J = 1 + |K + M|/2 + |K - M|/2$ , 就是相应的高 1 个本征态的  $\lambda$  值, 依次类推, 这样从图形上就能知道每一个  $\lambda$  值的大小范围, 而  $n$  正是对应本征函数的节点数.

利用 Maple 软件 (版本号: ID1455132) 编写程序计算 (27) 式, 就能在给定精度下算出  $b$  取确定值对应不同的量子数  $(JKM)$  时  $\lambda$  的精确值, 结果如表 1 所列. 把表 1 的  $\lambda$  值代入 (8) 式就可以给出精确的长对称陀螺分子  $a > 1$  或扁对称陀螺分子  $a < 1$  的 Stark 能级. 根据量子数的取值范围以及 (8) 式、(27) 式和表 1 可知, 刚性对称陀螺分子的 Stark 能级具有如下特点: 1) 当  $|K| \geq 1$  时, 无外场时原来简并度为  $2(2J + 1)$  的能级分裂为简并度均为 2 的  $(2J + 1)$  条子能级,  $(K, M)$  和  $(-K, -M)$  能量相同; 2) 当  $K = 0$  时, 无外场时原来简并度为  $(2J + 1)$  的能级分裂为  $(J + 1)$  条子能级,  $\pm M$  的能级是简并的; 3) 由于外电场的影响, 同一  $J$  值的各能级除了  $K = M = 0$  为单一能级外, 其他的都是 2 度简并的, 简并能级的  $\theta$  方向波函数是相同的,

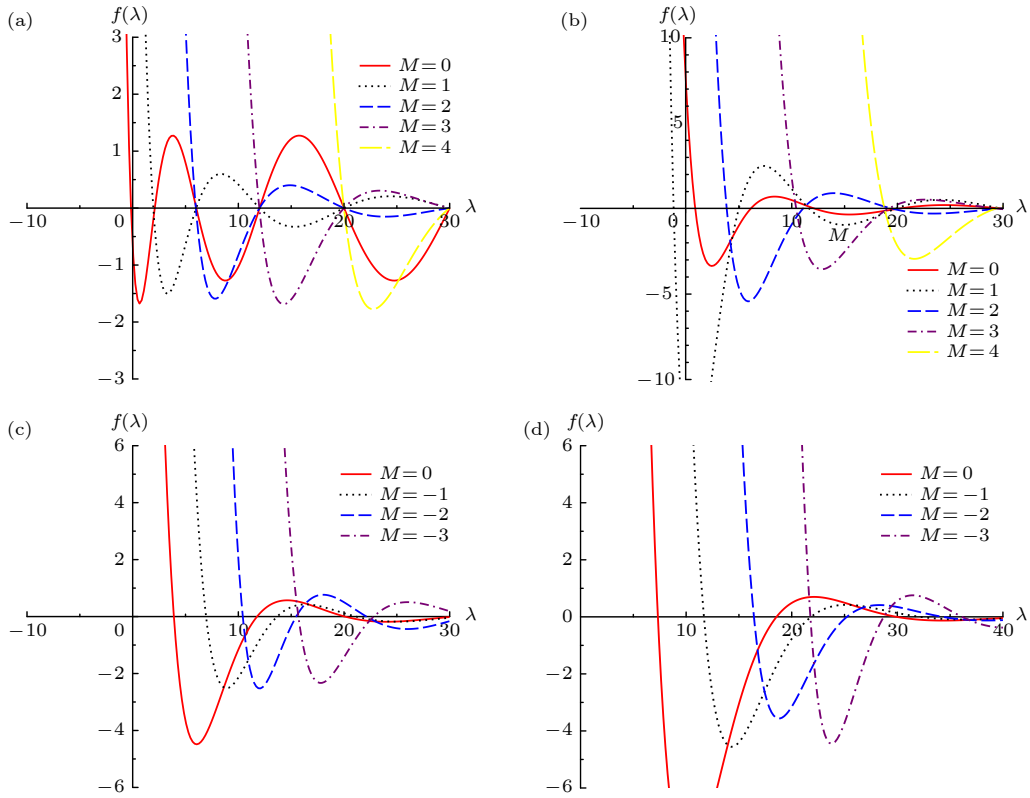


图 1 对称陀螺分子的  $f(\lambda)$  随  $\lambda$  的变化曲线 (a)  $b = 1, K = 0, M = 0, 1, 2, 3, 4$ ; (b)  $b = 5, K = 1, M = 0, 1, 2, 3, 4$ ; (c)  $b = 10, K = 2, M = 0, -1, -2, -3$ ; (d)  $b = 20, K = 3, M = 0, -1, -2, -3$

Fig. 1. Plot of  $f(\lambda)$  as the function of  $\lambda$  for the symmetric-top molecules: (a)  $b = 1, K = 0, M = 0, 1, 2, 3, 4$ ; (b)  $b = 5, K = 1, M = 0, 1, 2, 3, 4$ ; (c)  $b = 10, K = 2, M = 0, -1, -2, -3$ ; (d)  $b = 20, K = 3, M = 0, -1, -2, -3$ .

表 1 对称陀螺分子  $\lambda$  的精确值

Table 1. Precise values of  $\lambda$  for the symmetric-top molecules.

$J$	$K$	$(K, M)$	$n$	$b = 1$	$b = 5$	$b = 10$	$b = 20$
0	0	(0, 0)	0	-0.15766348	-2.36561388	-6.04507511	-14.18676623
		(0, 0)	1	2.09076065	2.63874703	1.72333341	-2.64067155
		(0, 1) (0, -1)	0	1.95033391	0.90475071	-1.52336944	-7.83391897
1	1	(1, 1) (-1, -1)	0	1.46550429	-1.13615048	-4.90088894	-13.09274467
		(1, 0) (-1, 0)	0	1.95033391	0.90475071	-1.52336944	-7.83391897
		(1, -1) (-1, 1)	0	2.45930791	3.25240982	2.28859798	-2.10241580
0	0	(0, 0)	2	6.02403166	6.64546248	7.87932729	7.59702750
		(0, 1) (0, -1)	1	6.01157793	6.14932334	5.86920589	3.21233397
		(0, 2) (0, -2)	0	5.97623080	5.42770799	3.91145991	-0.75028417
		(1, 2) (-1, -2)	0	5.64610143	3.87965848	1.11394605	-5.42557601
		(1, 1) (-1, -1)	1	5.83444799	5.02308599	3.42628660	-1.26151418
		(1, 0) (-1, 0)	1	6.01157793	6.14932334	5.86920589	3.21233397
1	1	(1, -1) (-1, 1)	1	6.17303459	7.17694539	8.52241501	8.17688040
		(1, -2) (-1, 2)	0	6.31159733	7.08037678	6.95972394	4.30076661
		(2, 2) (-2, -2)	0	5.32080726	2.40921111	-1.50915355	-9.82205218
2	2	(2, 1) (-2, -1)	0	5.64610143	3.87965848	1.11394605	-5.42557601
		(2, 0) (-2, 0)	0	5.97623080	5.42770799	3.91145991	-0.75028417
		(2, -1) (-2, 1)	0	6.31159733	7.08037678	6.95972394	4.30076661
		(2, -2) (-2, 2)	0	6.65266958	8.89010555	10.43690550	9.90220896

表 1 (续) 对称陀螺分子  $\lambda$  的精确值  
Table 1 (continued). Precise values of  $\lambda$  for the symmetric-top molecules.

$J$	$K$	$(K, M)$	$n$	$b = 1$	$b = 5$	$b = 10$	$b = 20$
3	0	(0, 0)	3	12.01112256	12.28609326	13.23851702	16.01072933
		(0, 1) (0, -1)	2	12.00832614	12.20185604	12.68109763	13.00122422
		(0, 2) (0, -2)	1	11.99996510	11.98051777	11.76516026	10.12548434
		(0, 3) (0, -3)	0	11.98611962	11.65790586	10.68518379	7.32389600
	1	(1, 3) (-1, -3)	0	11.73714675	10.44710964	8.38487920	3.22650134
		(1, 2) (-1, -2)	1	11.83176701	11.08791249	9.87421333	6.36151132
		(1, 1) (-1, -1)	2	11.92226344	11.68117484	11.32510413	9.60625434
		(1, 0) (-1, 0)	2	12.00832614	12.20185604	12.68109763	13.00122422
		(1, -1) (-1, 1)	2	12.08964046	12.60886369	13.77998811	16.66271656
		(1, -2) (-1, 2)	1	12.16589908	12.84075061	13.66336275	14.14238561
		(1, -3) (-1, 3)	0	12.23682184	12.90821524	13.10954794	11.68530530
		2	(2, 3) (-2, -3)	0	11.48984080	9.26997167	6.18154889
	(2, 2) (-2, -2)		1	11.66163328	10.18131826	8.01132314	2.77663392
	(2, 1) (-2, -1)		1	11.83176701	11.08791249	9.87421333	6.36151132
	(2, 0) (-2, 0)		1	11.99996510	11.98051777	11.76516026	10.12548434
	(2, -1) (-2, 1)		1	12.16589908	12.84075061	13.66336275	14.14238561
	(2, -2) (-2, 2)		1	12.32917589	13.62647723	15.47989534	18.60143861
	(2, -3) (-2, 3)		0	12.48932036	14.20615704	15.70403035	16.41950037
3	(3, 3) (-3, -3)		0	11.24414341	8.12208069	4.05742691	-4.40185593
	(3, 2) (-3, -2)	0	11.48984080	9.26997167	6.18154889	-0.66884422	
	(3, 1) (-3, -1)	0	11.73714675	10.44710964	8.38487920	3.22650134	
	(3, 0) (-3, 0)	0	11.98611962	11.65790586	10.68518379	7.32389600	
	(3, -1) (-3, 1)	0	12.23682184	12.90821524	13.10954794	11.68530530	
	(3, -2) (-3, 2)	0	12.48932036	14.20615704	15.70403035	16.41950037	
		(3, -3) (-3, 3)	0	12.74368721	15.56368561	18.56353300	21.76261674

表 2 对称陀螺分子  $(4, 0, 0)$  态的  $\lambda$  值  
Table 2. Values of  $\lambda$  of the state  $(4, 0, 0)$  for the symmetric-top molecules.

$b$	Perturbation	Maergoiz <sup>[7]</sup>	This work	$b$	Maergoiz <sup>[7]</sup>	This work
0.1	20.00006494		20.00006494	100	15.696	15.69559837
1	20.00649351		20.00649533	200	-31.200	-31.20010397
5	20.16233766	20.164	20.16352072	300	-90.598	-90.59767902
10	20.64935065	20.671	20.67080282	400	-156.41	-156.40991571
20	22.59740260	22.975	22.97522235	500	-226.31	-226.30840320
50	36.23376623	27.681	27.68132358	750	-412.26	-412.26234718

差别在于  $\phi$  和  $\chi$  方向的波函数是不一样的; 4) 当  $K = 0$  时, 长对称陀螺分子和扁对称陀螺分子不仅零级近似能量是相同的, 而且 Stark 能级分裂也是相同的, 它们均退化为刚性转子的 Stark 能级<sup>[12]</sup>. 需要指出的是, 如果将本文得到的  $\lambda$  值的小数点后面的位数保留到与文献<sup>[3]</sup> 相同的话, 结果与用  $100 \times 100$  矩阵对角化方法得到的结果是一致的.

为了比较本文的计算结果与微扰理论以及  $200 \times 200$  矩阵对角化方法的差别, 以态  $(J, K, M) = (4, 0, 0)$  为例在表 2 列出相应的结果. 根据文献<sup>[1, 2]</sup>, 准确到 2 级近似,  $(4, 0, 0)$  态的近似结果为  $\lambda \approx (20+b^2/154)$ . 由表 2 可以看出, 当表示外场强度参数  $b$  较小时 (例如小于 20), 三者的计算结果基本上是相同的, 但是随着参数  $b$  的增大, 微扰理论显

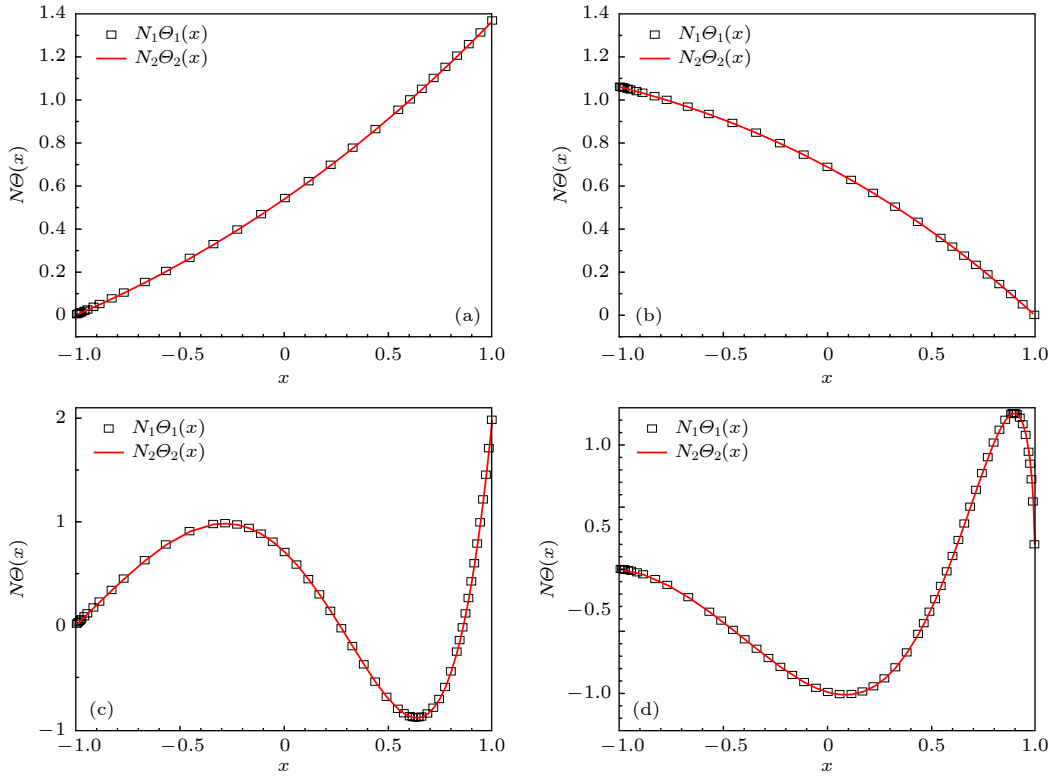


图2  $N_1\Theta_1(x)$ 和 $(-1)^n N_2\Theta_2(x)$ 是线性相关的 (a)  $b = 1, J = 1, K = 1, M = 1, n = 0$ ; (b)  $b = 1, J = 1, K = 1, M = -1, n = 0$ ; (c)  $b = 10, J = 3, K = 1, M = 1, n = 2$ ; (d)  $b = 10, J = 3, K = 1, M = 2, n = 1$

Fig. 2. Linear dependence relation between  $N_1\Theta_1(x)$  and  $(-1)^n N_2\Theta_2(x)$ : (a)  $b = 1, J = 1, K = 1, M = 1, n = 0$ ; (b)  $b = 1, J = 1, K = 1, M = -1, n = 0$ ; (c)  $b = 10, J = 3, K = 1, M = 1, n = 2$ ; (d)  $b = 10, J = 3, K = 1, M = 2, n = 1$ .

然就不适用了. 不过本文的计算结果仍然与  $200 \times 200$  矩阵方法得到的精确结果相同 (保留相同的有效位数), 这解释了在文献中人们把用矩阵对角化方法得到的结果称之为精确值的原因. 但本文提出的方法还能同时给出解析的归一化本征函数, 所以本文的结果是令人满意的. 不过需要说明的是, Maple 中有关函数的计算对某些特殊值特别是大参数时可能存在不足. 期望随着 Maple 版本的提高, 这一现象会有所改善.

下面讨论如何得到解析的归一化本征函数. 为此将计算出的本征值代入 (18) 式和 (24) 式, 得到的是未归一化的解析本征函数, 经归一化运算后发现, 这两个本征函数满足如下等式:

$$N_1\Theta_1(x) = (-1)^n N_2\Theta_2(x). \quad (30)$$

显然它们是线性相关的, 如果用图形表示它们是完全重合的, (30) 式中  $n = J - |K+M|/2 - |K-M|/2 = 0, 1, 2, \dots$  是本征函数的节点数目. 作为示例, 图 2 分别给出了当  $b = 1, J = 1, K = 1, M = 1, n = 0$ ;  $b = 1, J = 1, K = 1, M = -1, n = 0$ ;  $b = 10, J = 3, K = 1, M = 1, n = 2$  和  $b = 10, J = 3, K = 1, M = 2, n = 1$  时  $N_1\Theta_1(x)$ 和 $(-1)^n N_2\Theta_2(x)$ 的函数图形. 由图 2 可见 (30) 式是正确的.

最后根据 (9) 式和 (30) 式以及文献 [1, 2], 给出位于外电场中的刚性对称陀螺分子完整的用合流 Heun 函数表示的归一化的解析本征函数为

$$\begin{aligned} \psi_{JMK}(\theta, \phi, \chi) = & \frac{N_1}{2\pi} e^{iM\phi} e^{iK\chi} \left(\frac{1-x}{2}\right)^{\frac{|K-M|}{2}} \left(\frac{1+x}{2}\right)^{\frac{|K+M|}{2}} \\ & \times \text{HeunC}\left(0, \frac{|K-M|}{2}, \frac{|K+M|}{2}, 2b, -\lambda - b + \frac{M^2 + K^2}{2}, \frac{1-x}{2}\right), \end{aligned} \quad (31)$$

或者表示为

$$\psi_{JM_K}(\theta, \phi, \chi) = (-1)^n \frac{N_2}{2\pi} e^{iM\phi} e^{iK\chi} \left(\frac{1-x}{2}\right)^{\frac{|K-M|}{2}} \left(\frac{1+x}{2}\right)^{\frac{|K+M|}{2}} \times \text{HeunC}\left(0, \frac{|K+M|}{2}, \frac{|K-M|}{2}, -2b, -\lambda + b + \frac{M^2 + K^2}{2}, \frac{1+x}{2}\right), \quad (32)$$

式中  $x = \cos \theta$ ,  $J = n + |K + M| / 2 + |K - M| / 2$  是角量子数,  $M$  是角动量在空间固定坐标系  $z$  方向的投影量子数,  $K$  是角动量在空间运动坐标系  $z'$  方向的投影量子数,  $n$  是极角  $\theta$  方向波函数的节点数,  $N_1$  和  $N_2$  是极角  $\theta$  方向波函数的归一化常数, 精确的  $\lambda$  值由数值计算 (27) 式给出.

## 4 结 论

综上所述, 本文提出了一种能精确求解位于外电场中刚性对称陀螺分子定态 Schrödinger 方程的新方案. 首先利用不同形式的函数变换和变量代换方法把变量分离后得到的极角  $\theta$  方向的微分方程转化为合流 Heun 微分方程, 然后根据该方程及其解析解合流 Heun 函数的特性, 给出对应于同一本征态线性相关的两个解析解, 构造朗斯基行列式而得到能级所满足的方程. 再利用 Maple 软件编程计算就可以得到精确的能量本征值, 结果与其他文献用  $100 \times 100$  或  $200 \times 200$  矩阵对角化方法得到的精确值在保留到小数后面相同位数情况下是完全相同的. 最后进行归一化运算就给出了用合流 Heun 函数表示的归一化本征函数. 由此可见, 本文提出的研究方法不仅能得到精确的本征值, 而且还能获得归一化的解析波函数. 显然, 这一方法具有很强的实用性, 其结果将对研究刚性对称陀螺分子 Stark 效应的能级分裂和振子强度等一系列实际问题带来很大的方便.

## 参考文献

- [1] Townes C H, Schawlow A L 1975 *Microwave Spectroscopy* (New York: Dover Publications, Inc.) pp60–62, 248–251
- [2] Wollrab J E 1967 *Rotational Spectra and Molecular Structure* (New York: Academic Press) pp15–18, 247–250
- [3] Shirley J H 1963 *J. Chem. Phys.* **38** 2896
- [4] Tomutza L, Mizushima M 1972 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **12** 925
- [5] Roeggen I 1972 *Atomic Data* **4** 289
- [6] Maergoiz A I, Troe J 1993 *J. Chem. Phys.* **99** 3218
- [7] Maergoiz A I, Troe J, Weiss Ch 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 1885
- [8] Fernández F M 1995 *J. Math. Chem.* **18** 197
- [9] Burrowst B L, Cohen M, Feldmann T 1995 *J. Phys. B* **28** 4249
- [10] Andreev S N, Makarov V P 2008 *Radiophys. Quantum Electron.* **51** 718
- [11] Sun G H, Chen C Y, Taud H, Yáñez-Márquez C, Dong S H 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126480
- [12] Chen C Y, Wang X H, You Y, Sun G H, Dong S H 2020 *Int. J. Quantum Chem.* **120** e26336
- [13] Chen C Y, You Y, Wang X H, Lu F L, Sun D S, Dong S H 2021 *Results Phys.* **24** 104115
- [14] Chen C Y, Sun D S, Sun G H, Wang X H, You Y, Dong S H 2021 *Int. J. Quantum Chem.* **121** e26546
- [15] Fiziev P P 2010 *J. Phys. A* **43** 035203
- [16] Downing C A 2013 *J. Math. Phys.* **54** 072101
- [17] Al-Gwaiz M A 2008 *Sturm-Liouville Theory and its Applications* (London: Springer-Verlag London Limited) pp45–46, 55–59
- [18] Cheng J C 2016 *The Equations for Mathematical Physics and Their Approximate Methods* (2nd Ed.) (Beijing: Science Press) pp109–111, 133–135 (in Chinese) [程建春 2016 数学物理方程及其近似方法(第2版) (北京: 科学出版社) 第109—111, 133—135页]
- [19] Wang H Y 2017 *Mathematics for Physicists* (Beijing: Science Press) pp130–146

# Exact solutions to Stark effect of rigid symmetric-top molecules<sup>\*</sup>

Chen Chang-Yuan<sup>1)†</sup> Sun Guo-Hua<sup>2)</sup> Wang Xiao-Hua<sup>1)</sup> Sun Dong-Sheng<sup>1)</sup>  
You Yuan<sup>1)</sup> Lu Fa-Lin<sup>1)</sup> Dong Shi-Hai<sup>3)4)‡</sup>

1) (*School of Physics and Electronic Engineering, Yancheng Teachers University, Yancheng 224007, China*)

2) (*Catedrática CONACYT, CIC, Instituto Politécnico Nacional, CDMX 07700, Mexico*)

3) (*Research Center for Quantum Physics, Huzhou University, Huzhou 313000, China*)

4) (*Laboratorio de Información Cuántica, CIDETEC, Instituto Politécnico Nacional, UPALM, CDMX 07700, Mexico*)

( Received 28 January 2021; revised manuscript received 5 May 2021 )

## Abstract

In this work a new scheme is proposed to accurately calculate the rotational energy level of the rigid symmetric-top molecule subjected to the external electric field, and also to obtain the corresponding analytical wave functions. For this purpose, first we use the different forms of function transformation and variable substitution to transform the differential equation of the polar angle  $\theta$  into a confluent Heun differential equation, and then we use the characteristics of the confluent Heun differential equation and the confluent Heun function to find two linearly dependent solutions of the same eigenstates, which are used to construct the Wronskian determinant to obtain the exact energy spectrum equation. Finally, with the aid of the Maple software, we calculate the eigenvalues for different quantum states, and then substitute the obtained eigenvalues into the unnormalized eigenfunction to obtain the analytical normalized eigenfunction expressed by the confluent Heun function. These results are conducive to the in-depth study of the Stark effect of symmetric-top molecules.

**Keywords:** exactly analytic solutions, Stark effect, rigid symmetric-top molecules, confluent Heun function

**PACS:** 03.65.Ge, 03.65.Db, 02.30.-f, 02.30.Gp

**DOI:** [10.7498/aps.70.20210214](https://doi.org/10.7498/aps.70.20210214)

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11975196) and the SIP, Instituto Politécnico Nacional (IPN), Mexico (Grant No. 20210414).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [chency@yctu.edu.cn](mailto:chency@yctu.edu.cn)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [dongsh2@yahoo.com](mailto:dongsh2@yahoo.com)