Cours 3

De l'interaction de contact aux forces à longue portée

Chaire *Atomes et rayonnement*
Cours 2022-23
Jean Dalibard

http://pro.college-de-france.fr/jean.dalibard/index.html

courrier à : listes-diffusion.cdf@college-de-france.fr
avec pour sujet : subscribe chaire-ar.ipcdf

COLLÈGE DE FRANCE
1530

Prochains séminaires

Vendredi 24 mars : *Émulation du modèle de Hubbard étendu aux interactions à longue portée*

François DUBIN, Centre de Recherche sur l'Hétéro-Epitaxie et ses Applications, CNRS, Sophia-Antipolis

Vendredi 31 mars : *To thermalize or not? Slow particle diffusion in Many-Body Localization*

Michael FLEISCHHAUER, University of Kaiserslautern-Landau, Allemagne

Vendredi 7 avril :
Des doutes d'Einstein aux inégalités de Bell et aux technologies quantiques : la deuxième révolution quantique

Alain ASPECT, Institut d'Optique-Université Paris-Saclay

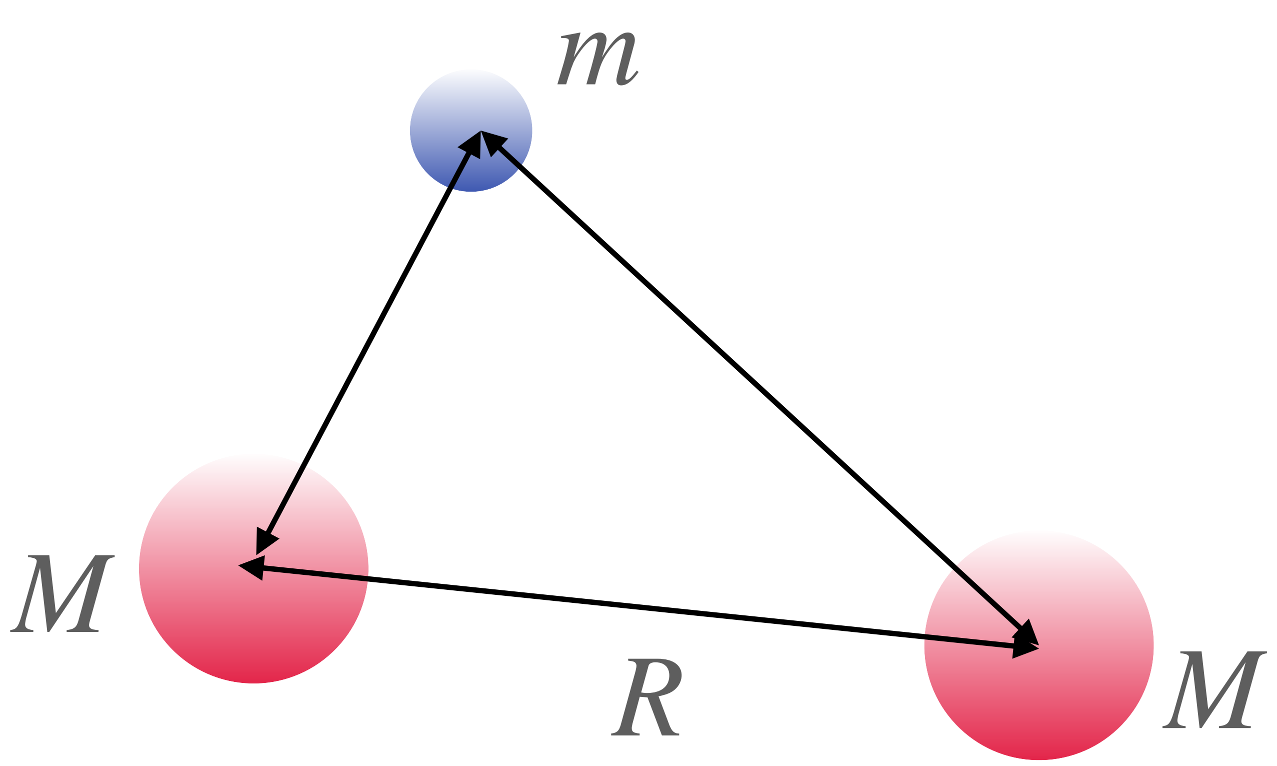
Atelier "*Open systems in Quantum Many-Body Physics*", vendredi 14 avril, 14h00-18h00

I. Bouchoule (Palaiseau), T. Esslinger (Zurich), N. Goldman (Bruxelles), B. Huard (Lyon), L. Mazza (Orsay), A. Nahum (Paris)

Le problème mMM

Efimov 1973
Fonseca et al 1979

Une particule légère m (par exemple ^{6}Li ou ^{7}Li) interagit avec deux particules lourdes M (^{133}Cs)



On néglige l'interaction MM (sauf un éventuel cœur dur)

Peut-on former un édifice lié à trois corps ?

Interaction mM
à courte portée,
mais résonante

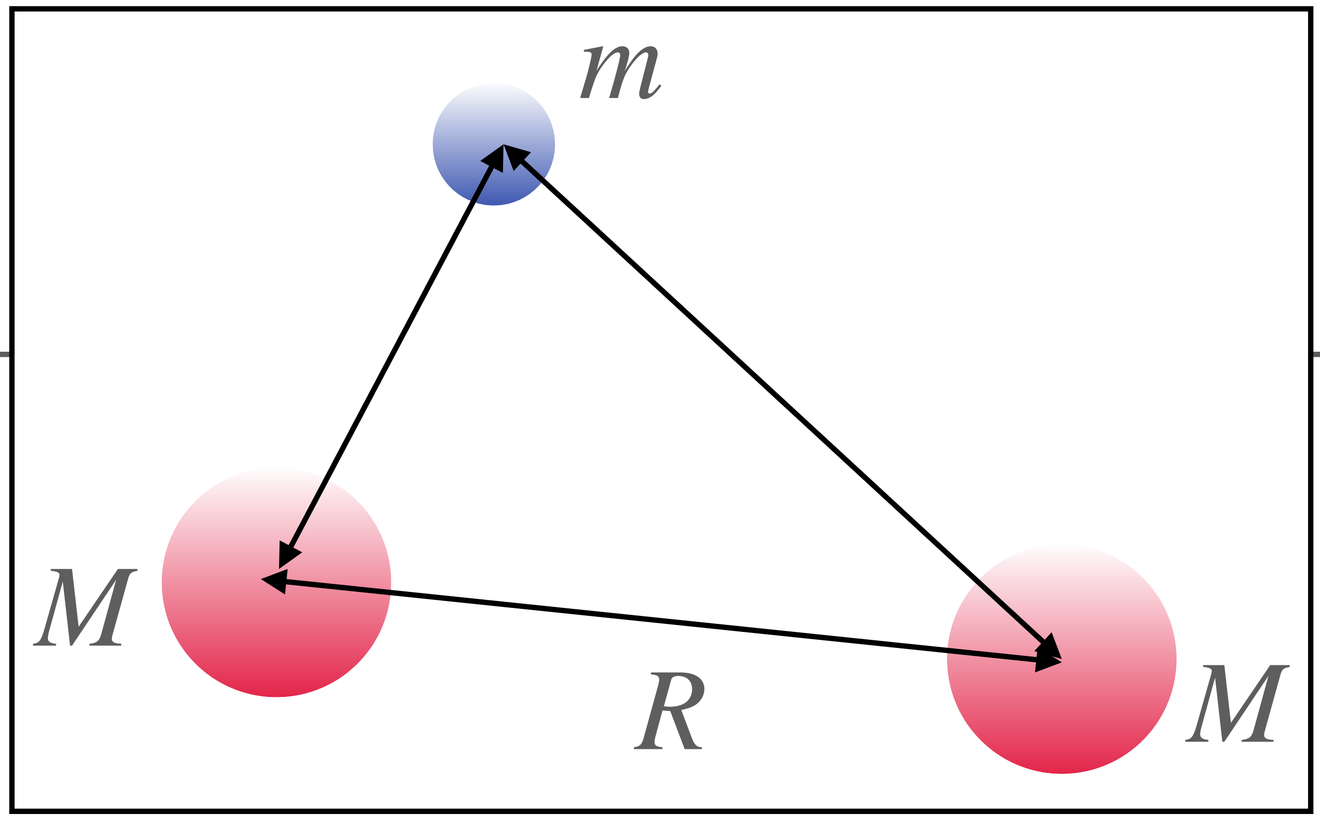
→

Interaction effective
MM à longue portée :

$$V(R) \propto \frac{1}{R^2}$$

Variante plus simple du schéma initial d'Efimov qui considérait trois corps identiques

Traitement à la “Born-Oppenheimer”



Approche fondée sur la hiérarchie des masses $m \ll M$

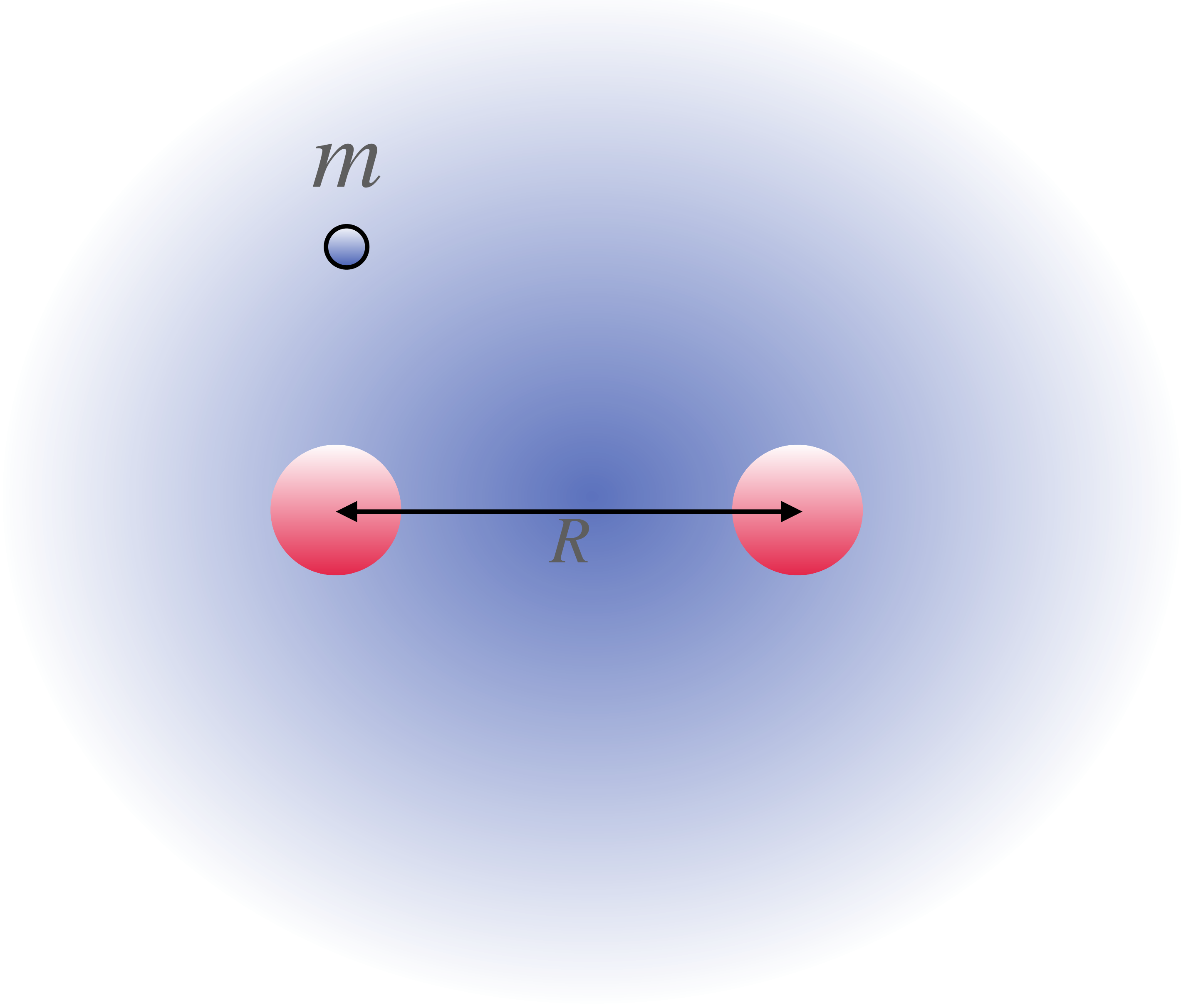
- Les particules lourdes M ont un mouvement lent, correspondant à la dynamique associée à $\boldsymbol{R}$
- La particule légère m a un mouvement rapide, qui lui permet d’ajuster son état quasiment instantanément aux variations de $\boldsymbol{R}$

Approximation “adiabatique” :

L’état de la particule légère suit adiabatiquement la dynamique des particules lourdes

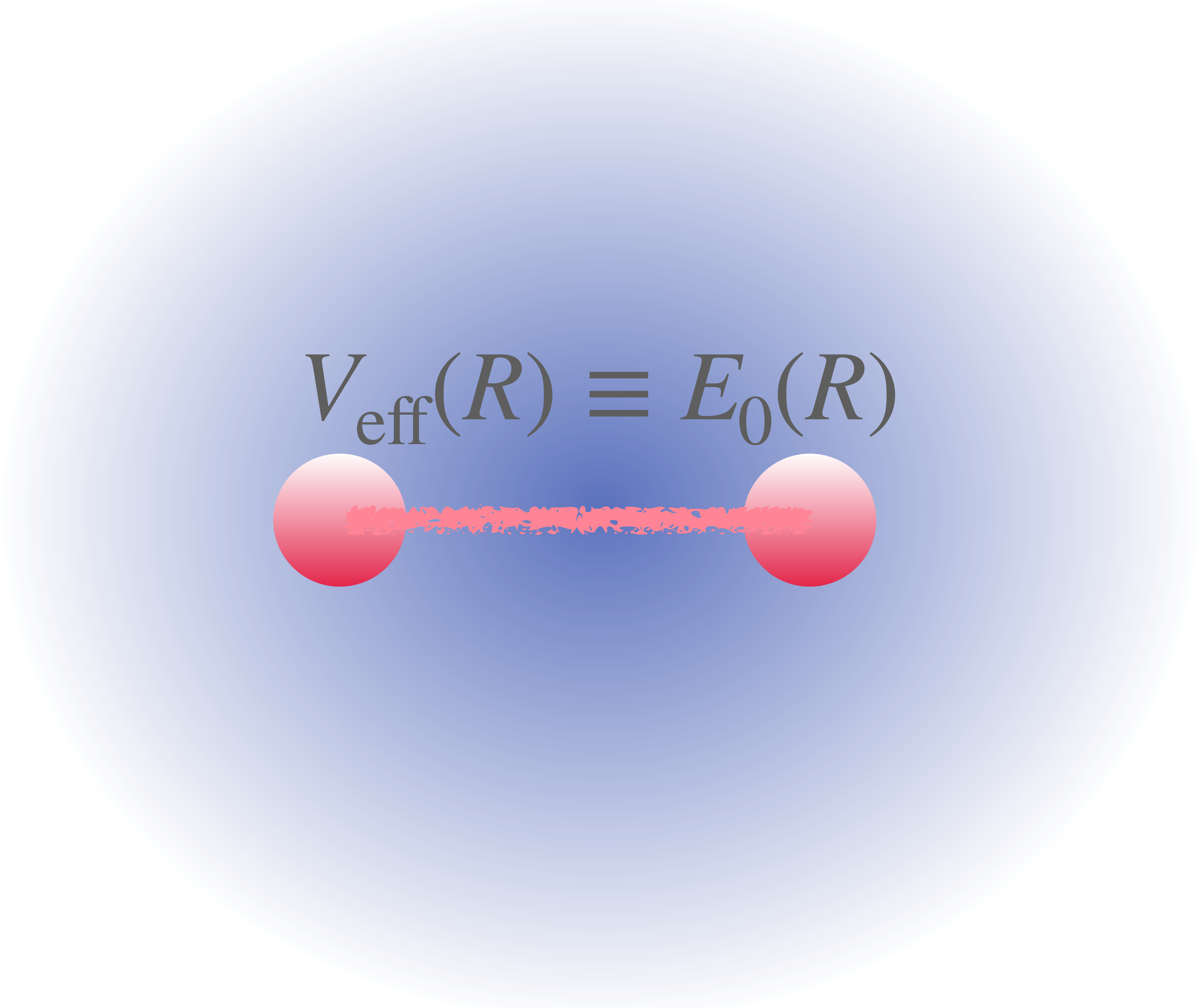
Le déroulement de l'approche adiabatique

Première étape : on fixe la position des particules lourdes en $\pm \boldsymbol{R}/2$



Quels sont les états propres et les énergies associées pour le mouvement de m dans cette configuration ?

Etat fondamental $E_0(R)$

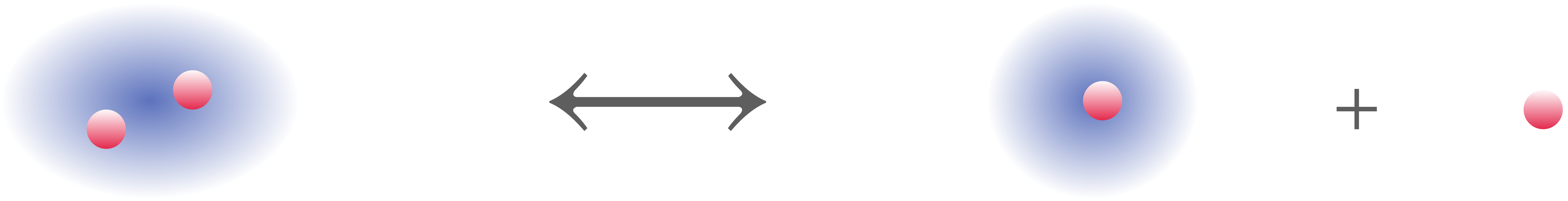


Deuxième étape : on étudie le mouvement des particules lourdes en traitant $E_0(R)$ comme un potentiel effectif d'interaction

Deux questions importantes

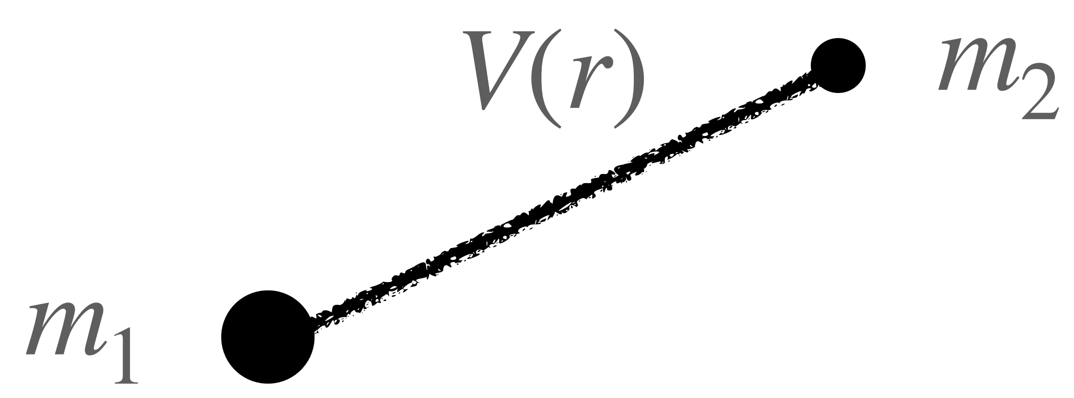
Peut-il y avoir un état lié à trois corps mMM même s'il n'y a pas d'état lié à deux corps mM ?

Si les deux types d'états liés mM et mMM existent, quelle est la configuration de plus basse énergie ?



1.

Interaction à deux corps à basse énergie



Mouvement relatif pour une particule de masse

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Basse énergie : on s'intéresse aux états de moment cinétique nul $\ell = 0$ (onde s)

Collision en onde s

Mouvement relatif d'énergie positive $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{r}}$

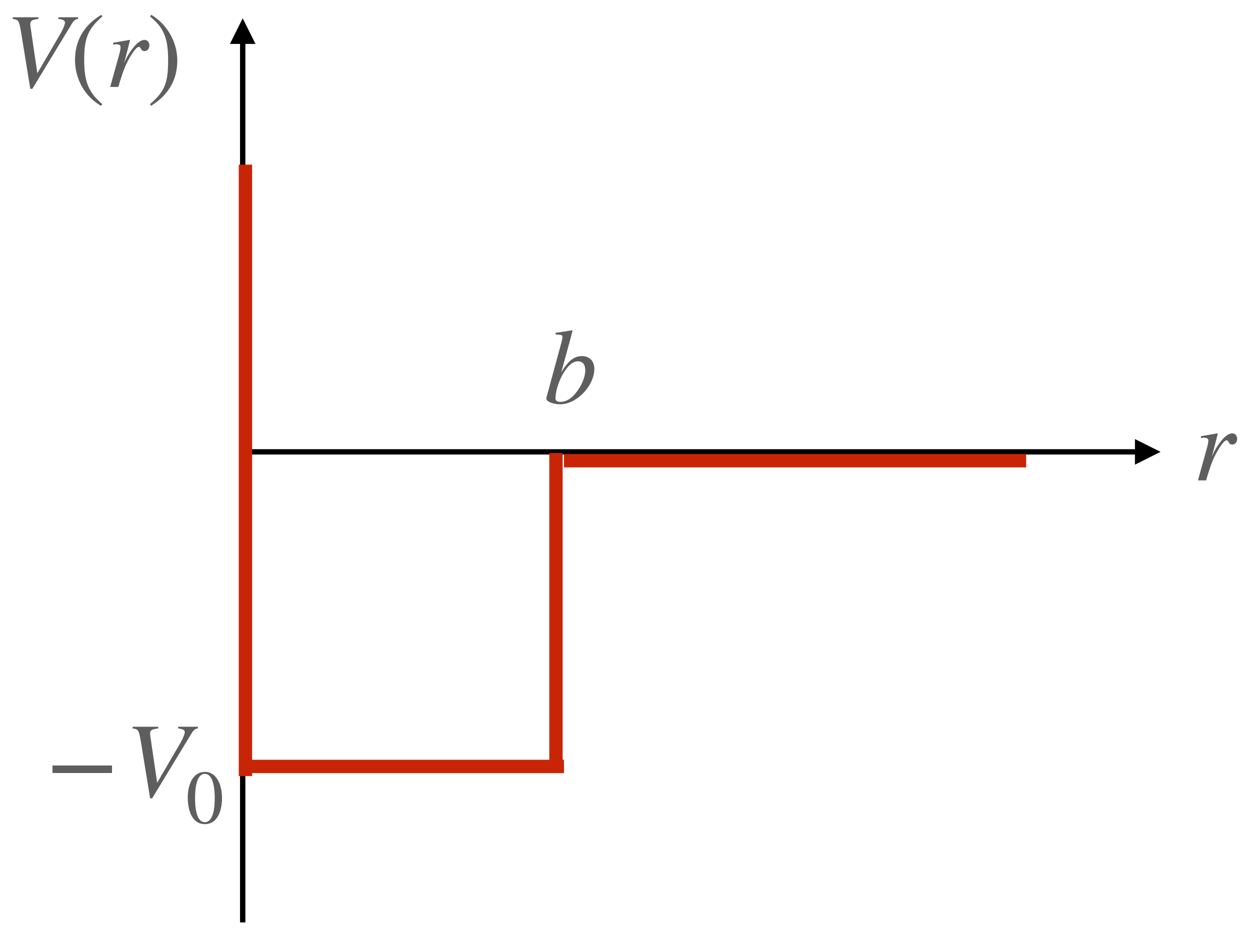
⟶ Etats stationnaires de diffusion $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$

⟶ L'amplitude de diffusion $f(k)$

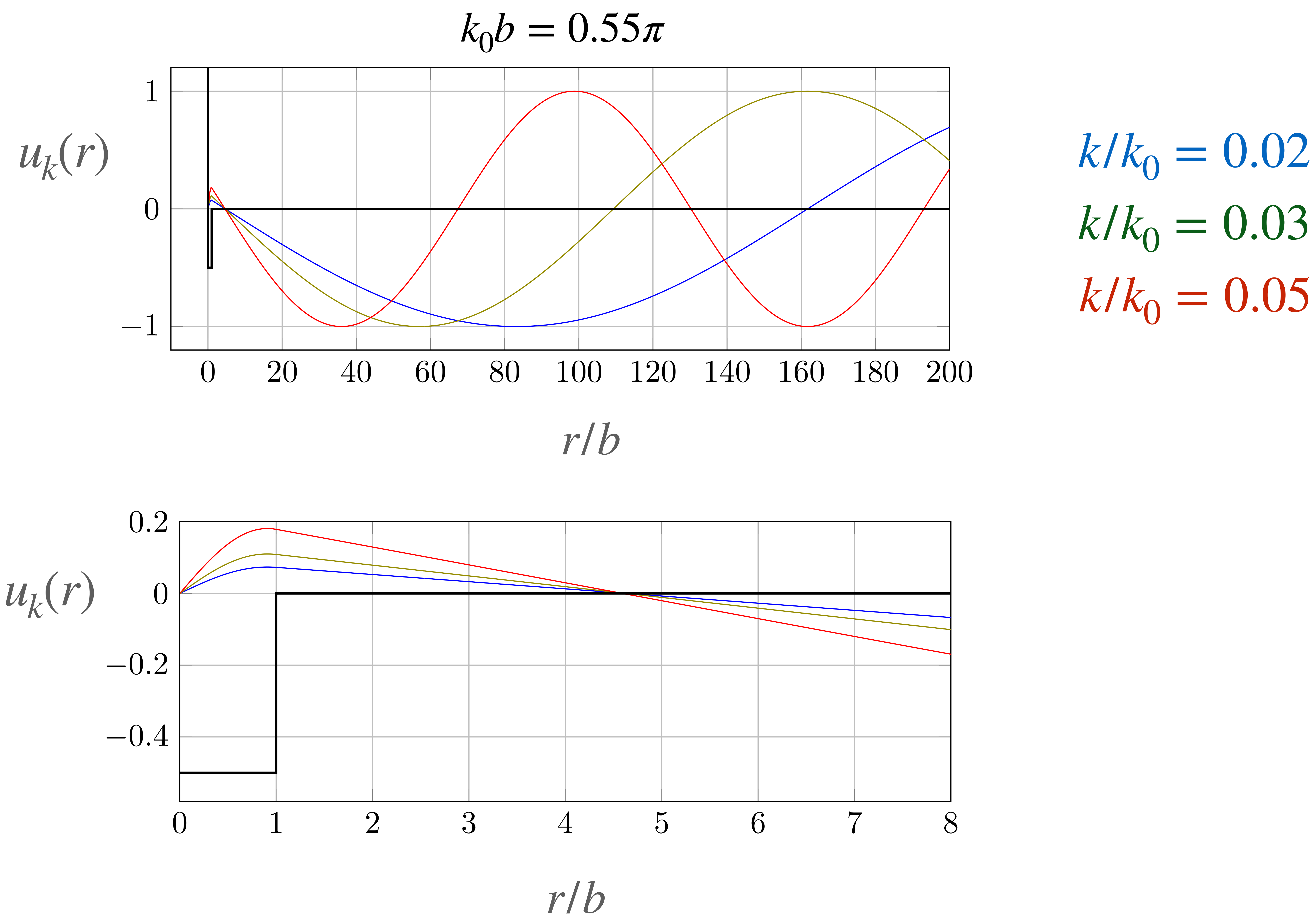
⟶ La longueur de diffusion a

⟶ Forme des fonctions d'onde pour $b \ll r \ll 1/k$: $u_{\boldsymbol{k}}(r) \propto r - a$

Exemple d'états de diffusion pour un puits carré



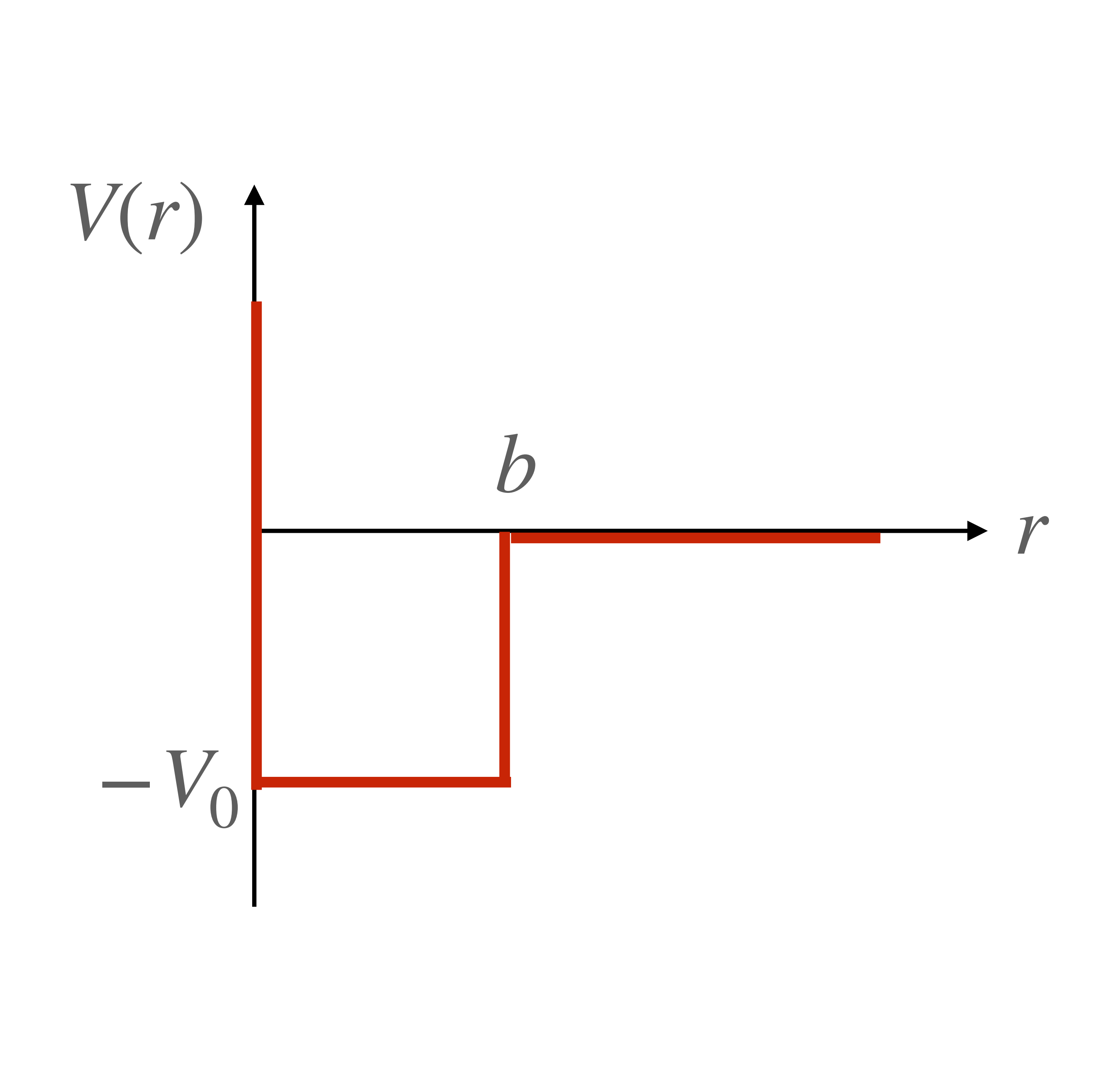
$$V_0 \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_\mathrm{r}}$$



Pour cette valeur de k_0, on trouve $a \approx 4.7\, b$

Comment calculer une longueur de diffusion ?

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger pour un état d'énergie E positive et petite



Equation de Schrödinger à l'intérieur du puits

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} - V_0\, u(r) = E\, u(r) \qquad V_0 \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_\mathrm{r}}$$

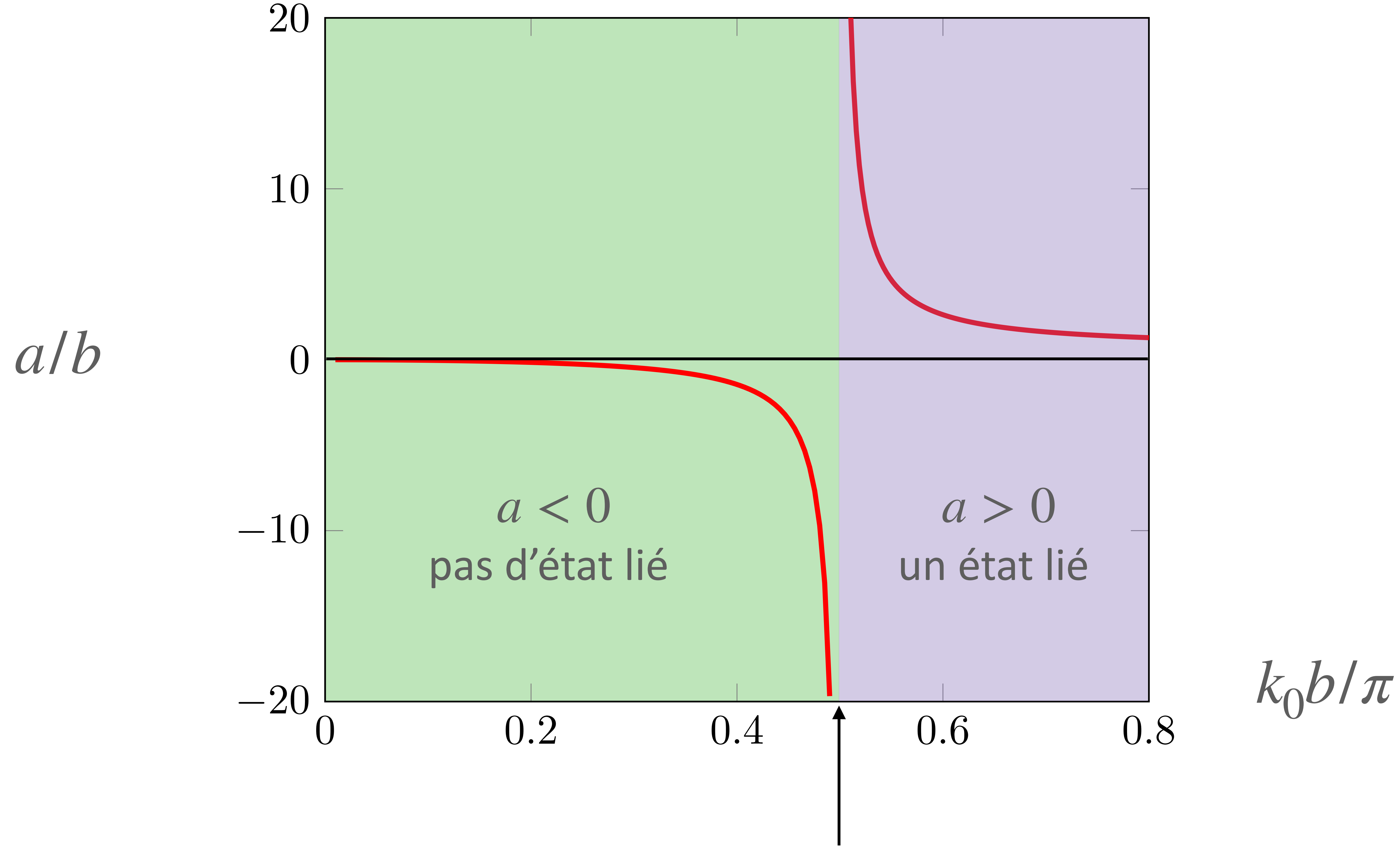
$$\longrightarrow \qquad u''(r) + k_0^2 u(r) = -\frac{2m_\mathrm{r}E}{\hbar^2}u(r)$$

Equation de Schrödinger à l'extérieur du puits $\quad u''(r) = -\frac{2m_\mathrm{r}E}{\hbar^2}u(r)$

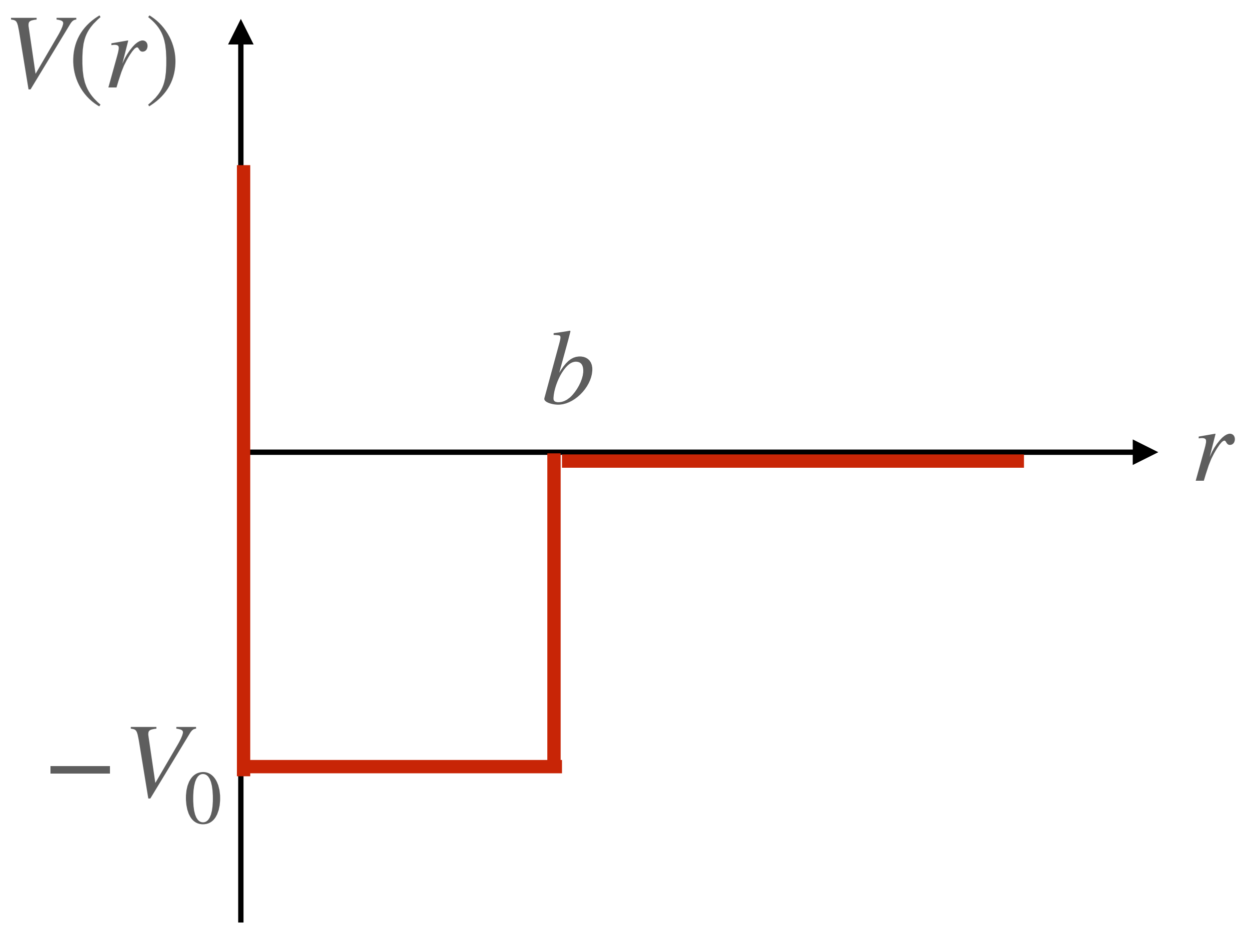
On regarde la solution d'énergie nulle…

La longueur de diffusion du puits carré

$$a = b - \frac{\tan(k_0 b)}{k_0}$$



$k_0 b = \dfrac{\pi}{2}$: seuil d'apparition du premier état lié, $|a| = +\infty$



$$V_0 \equiv \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_\mathrm{r}}$$

On ne s'intéresse pas (pour l'instant) au rôle d'éventuels états plus fortement liés

Le pseudo-potentiel

Comment prendre la limite d'un potentiel de portée nulle : $b \to 0$

Le pseudo-potentiel

Deux points de vue équivalents

→ Potentiel de portée $b \to 0$ sous forme d'une distribution de Dirac

$$\hat{V}_{\rm pp}\,\psi(\boldsymbol{r}) = g\delta(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial r}\left[r\psi(\boldsymbol{r})\right]$$

avec (comme toujours) des états propres solutions de $\left(\frac{\hat{p}^2}{2m_{\rm r}} + \hat{V}_{\rm pp}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\,\psi(\boldsymbol{r})$

→ Modification des conditions aux limites en $\boldsymbol{r} = 0$

Ce sera le point de vue adopté dans ce cours

Le point de vue "distribution de Dirac"

$$g = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m_\mathrm{r}}$$

Quels sont les états propres de $\quad \frac{\hat{p}^2}{2m_\mathrm{r}}\psi(\boldsymbol{r}) \ + \ g\delta(\boldsymbol{r})\frac{\partial}{\partial r}\left[r\psi(\boldsymbol{r})\right] \ = \ E\,\psi(\boldsymbol{r})$?

a peut être positif, nul, négatif, infini

⟶ Famille d'états d'énergie positive, repérés par un vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{a}{1+\mathrm{i}ka}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \qquad\qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{r}}$$

expression exacte

⟶ Un unique état lié (énergie négative), qui n'existe que si $a > 0$:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r} \qquad\qquad E = -\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}a^2}$$

expression exacte

Tous ces états ont en commun le même comportement quand $r \to 0$:

$$r \ll k^{-1}, a : \qquad \psi(\boldsymbol{r}) \sim \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r)$$

Le point de vue “Conditions aux limites”

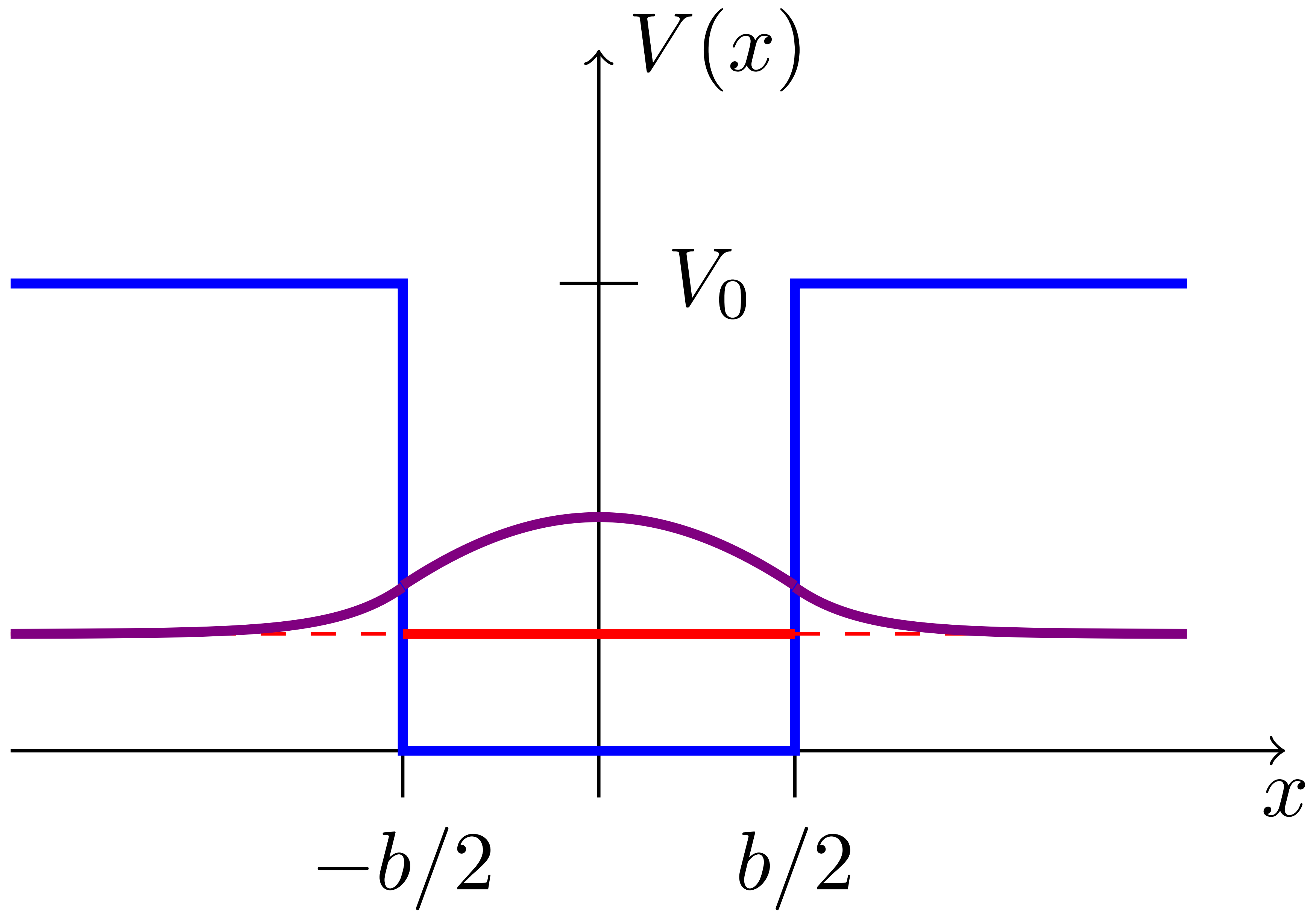
On impose d’emblée à tous les états $\psi(\boldsymbol{r})$ physiquement acceptables le comportement

$$\psi(\boldsymbol{r}) \sim \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r) \qquad \text{quand} \quad r \to 0$$

L’hamiltonien est alors purement cinétique : $\hat{H} = \dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_\mathrm{r}}$

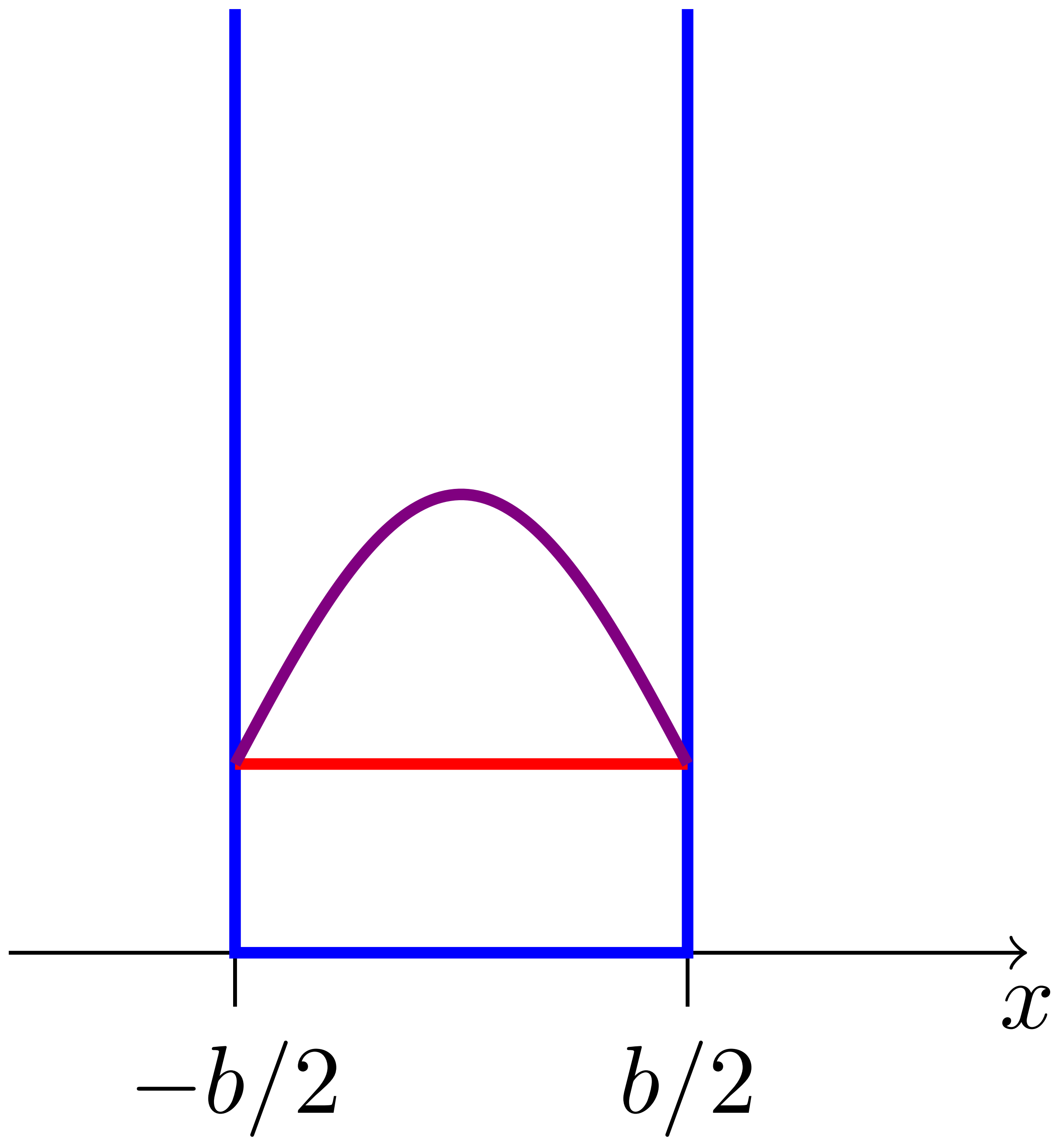
Conditions aux limites de Bethe-Peierls

Lien avec un problème plus simple : le puits carré fini ou infini



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

Résolution de l'équation de Schrödinger dans les régions "permises" et "interdites" + raccordement

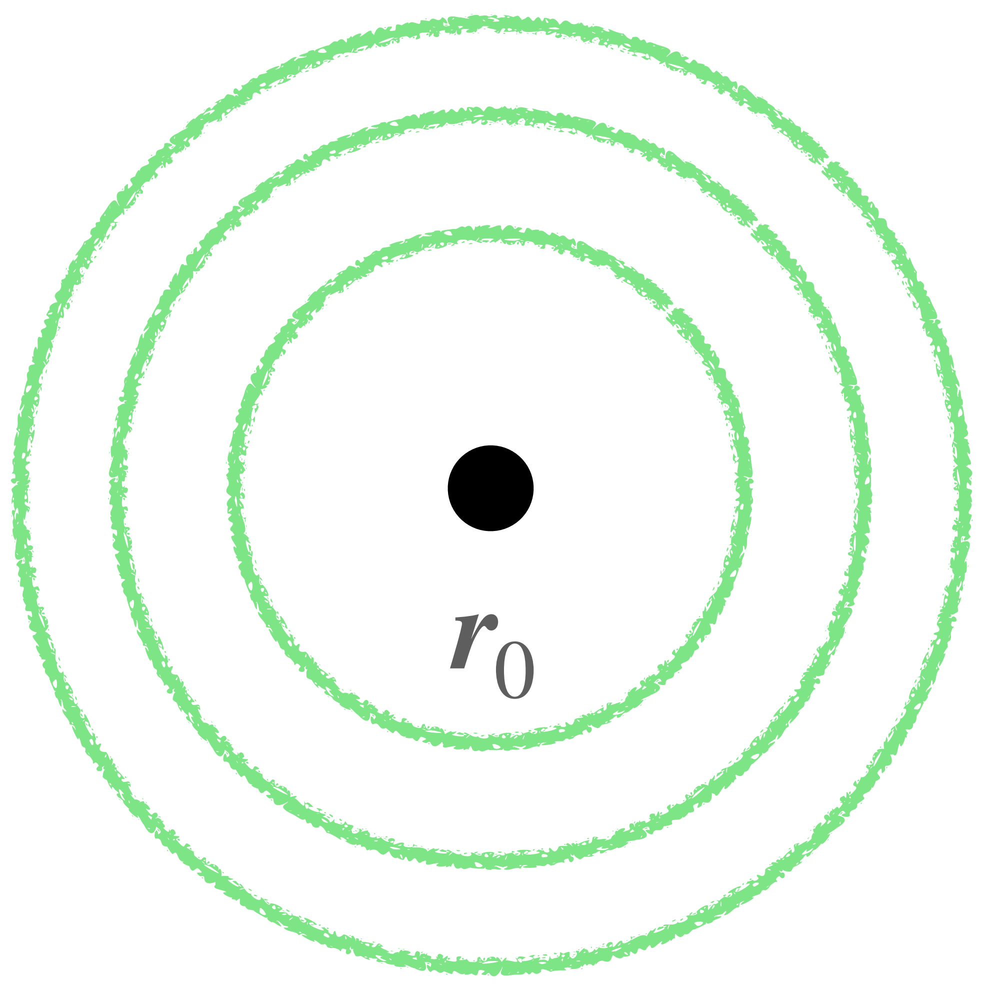


$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Présence du potentiel prise en compte en imposant $\psi(\pm b/2) = 0$

Comment implémenter cette condition aux limites en pratique ?

Pseudo potentiel d'intensité $g = \dfrac{2\pi\hbar^2 a}{m_\mathrm{r}}$ placé en $\boldsymbol{r}_0$



Les états d'énergie E devront

- se comporter au voisinage de $\boldsymbol{r}_0$ comme

$$\psi(\boldsymbol{r}) \sim \frac{\mathscr{A}_{-1}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|} + \mathscr{A}_0 + \mathcal{O}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|) \qquad \text{avec} \quad \mathscr{A}_0 = -\frac{1}{a}\mathscr{A}_{-1}$$

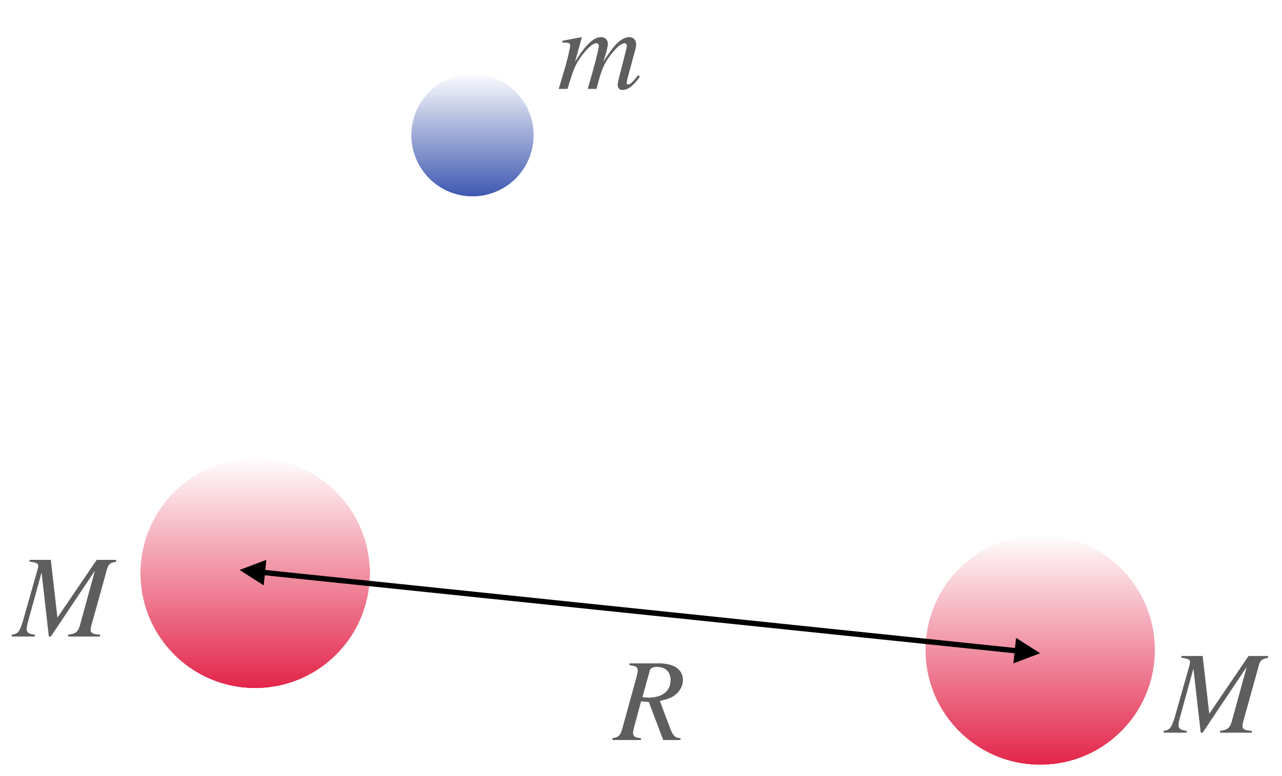
- être solutions de $$-\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{r}}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) = E\,\psi(\boldsymbol{r})$$

$E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_\mathrm{r}} > 0$: $\quad \dfrac{\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}$ + termes réguliers

$E = -\dfrac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_\mathrm{r}} < 0$: $\quad \dfrac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}$ + termes réguliers

2.

Forces à longue portée pour le problème mMM



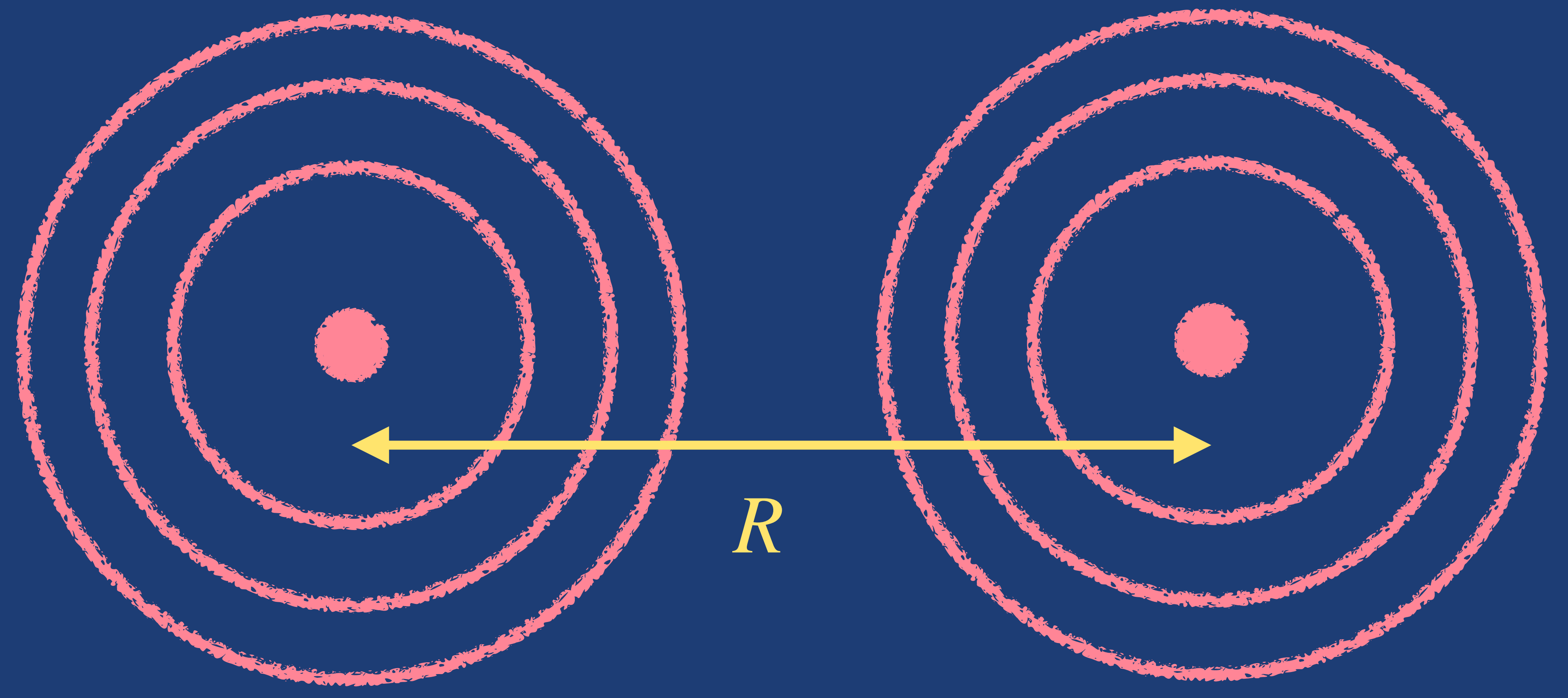
$$m_{\mathrm{r}} = \frac{mM}{m+M} \approx m$$

La fonction d'onde de la particule légère

Particules lourdes M supposées fixes en $\pm\boldsymbol{R}/2$ et générant chacune un pseudo-potentiel de longueur de diffusion a

On cherche un état lié de la particule légère d'énergie

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \qquad \kappa > 0$$

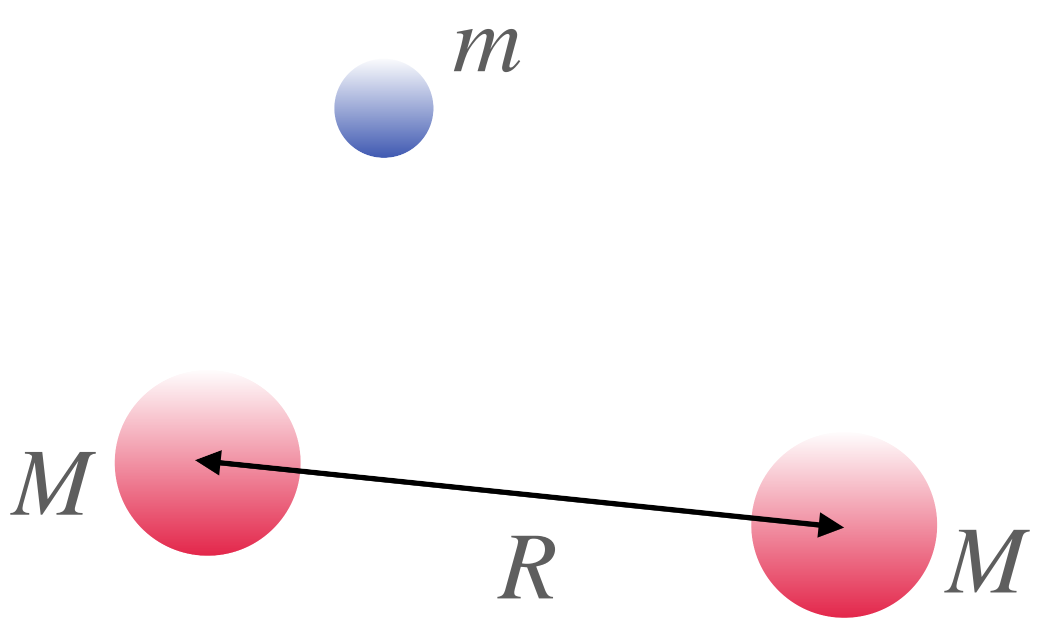


⟶ Forme de la fonction d'onde de la particule légère m ?

⟶ Prise en compte de la condition aux limites de Bethe-Peierls

⟶ Condition sur la (ou les) valeur(s) de κ

Etat(s) lié(s) de la particule légère



Energie de l'état lié : $E = -\dfrac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$ $\kappa > 0$

Le nombre d'onde κ doit être solution de l'une des deux équations :

$\kappa R - \dfrac{R}{a} = \mathrm{e}^{-\kappa R}$ correspondant à la solution symétrique $\dfrac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|} + \dfrac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}$

$\kappa R - \dfrac{R}{a} = -\,\mathrm{e}^{-\kappa R}$ correspondant à la solution antisymétrique $\dfrac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|} - \dfrac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}$

On commence par le cas Efimovien :

$$a = \pm\infty, \quad i.e.\ \frac{1}{a} = 0$$

Rappel : pas d'état lié à deux corps mM dans ce cas

Le cas Efimovien $|a| = +\infty$

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$$

⟶ Y a-t-il une solution à l'une ou l'autre des équations déterminant κ ?

$$\kappa R - \frac{R}{a} = \mathrm{e}^{-\kappa R}$$

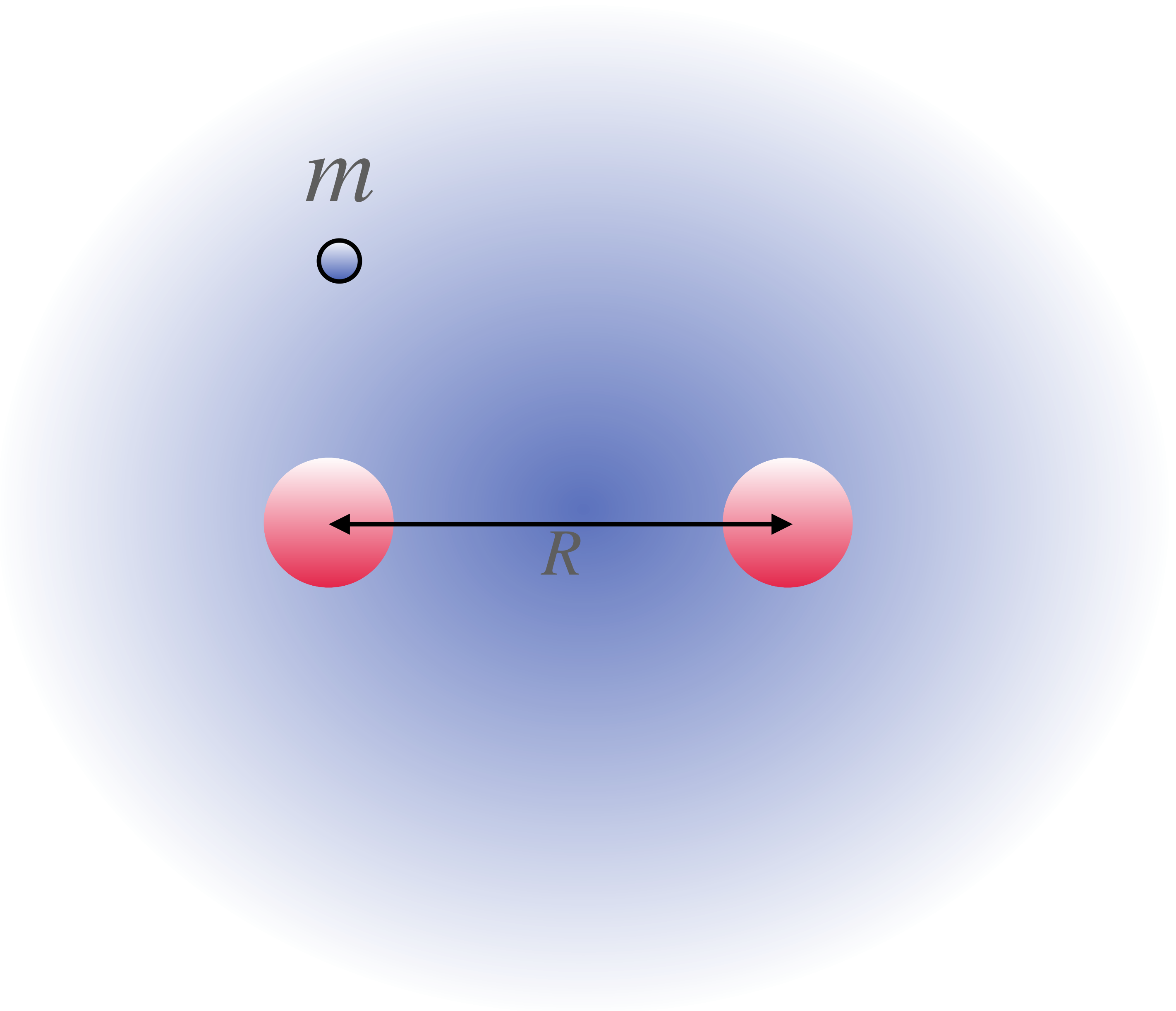
solution symétrique

$$\kappa R - \frac{R}{a} = -\,\mathrm{e}^{-\kappa R}$$

solution anti-symétrique

⟶ Quelle est la loi $E(R)$ quand une solution pour κ existe ?

Bilan du cas résonnant



Pour une interaction mM de portée nulle (pseudo-potentiel) et résonante ($|a| = +\infty$), on trouve un unique état lié pour m quand les deux particules lourdes sont présentes :

$$E(R) = -\Omega^2 \frac{\hbar^2}{2mR^2} \qquad \Omega^2 \approx 0.322$$

Cette énergie jouera ensuite le rôle de potentiel effectif d'interaction entre les deux particules lourdes quand on étudiera leur mouvement

Nous tenons notre potentiel attractif en $1/R^2$ entre les deux particules lourdes !!!

3.

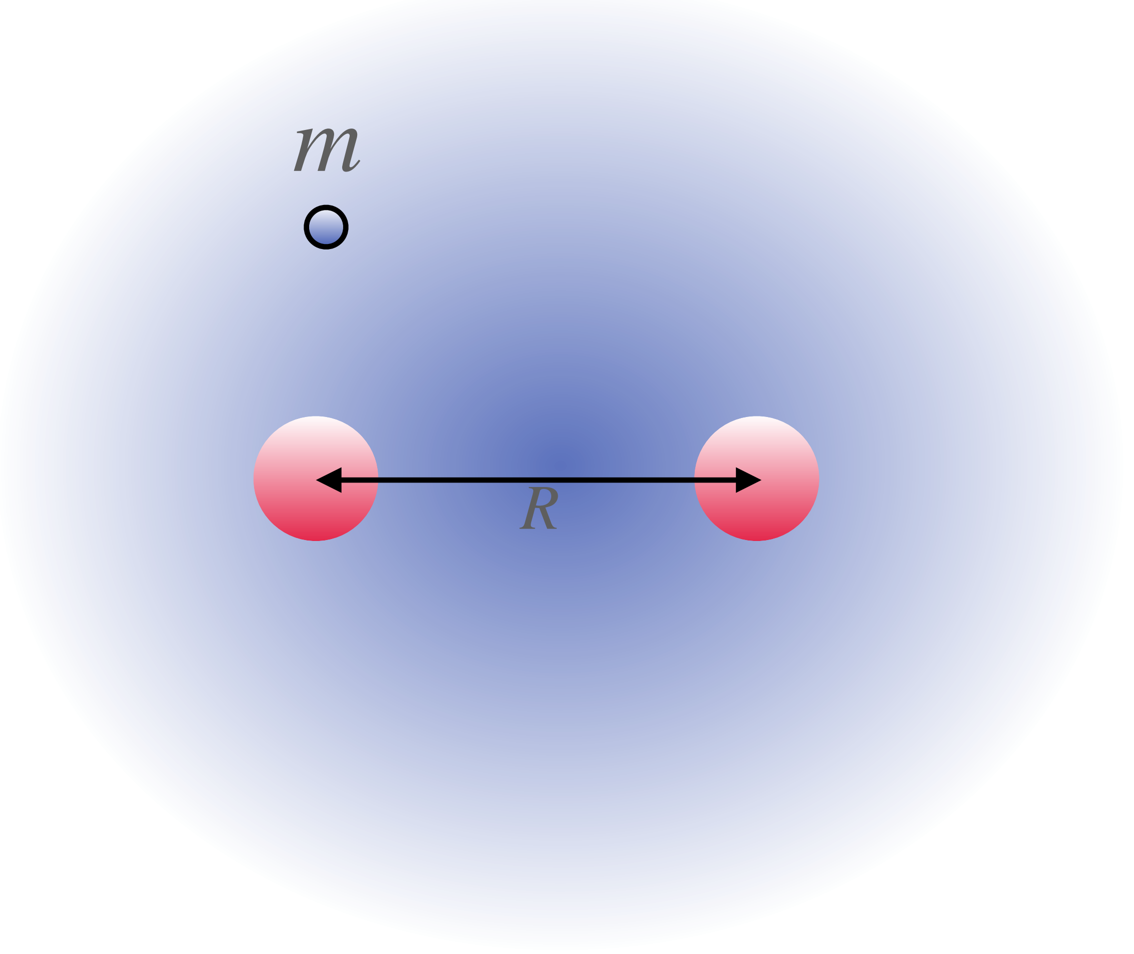
Longueur de diffusion finie et problème mMM

Que se passe-t-il pour $a > 0$ et pour $a < 0$?

Les deux “orbitales” possibles

Solution symétrique ou “orbitale liante”

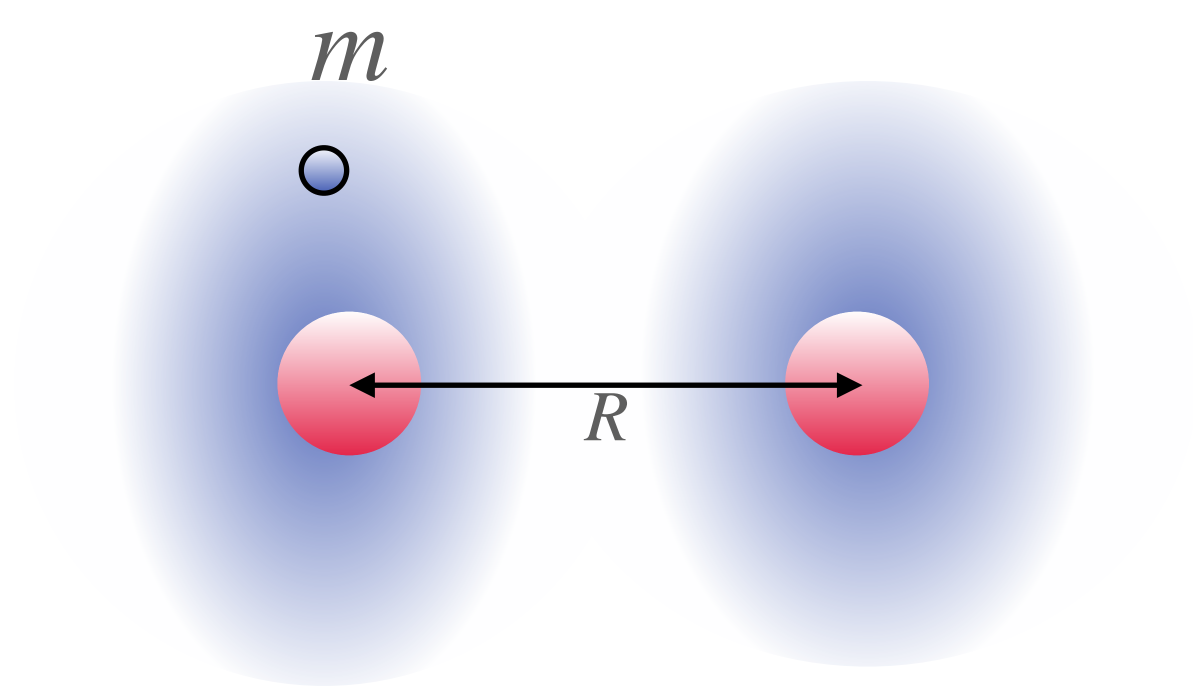
$$\kappa R - \frac{R}{a} = \mathrm{e}^{-\kappa R} \qquad \text{correspondant à} \qquad \frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|} + \frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}$$



On va s’intéresser à cette solution dans ce qui suit

Solution antisymétrique ou “orbitale antiliante”

$$\kappa R - \frac{R}{a} = -\,\mathrm{e}^{-\kappa R} \qquad \text{correspondant à} \qquad \frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}/2|} - \frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}}{|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}/2|}$$



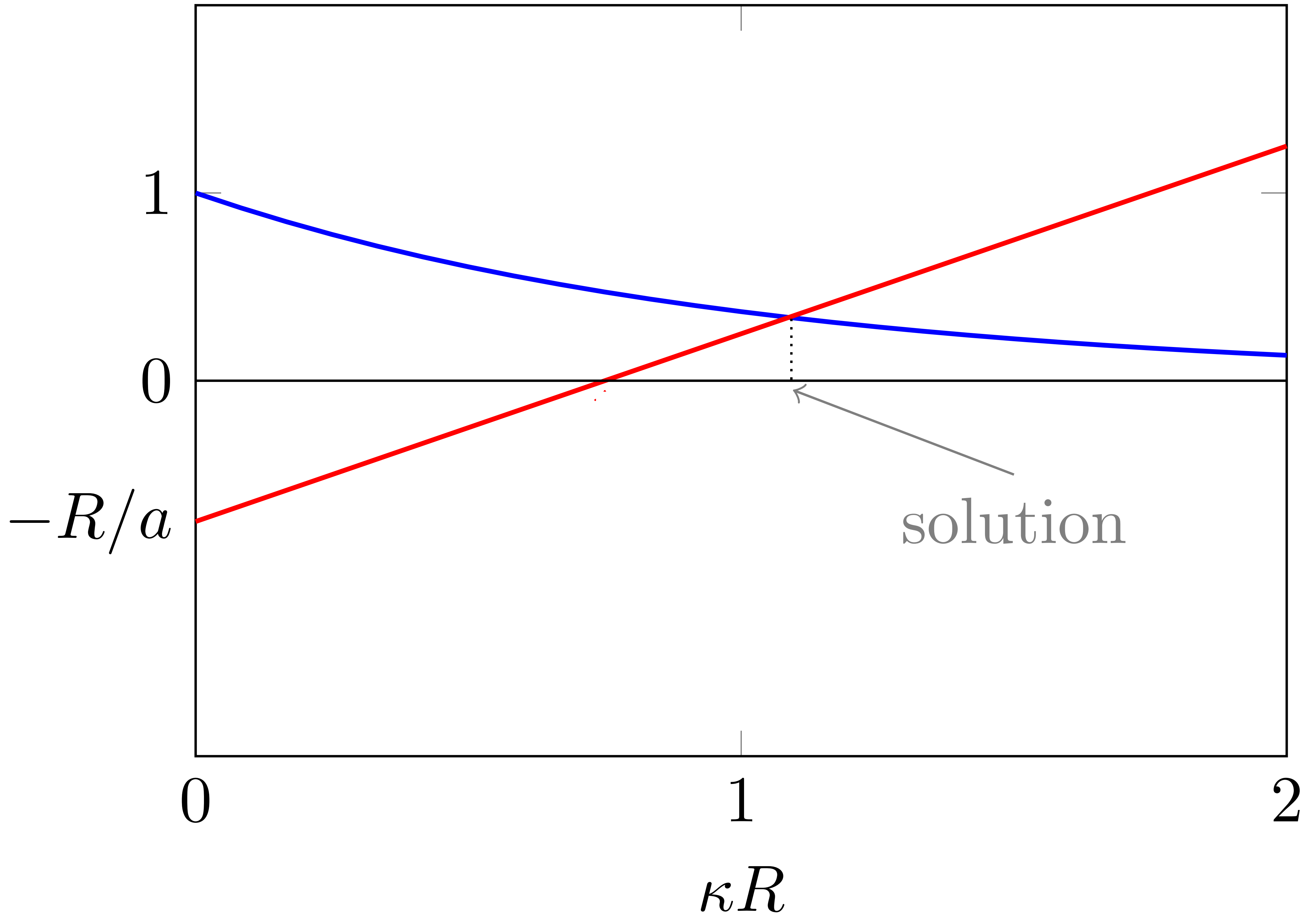
N’existe pas pour $|a| = +\infty$, ni pour $a < 0$

Le cas d'une longueur de diffusion $a > 0$

Solution symétrique ou "orbitale liante"

$$\kappa R - \frac{R}{a} = \mathrm{e}^{-\kappa R}$$

Il y a toujours une (et une seule) solution



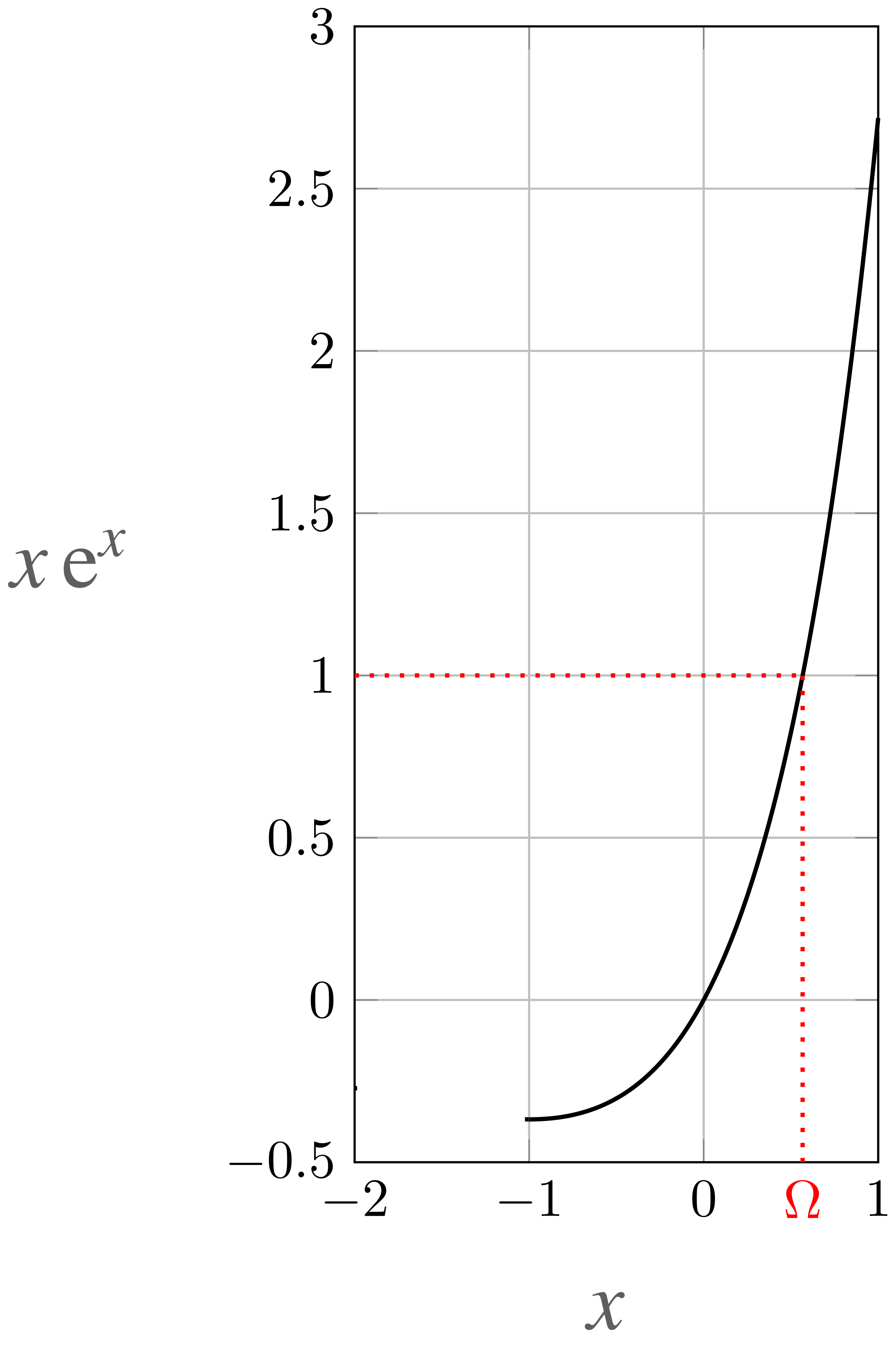
Ecriture de la solution en terme de la fonction de Lambert $W(x)$

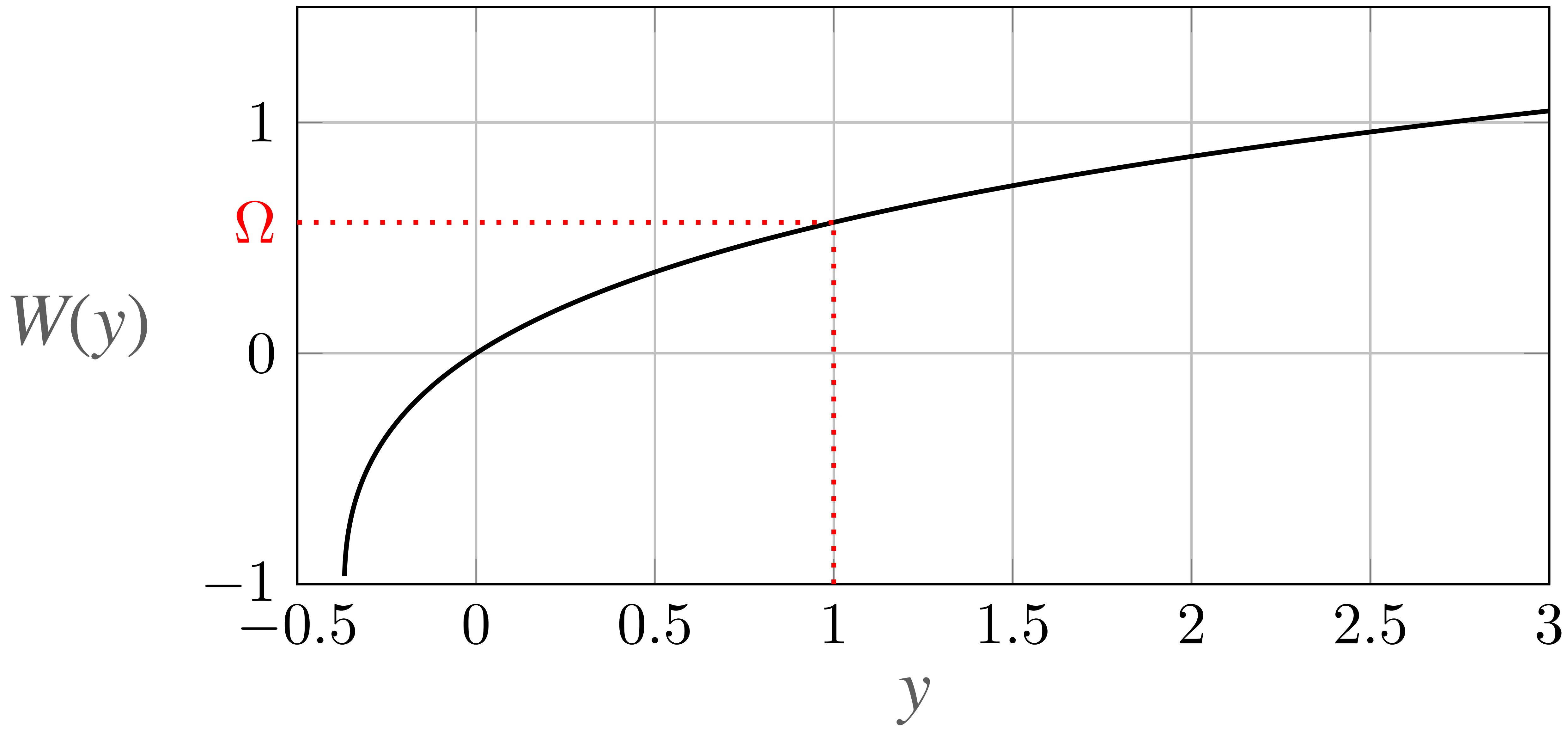
La fonction de Lambert

On note $W(y)$ la solution x de l'équation $\quad x\,\mathrm{e}^x = y$

$x \in [-1, +\infty[$

$y \in [-1/\mathrm{e}, +\infty[$

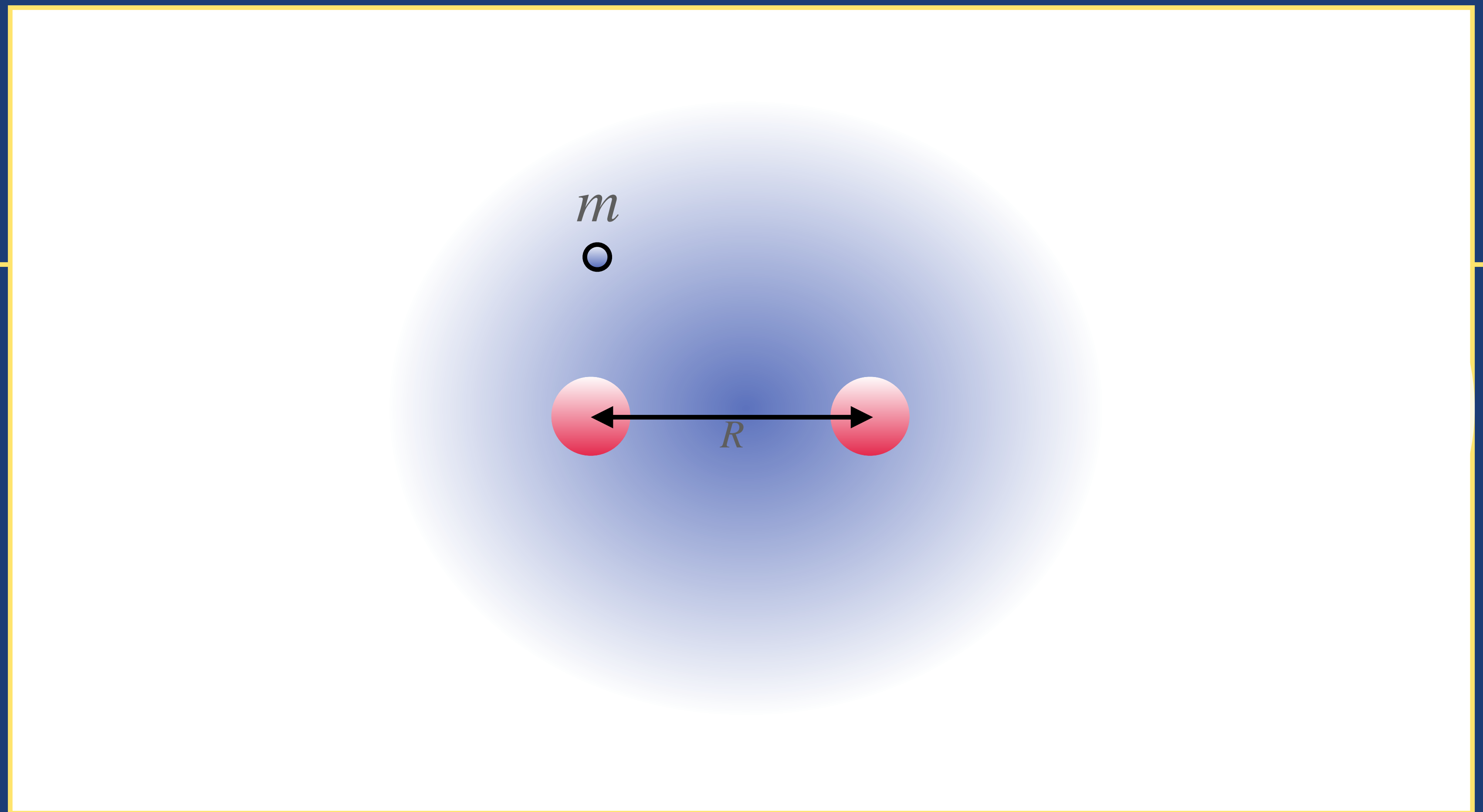




Au voisinage de $y = 0$, on a $W(y) \approx y$

$$W(1) = \Omega \approx 0.567$$

L'énergie de la particule m pour $a > 0$

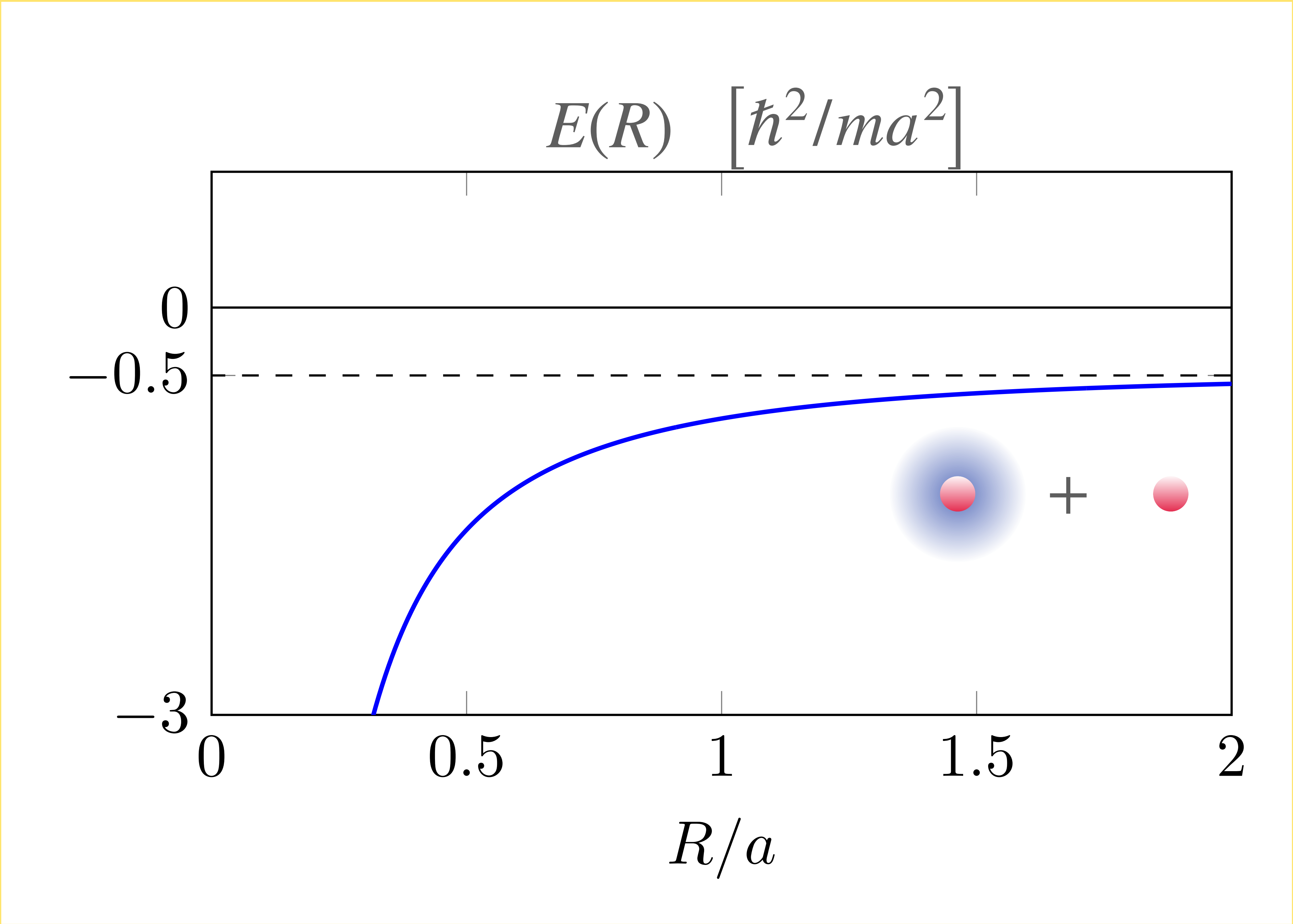


$$\kappa R - \frac{R}{a} = \mathrm{e}^{-\kappa R}$$

Expression de la solution κ en fonction de R et a

Energie associée $E = -\dfrac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$

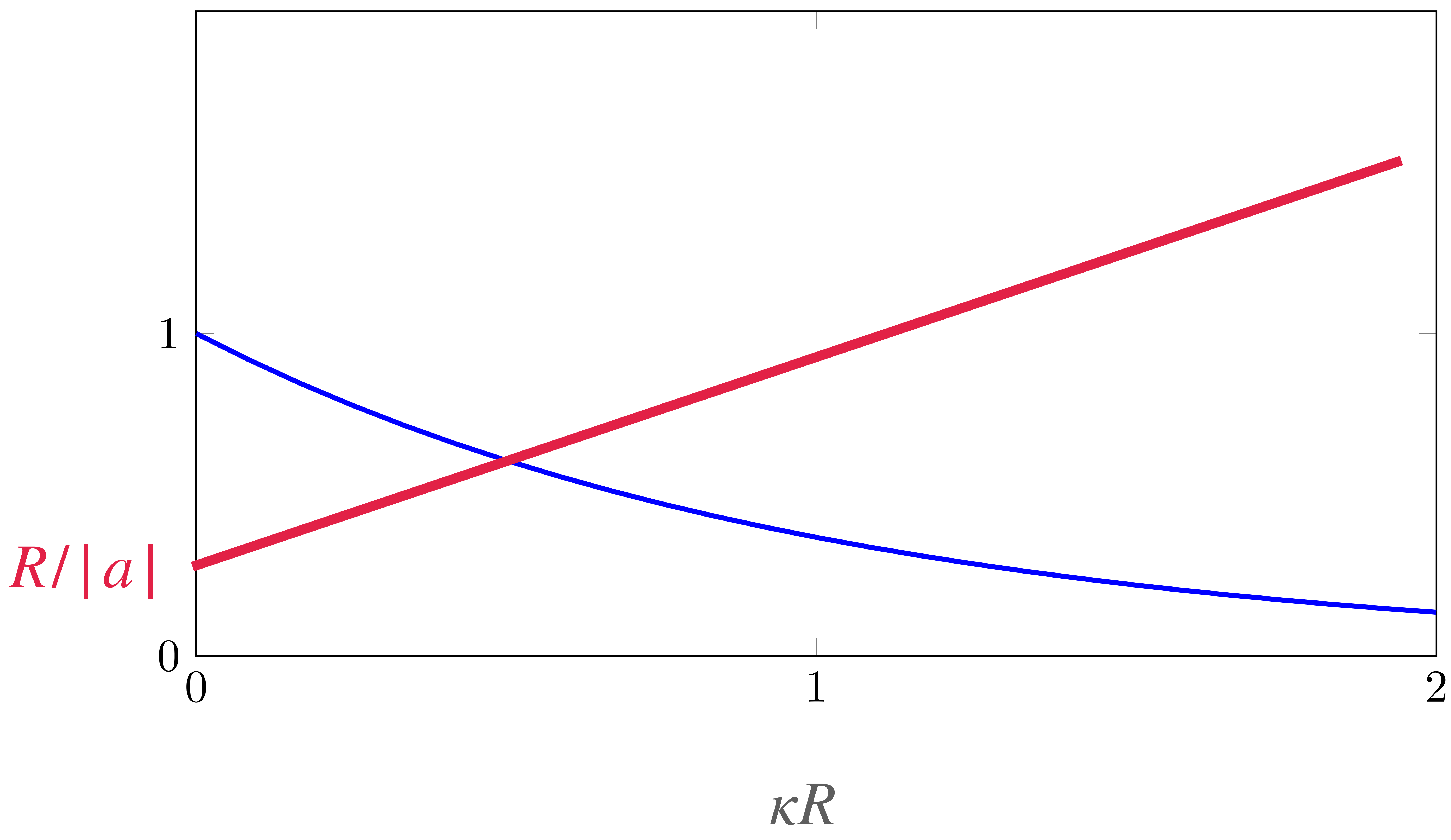
Examen des deux cas limites $R \gg a$ et $R \ll a$



Le cas d'une longueur de diffusion $a < 0$

Solution symétrique ou "orbitale liante"

$$\kappa R - \frac{R}{a} = \mathrm{e}^{-\kappa R} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \kappa R + \frac{R}{|a|} = \mathrm{e}^{-\kappa R}$$



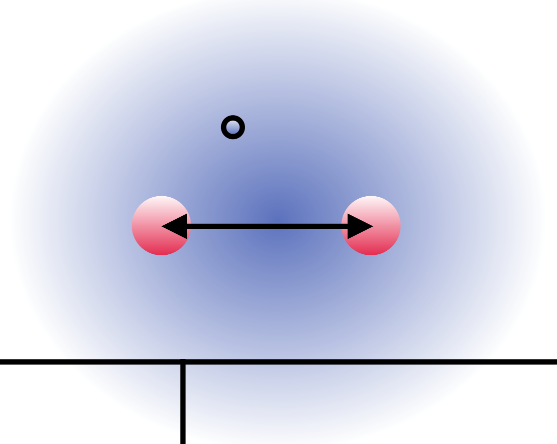
Solution uniquement pour $R < |a|$

$$R < |a| : \quad \kappa = -\frac{1}{|a|} + \frac{W(\mathrm{e}^{R/|a|})}{R}$$

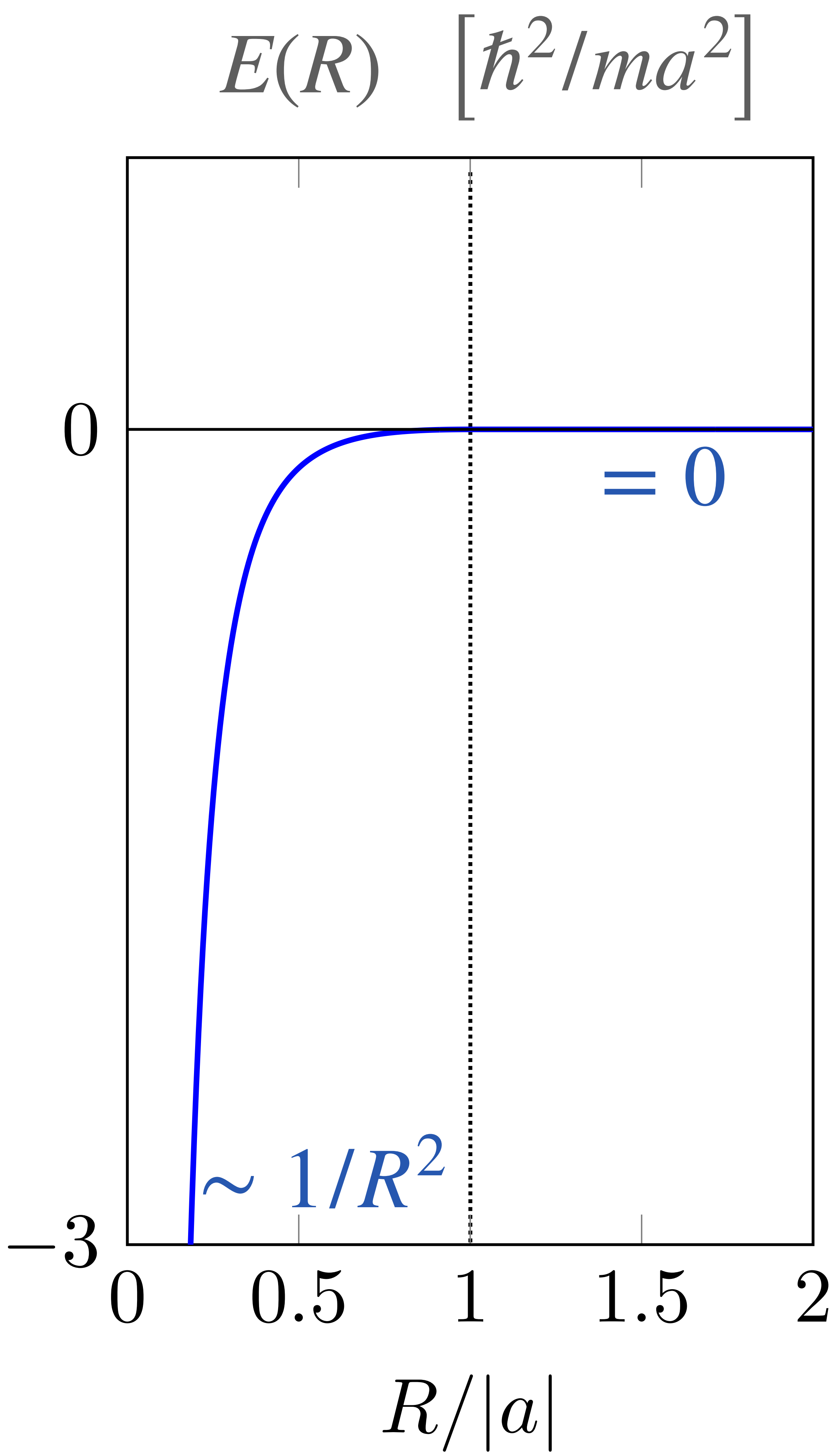
$$R \geq |a| : \quad \kappa = 0$$

Rappel : pas d'état lié à deux corps pour $a < 0$

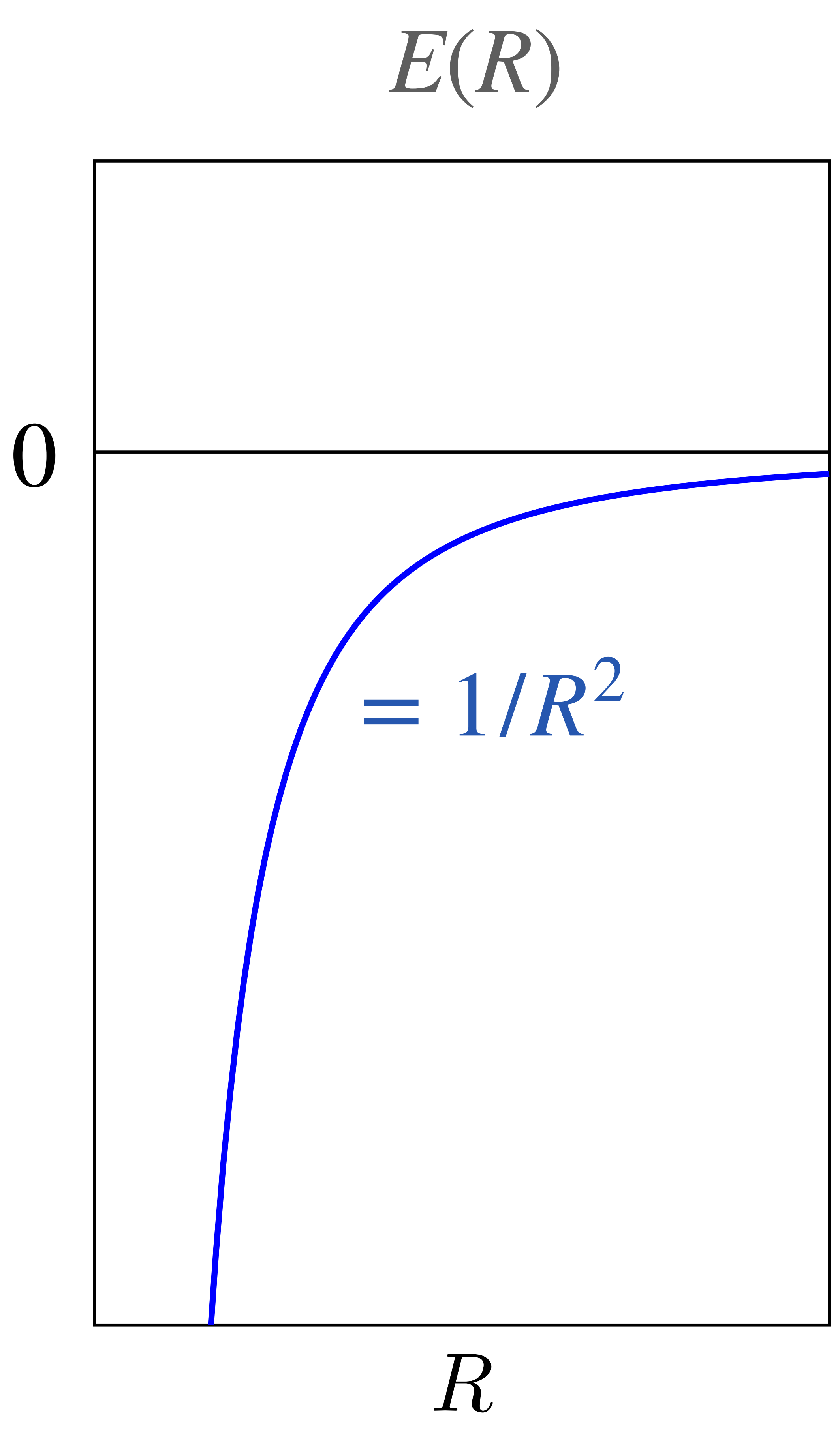
Bilan pour l'énergie du fondamental de m



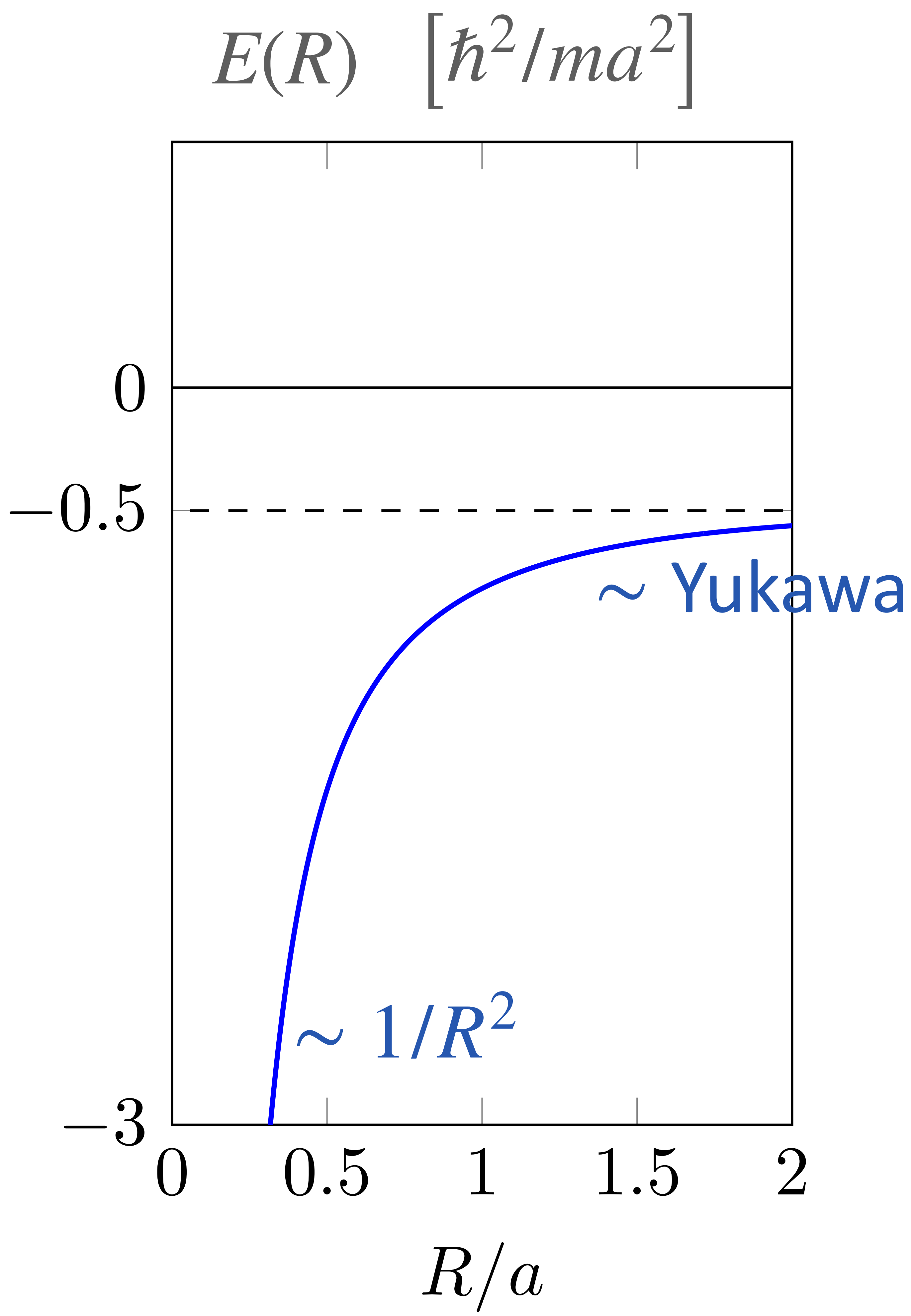
$a < 0$



$|a| = +\infty$



$a > 0$



4.

Généralisation au problème à N corps

Quelques généralisations possibles du problème mMM

On augmente le nombre de particules légères

$$mmMM \qquad\qquad mm\cdots m\ MM$$

Tout dépend de la nature statistique (bosons ou fermions) des particules légères et de leurs interactions

- Bosons sans interaction : on met toutes les particules m dans l'orbitale liante

- Fermions sans interaction : on remplit une mer de Fermi en prenant en compte la distorsion des niveaux d'énergie due à la présence des deux particules lourdes

- Particules légères en interaction

  Le problème à une particule lourde $mm\cdots m\ M$ n'est pas simple : polaron

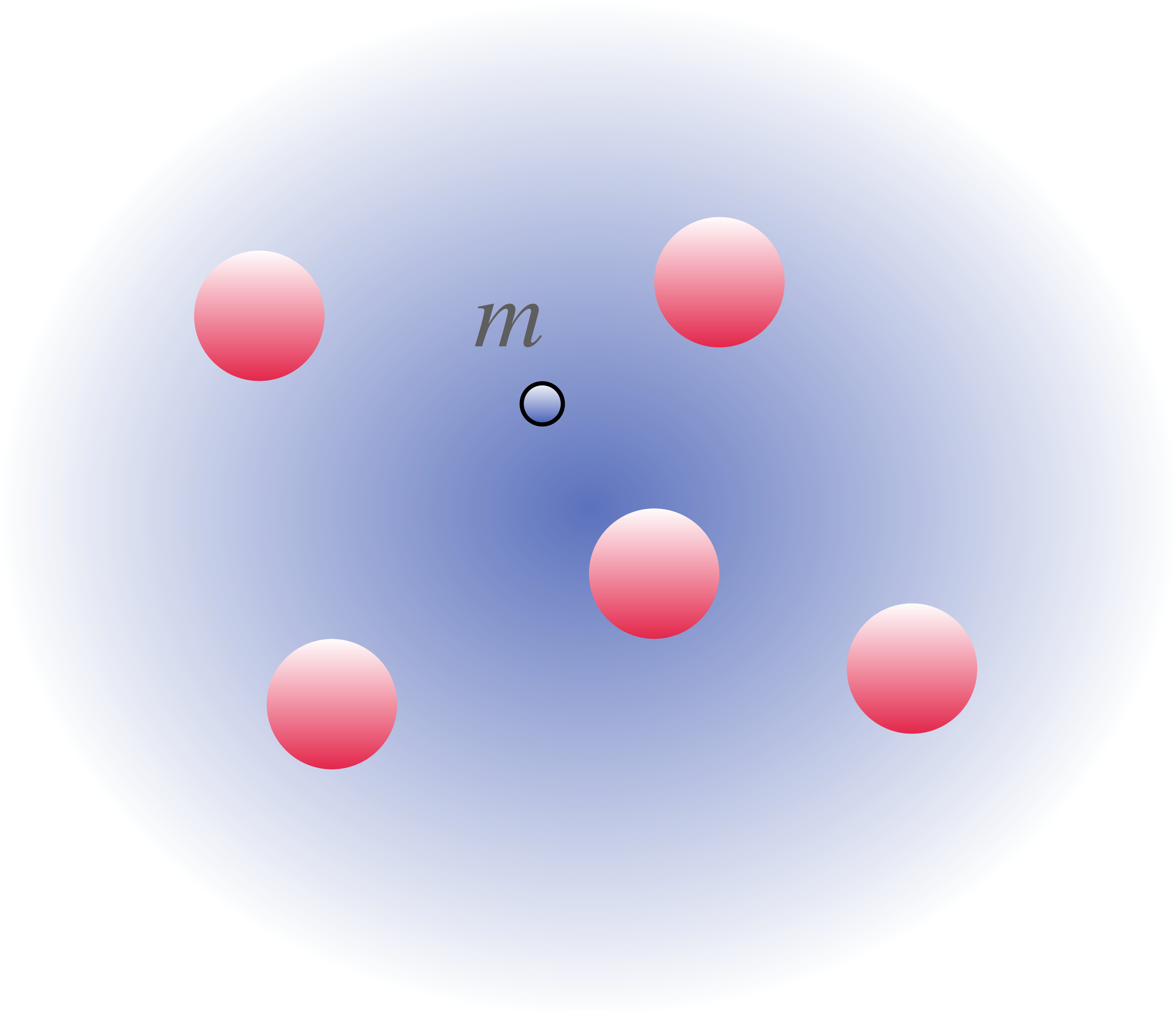
  Le problème à deux particules lourdes $mm\cdots m\ MM$ l'est encore moins : bi-polaron

Quelques généralisations possibles du problème mMM (suite)

One Ring to bring them all,
and in the darkness bind them
Tolkien

On augmente le nombre de particules lourdes

$$m\,MMM\cdots M$$



Peut-on se ramener à un potentiel effectif binaire

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(|\boldsymbol{R}_i - \boldsymbol{R}_j|)$$

entre particules lourdes ?

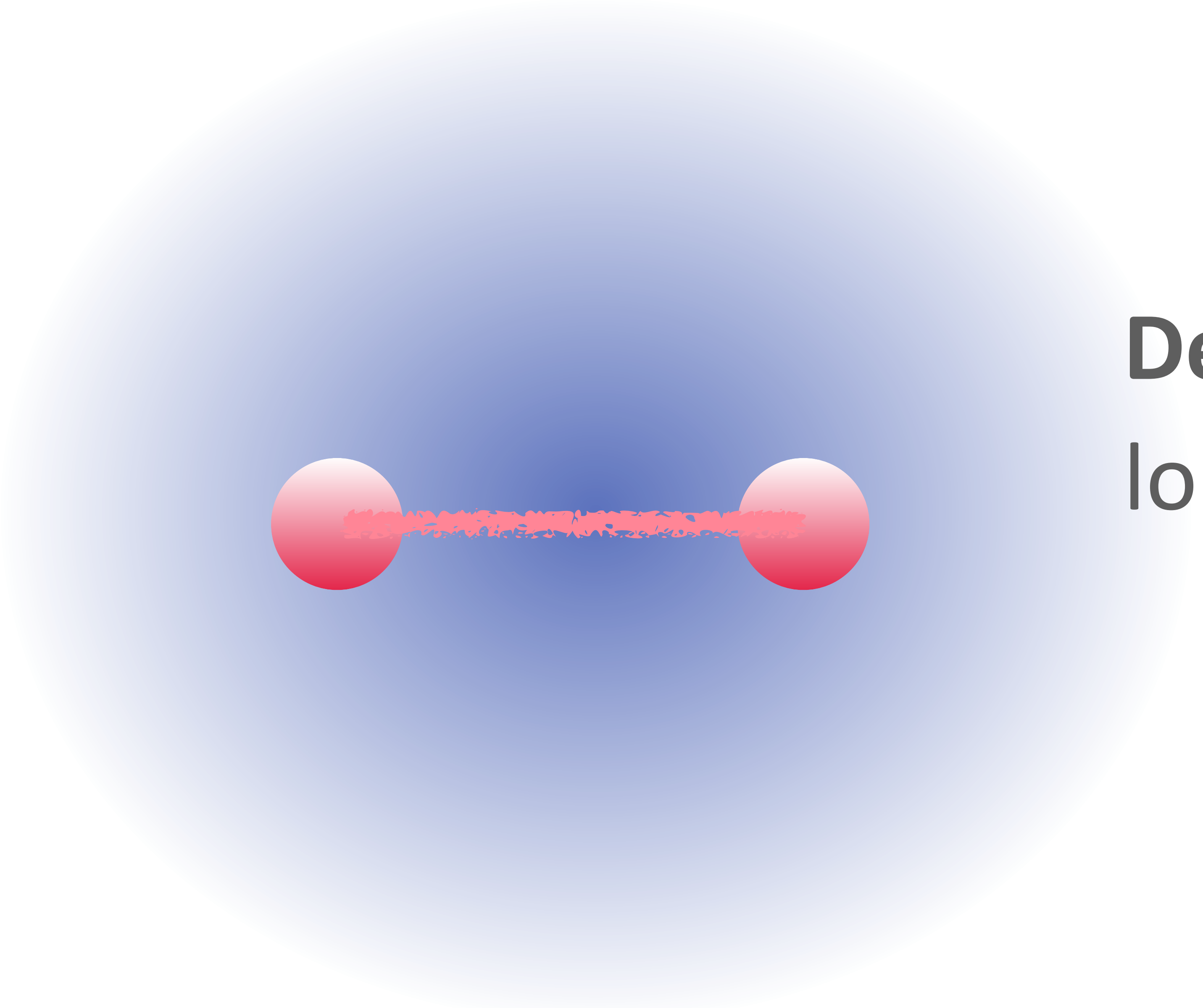
En résumé

Nous avons effectué pour le problème mMM la première étape du programme

Positions des particules lourdes fixées en $\pm R/2$

Nous avons trouvé les états propres et leurs énergies pour le mouvement de m

En particulier, la loi $E(R) \propto -\frac{1}{R^2}$ émerge pour une interaction mM résonnante



Deuxième étape : il faut maintenant étudier le mouvement des particules lourdes en traitant $E(R)$ comme un potentiel effectif d'interaction