

Chapitre 3

De l'interaction de contact aux forces à longue portée

Sommaire

1	Interaction à deux corps à basse énergie	3
1-1	Diffusion en onde s	3
1-2	Résonances de diffusion	4
1-3	Le pseudo-potentiel	5
1-4	Conditions aux limites de Bethe-Peierls	6
2	Force à longue portée pour le problème mMM	7
2-1	Le problème à trois corps mMM	7
2-2	Quels états liés pour la particule légère?	8
2-3	Le cas résonnant : $ a = +\infty$	9
3	Longueur de diffusion finie et problème mMM	10
3-1	Préliminaire : la fonction de Lambert	10
3-2	Cas d'une longueur de diffusion $a > 0$	10
3-3	Cas d'une longueur de diffusion $a < 0$	12
4	Généralisation au problème à N corps	14
4-1	Peut-on lier l'édifice à quatre corps $mmMM$?	14
4-2	Deux particules lourdes et N particules légères	15
4-3	N particules lourdes et 1 particule légère	17
4-4	Système dilué : le potentiel binaire retrouvé	18

Nous abordons dans ce chapitre le problème à trois corps sous son angle le plus simple, celui de deux particules lourdes, de masse M , liées entre elles par une particule légère de masse $m \ll M$. Cette hiérarchie entre les masses va simplifier considérablement notre étude, par comparaison au cas de trois particules identiques qui sera abordé aux chapitres 5 et 6. Nous allons utiliser l'approche de Born–Oppenheimer, initialement développée en physique moléculaire pour tirer profit de la grande différence de masse entre les électrons qui assurent la liaison chimique et les atomes composant une molécule.

Cette approche Born–Oppenheimer consiste à travailler en deux étapes, en tirant parti des deux échelles de temps très différentes du problème, celle associée au mouvement rapide de la particule légère et celle associée au mouvement lent des deux particules lourdes :

- Dans un premier temps, on traite le problème à un corps décrivant le mouvement de la particule légère m dans le champ de force créé par les particules lourdes M , supposées fixes à une distance R . On trouve pour cette particule légère un ensemble d'énergies propres $E_n(R)$, en particulier l'énergie de l'état fondamental $E_0(R)$.
- Dans un deuxième temps, on s'intéresse au mouvement des particules lourdes, en particulier la variation dans le temps de leur séparation R . On suppose que l'état de la particule légère suit adiabatiquement ce mouvement, de sorte que les énergies $E_n(R)$ jouent le rôle de potentiels effectifs d'interaction entre les deux particules lourdes.

Cette séparation du problème à trois corps en un problème à un corps

suivi d'un problème à deux corps est évidemment une simplification considérable. Le point remarquable est qu'elle permet de retrouver l'essentiel de l'universalité de la physique d'Efimov pour trois particules identiques, avec un "bonus" représenté par la variable de contrôle supplémentaire représentée par le rapport M/m .

Cette situation mMM a été proposée par EFIMOV (1973) pour le cas d'une interaction de contact, que nous allons nous aussi considérer dans ce qui suit. Elle a ensuite été reprise par FONSECA, REDISH et al. (1979) pour un potentiel séparable du type de ceux introduit par YAMAGUCHI (1954).

Les questions que nous souhaitons aborder dans ce cours et le suivant sont par exemple :

- Peut-il y avoir un état lié à 3 corps mMM même si le dimère mM n'est pas lié?
- Si le dimère mM est lié tout comme le trimère mMM , lequel est le plus stable? Est-ce que le trimère n'a pas intérêt à éjecter un M pour abaisser encore son énergie?

Nous allons commencer ce chapitre par la présentation en §1 de l'interaction de contact et sa prise en compte sous la forme de condition aux limites de Bethe–Peierls, ce qui nous permettra de préciser la notion de résonance de diffusion. Nous débuterons ensuite notre étude du problème à trois corps par ce cas résonant (longueur de diffusion infinie) pour mettre en évidence l'émergence du potentiel en $E_0(R) \propto 1/R^2$ à la base de l'effet Efimov (§2). La partie 3 sera consacrée à la détermination de l'interaction effective $E_0(R)$ de part et d'autre de la résonance. Enfin, nous expliquerons brièvement en partie 4 comment cette approche se généralise au cas où plusieurs particules légères et plusieurs particules lourdes sont présentes simultanément.

La deuxième étape de l'approche de Born-Oppenheimer, c'est-à-dire le mouvement des particules lourdes sous l'effet de l'interaction effective $E_0(R)$ sera abordée dans le chapitre suivant.

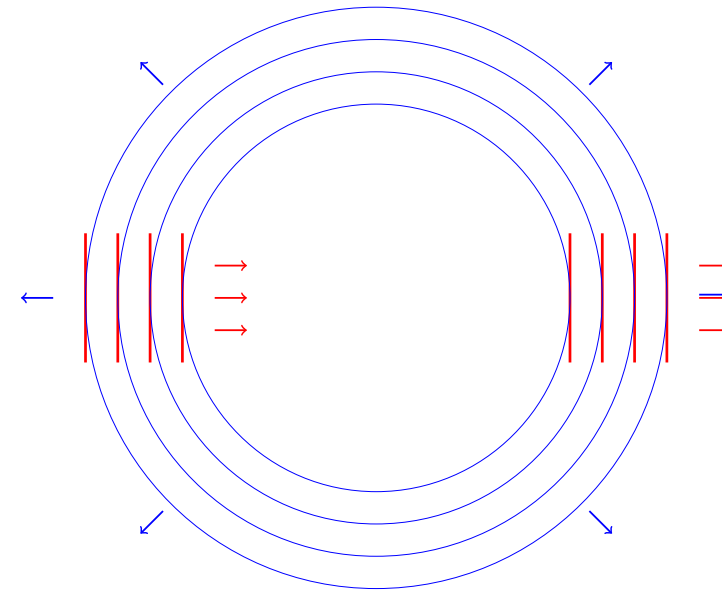


FIGURE 1. Situation physique décrite par l'état stationnaire de diffusion (1), avec l'onde plane incidente de vecteur d'onde \mathbf{k} et l'onde sphérique diffusée e^{ikr}/r , d'amplitude $f(k)$.

1 Interaction à deux corps à basse énergie

1-1 Diffusion en onde s

Nous nous limitons dans ce chapitre au cas de particules neutres dont la vitesse est suffisamment basse pour que dans le problème à deux corps, seules les interactions dans le canal de moment cinétique nul (onde s) sont significatives.

L'expression asymptotique de l'état stationnaire de diffusion décrivant cette interaction est

$$r \gg b : \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (1)$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde relatif incident. L'état stationnaire de diffusion est un état propre de l'hamiltonien décrivant le mouvement relatif des deux particules, avec la valeur propre $E = \hbar^2 k^2 / 2m_r$ où m_r est la masse réduite. Il décrit la situation physique d'une collision avec un moment incident relatif \mathbf{k} et une onde sphérique divergente d'amplitude $f(k)$ (figure 1).

L'expression asymptotique (1) est proche de l'expression exacte de $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ quand r est plus grand que la portée b du potentiel diffusant, en l'occurrence le rayon de van der Waals

$$R_{\text{vdW}} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m_r C_6}{\hbar^2} \right)^{1/4} \quad (2)$$

pour un potentiel d'interaction à longue distance de type van der Waals (en $-C_6/r^6$) entre atomes neutres.

L'interaction entre deux particules est donc décrite par l'amplitude de diffusion $f(k)$, qui se met sous la forme (cf. cours 2020-21, chapitre 3) :

$$f(k) \approx \frac{-a}{1 + ika + \frac{1}{2}r_e k^2}, \quad (3)$$

où a est la longueur de diffusion et r_e la portée effective. Aux petites valeurs de k qui nous intéresseront ici, le terme de portée effective sera négligeable et nous conserverons uniquement $1 + ika$ au dénominateur de cette fraction. La longueur de diffusion a peut être positive ou négative, voire nulle ou infinie.

Quand $kr \ll 1$, l'expression (1) se simplifie pour donner :

$$\begin{aligned} b \ll r \ll k^{-1} : \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &\sim 1 - \frac{a}{1 + ika} \left(\frac{1 + ikr}{r} \right) + \mathcal{O}(r) \\ &\sim \frac{-a}{1 + ika} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) + \mathcal{O}(r) \end{aligned} \quad (4)$$

que nous écrivons plus simplement sous la forme (à ce stade, l'état $\psi_{\mathbf{k}}$ est non normé, donc défini à un facteur multiplicatif près) :

$$b \ll r \ll k^{-1} : \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r) \quad (5)$$

soit un terme en r^{-1} , un terme en r^0 , et des termes correctifs en r^n avec $n \geq 1$.

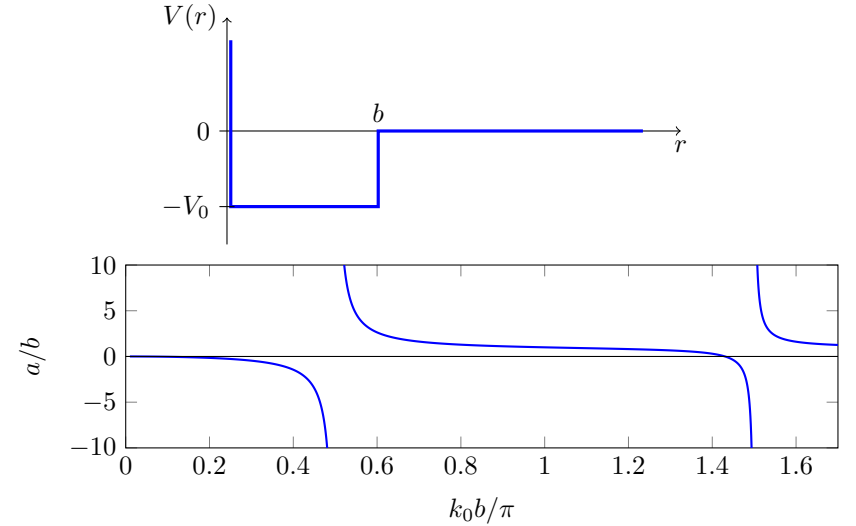


FIGURE 2. Haut : Puits de potentiel carré de profondeur V_0 et de portée b . Bas : Variation de la longueur de diffusion d'un puits carré avec la profondeur V_0 .

1-2 Résonances de diffusion

Dans ce qui va suivre, nous supposons que le potentiel d'interaction $V(r)$ entre les particules comporte une partie attractive et peut donner naissance à un ou plusieurs états liés. Quand on augmente progressivement la composante attractive de $V(r)$ pour faire apparaître un nouvel état lié, on observe la variation suivante pour la longueur de diffusion (théorème de Levinson) :

- Quand la composante attractive est légèrement trop faible pour que l'état lié apparaisse, la longueur de diffusion est grande et négative.
- Au seuil d'apparition de l'état lié, la longueur de diffusion est infinie. Son signe n'a pas d'importance, c'est plutôt l'écriture $\frac{1}{a} = 0$ qui est pertinente en ce point, comme on peut le voir sur l'expression asymptotique (5).
- Quand la composante attractive a dépassé la valeur seuil pour l'apparition de l'état lié, la longueur de diffusion est grande et positive.

Ce comportement est illustré pour un puits carré attractif de profondeur V_0 et de portée b (figure 2, haut). On peut montrer que le seuil d'apparition du premier état lié s'écrit (cours 2020-21, chapitre 3, § 3) :

$$k_0 b = \frac{\pi}{2} \quad \text{avec} \quad \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_r} = V_0, \quad (6)$$

et le seuil pour le n -ième état lié est

$$k_0 b = \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (7)$$

La longueur de diffusion vaut quant à elle

$$a = b - \frac{\tan(k_0 b)}{k_0} \quad (8)$$

et elle diverge pour chaque valeur de k_0 satisfaisant (7). La variation de a avec la profondeur V_0 est tracée sur la figure 2, bas.

Dans ce qui va suivre, nous allons nous intéresser aux effets physiques qui apparaissent quand un système à deux particules est sur le point d'avoir un état lié, ou quand cet état lié vient d'apparaître. Dans le cadre d'une modélisation par un puits carré, cela revient à se placer autour du point (6), $k_0 b \approx \pi/2$ (figure 3).

Note. Les états fortement liés, même s'ils sont présents en pratique, ne vont pas jouer de rôle pour l'instant. Ils interviendront plus tard en tant qu'ingrédients pour des processus inélastiques dans une collision à trois corps : des atomes initialement libres peuvent former après la collision un dimère fortement lié, la conservation de l'énergie et de l'impulsion étant assurée par la présence du troisième corps.

1-3 Le pseudo-potentiel

Le pseudo-potentiel est défini à trois dimensions. Il peut être vu comme un potentiel de portée b nulle, conduisant à une diffusion dans l'onde s uniquement, avec une longueur de diffusion a ajustable.

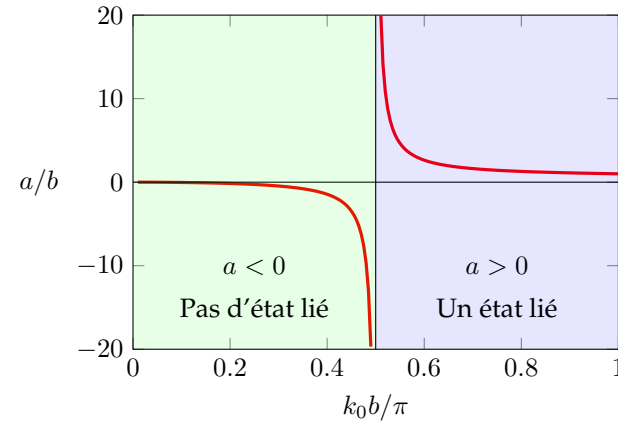


FIGURE 3. Zoom de la figure 2 autour du seuil d'apparition du premier état lié, en $k_0 b = \pi/2$.

L'action du pseudo-potentiel \hat{V}_{pp} sur une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ s'écrit

$$\hat{V}_{pp} \psi(\mathbf{r}) = g \delta(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial r} [r \psi(\mathbf{r})]. \quad (9)$$

On peut déterminer analytiquement une base d'états propres de l'hamiltonien relatif décrivant l'interaction entre deux particules sous l'effet de ce pseudo-potentiel :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_r} + \hat{V}_{pp}. \quad (10)$$

Pour $g < 0$, on trouve uniquement des états propres d'énergie positive

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{a}{1 + ika} \frac{e^{ikr}}{r} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r} \quad (11)$$

avec

$$g = \frac{2\pi \hbar^2 a}{m_r} \quad (12)$$

Pour $g > 0$, il faut ajouter à cette famille d'états propres l'état lié (unique)

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/a}}{r} \quad E = -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2}} \quad (13)$$

pour former une base de l'espace de Hilbert.

Nous avons étudié en détail les propriétés de ce pseudo-potential dans le cours 2020-21 (chapitre 3, §4). Nous nous conterons donc de rappeler ici plusieurs propriétés importantes pour la suite :

- L'expression (11) rappelle la forme asymptotique d'un état stationnaire de diffusion. Toutefois, cette expression est valable ici quelle que soit la valeur de $r \neq 0$, ce qui correspond bien à l'idée d'un potentiel de portée b nulle.
- L'expression (11) fournit la valeur exacte de l'amplitude de diffusion du pseudo-potential :

$$f(k) = \frac{-a}{1 + ika}. \quad (14)$$

Il s'ensuit qu'il n'y a pas de correction de portée effective r_e comme en (3), ni de correction d'ordre supérieur en k . La quantité a définie à partir de (12) donne la valeur *exacte* de la longueur de diffusion.

- Toutes les fonctions propres (11) et (13) ont le même comportement au voisinage de l'origine pour $a \neq 0$:

$$r \ll k^{-1}, a : \quad \psi(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r} - \frac{1}{a} + \mathcal{O}(r). \quad (15)$$

Comme les fonctions physiquement acceptables doivent s'écrire comme combinaisons linéaires des fonctions propres de l'hamiltonien, cela signifie qu'un problème impliquant le pseudo-potential n'a pas le même espace de fonctions qu'un problème pour un potentiel régulier. Pour un potentiel régulier, on ne considère que des fonctions également régulières en tout point, en particulier en $r = 0$. Elles doivent donc s'écrire

$$\text{Potential régulier :} \quad \psi(\mathbf{r}) = \beta + \mathcal{O}(r) \quad (16)$$

où β est une constante quelconque, éventuellement nulle. Pour le pseudo-potential, ces fonctions doivent s'écrire

$$\text{Pseudo-potential :} \quad \psi(\mathbf{r}) = \frac{\alpha}{r} + \beta + \mathcal{O}(r) \quad (17)$$

avec le lien entre les coefficients α et β :

$$\beta = -\frac{\alpha}{a}. \quad (18)$$

de sorte que les fonctions physiquement pertinentes s'écrivent :

$$\boxed{\text{Pseudo-potential :} \quad \psi(\mathbf{r}) = \alpha \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) + \mathcal{O}(r)} \quad (19)$$

On notera qu'on peut approcher ce pseudo-potential en revenant au puits carré du paragraphe 1-2, en prenant la limite d'une portée nulle $b \rightarrow 0$ et d'une profondeur infinie $k_0 \rightarrow \infty$. Plus précisément, cette limite doit se prendre en prenant $k_0 b = \frac{\pi}{2} + \frac{1}{k_0 a_s}$ où a_s est la longueur de diffusion visée, ce qui revient à se placer au voisinage du seuil d'apparition du premier état lié.

1-4 Conditions aux limites de Bethe-Peierls

Une manière commode de traiter les problèmes où le pseudo-potential intervient est de poser *a priori* les conditions aux limites (19) comme domaine des fonctions éligibles. Cela revient de fait à éliminer le point $r = 0$ du domaine pertinent de l'espace, et on peut alors se limiter à un hamiltonien purement cinétique

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_r}. \quad (20)$$

La situation est très voisine de la démarche adoptée pour traiter le puits carré dans les cours de base de mécanique quantique (voir figure 4). Si le puits est de profondeur finie, on traite explicitement l'action du potentiel $V(x)$ à la fois dans les régions permises et interdites pour trouver les états propres du problème. Mais quand on prend la limite du puits infini (l'équivalent de notre limite de portée nulle), on oublie le potentiel $V(x)$ et on le remplace par la condition aux limites sur toutes les fonctions d'onde $\psi(\pm b/2) = 0$.

Il existe plusieurs techniques équivalentes pour écrire en pratique la condition aux limites de Bethe-Peierls (19). On peut remarquer par

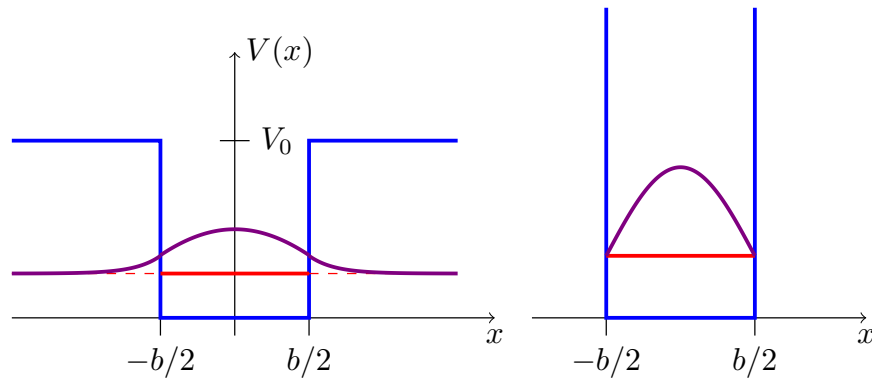


FIGURE 4. Les deux approches pour traiter un puits carré. Gauche : on traite séparément les régions permises et interdites en utilisant la forme explicite de $V(x)$ dans ces régions, et on raccorde les solutions. Droite : on prend la limite $V_0 \rightarrow \infty$ et on prend en compte le potentiel par la condition aux limites $\psi(\pm b/2) = 0$. L'énergie est alors purement cinétique.

exemple que

$$\lim_{r \rightarrow 0} [r\psi(\mathbf{r})] = \alpha \quad \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial [r\psi(\mathbf{r})]}{\partial r} \right] = -\frac{\alpha}{a} \quad (21)$$

de sorte qu'on peut imposer quelle que soit la valeur du coefficient multiplicatif α :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial [r\psi(\mathbf{r})]}{\partial r} \right] = -\frac{1}{a} \lim_{r \rightarrow 0} [r\psi(\mathbf{r})]. \quad (22)$$

Cette condition s'écrit également

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial \ln [r\psi(\mathbf{r})]}{\partial r} = -\frac{1}{a}. \quad (23)$$

On peut enfin déterminer "à la main" le coefficient de r^{-1} et de r^0 et imposer à ces deux coefficients d'être dans un rapport $-a$, c'est la méthode que nous utiliserons dans la suite.

2 Force à longue portée pour le problème mMM

2-1 Le problème à trois corps mMM

Dans l'approche exacte du problème à trois corps, toutes les particules sont traitées de la même façon, ce qui entraîne la manipulation de fonctions d'onde avec de nombreuses variables (9 coordonnées de position). Avant d'aborder cette approche exacte dans un chapitre ultérieur, nous allons traiter ici un cas plus simple, mais très instructif, introduit par EFIMOV (1973) [voir aussi FONSECA, REDISH et al. (1979)] : une des trois particules (de masse m) est beaucoup plus légère que les deux autres (de masse M) et elle interagit de manière quasi-résonante avec elles ; les deux particules lourdes n'interagissent pas entre elles, sauf éventuellement via un potentiel de cœur dur qui leur interdit de s'approcher à moins que R_0 , pour éviter la chute sur le centre que nous avons étudiée dans les cours précédents.

Comme expliqué en introduction de ce chapitre, cette hiérarchie des masses va nous permettre d'utiliser une approximation en tout point identique à l'approximation de Born–Oppenheimer en physique moléculaire (la particule légère jouant le rôle d'un électron), en séparant notre traitement en deux étapes :

- Dans un premier temps, nous allons supposer que les deux particules lourdes sont immobiles, séparées par une distance R , et nous allons étudier le mouvement de la particule légère interagissant avec ces particules lourdes. Il s'agit donc d'un problème à un corps dont nous souhaitons déterminer en particulier l'énergie de l'état fondamental que nous noterons à partir de maintenant $E_0(R) \equiv E(R)$.
- Dans un deuxième temps (*cf.* cours suivant), nous traiterons l'énergie $E(R)$ comme une énergie potentielle d'interaction entre les deux particules massives et nous étudierons leur mouvement. Il s'agira alors d'un problème à deux corps, pour lequel la résolution est bien balisée.

Le résultat principal de cette approche est l'émergence, dans le cas où l'interaction mM est résonnante, du potentiel effectif attractif $E(R) \propto -1/R^2$, conduisant à l'invariance d'échelle que nous avons discutée dans les cours 1 et 2.

Remarque. On peut s'interroger sur le cas particulier $R = 0$, quand les deux particules lourdes sont superposées. En fait, ce problème est mal défini dans le cadre d'une interaction décrite par le pseudo-potential et il faut revenir à une interaction de portée non nulle pour lui donner un sens précis. C'est ce que nous ferons au chapitre suivant quand nous décrirons le *collapse de Thomas*.

2-2 Quels états liés pour la particule légère?

Nous abordons le problème à trois corps mMM , avec les particules M supposées pour l'instant infiniment lourdes, et donc immobiles. Nous notons R leur distance et nous supposons qu'elles sont placées symétriquement par rapport à l'origine des coordonnées, aux points $\pm R/2$ (avec $R \neq 0$). Nous nous intéressons aux états liés du mouvement de la particule légère de masse m en supposant qu'elle interagit de la même façon avec les deux particules lourdes, interaction décrite par un pseudo-potential associé à la longueur de diffusion a .

Nous allons chercher la forme du ou des états liés en traitant l'action du pseudo-potential par l'intermédiaire des conditions aux limites de Bethe-Peierls. Notons

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_r} \quad (24)$$

l'énergie de l'état lié recherché, avec $\kappa > 0$. Notons que puisque $M \gg m$, on a $m_r \approx m$. Notre but est de déterminer la valeur de κ en fonction des deux paramètres du problème, la longueur de diffusion a caractérisant l'interaction mM et la distance R entre les deux particules lourdes.

En dehors des points $\pm R/2$, la fonction d'onde de l'état lié doit être une solution *régulière* de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \nabla^2 \psi = \kappa^2 \psi \quad (25)$$

et cette fonction d'onde doit obéir aux conditions aux limites (à un coefficient multiplicatif près)

$$\mathbf{r} \rightarrow \pm R/2 : \quad \psi(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{|\mathbf{r} \mp R/2|} - \frac{1}{a} \quad (26)$$

Cette fonction d'onde est donc de la forme :

$$\psi(\mathbf{r}) = A \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|} + B \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|}}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|} \quad (27)$$

Il nous faut maintenant trouver, pour un R donné, le choix de κ , A et B qui permet d'assurer que cette condition aux limites est bien vérifiée.

Quand on prend la limite $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}/2$, les termes en $|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|^{-1}$ et en $|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|^0$ s'écrivent :

$$|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|^{-1} : \quad A \quad (28)$$

$$|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|^0 : \quad -A\kappa + B \frac{e^{-\kappa R}}{R}. \quad (29)$$

Ces deux termes doivent être dans un rapport $-1/a$ pour vérifier la condition aux limites (26), ce qui impose :

$$-A\kappa + B \frac{e^{-\kappa R}}{R} = -\frac{A}{a}. \quad (30)$$

De même, on trouve pour $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{R}/2$

$$A \frac{e^{-\kappa R}}{R} - B\kappa = -\frac{B}{a}. \quad (31)$$

Pour chaque valeur de κ , on obtient donc un système de deux équations à deux inconnues pour déterminer les coefficients A et B :

$$A \left(\frac{1}{a} - \kappa \right) + B \frac{e^{-\kappa R}}{R} = 0 \quad (32)$$

$$A \frac{e^{-\kappa R}}{R} + B \left(\frac{1}{a} - \kappa \right) = 0. \quad (33)$$

Ce système admet une solution autre que la solution triviale $(0, 0)$ si et seulement si son déterminant est nul, ce qui impose que κ soit tel que :

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{a} - \kappa & \frac{e^{-\kappa R}}{R} \\ \frac{e^{-\kappa R}}{R} & \frac{1}{a} - \kappa \end{vmatrix} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{a} - \kappa = \pm \frac{e^{-\kappa R}}{R} \quad (34)$$

ce qui se ramène aux deux équations suivantes :

$$\boxed{\kappa R - \frac{R}{a} = e^{-\kappa R} \quad \text{et donc} \quad A = B} \quad (35)$$

et

$$\boxed{\kappa R - \frac{R}{a} = -e^{-\kappa R} \quad \text{et donc} \quad A = -B} \quad (36)$$

La symétrie ou l'antisymétrie des coefficients A et B pouvait être pressentie puisque les deux particules M jouent des rôles similaires. En d'autres termes, l'hamiltonien et les conditions aux limites de Bethe–Peierls sont invariants dans le changement $r \rightarrow -r$, et on peut donc chercher les états propres de l'hamiltonien sous forme de fonctions paires ou impaires.

Ces deux solutions symétriques et antisymétriques sont très semblables aux orbitales liantes et antiliantes de la liaison chimique. Il est simple de vérifier que la valeur de κ solution de (35) est toujours supérieure à celle pour (36), ce qui entraîne que (35) correspond à l'énergie minimale $-\hbar^2 \kappa^2 / 2m$. La fonction d'onde de la particule légère (27) n'a alors pas de nœud puisque $A = B$, comme on l'on attend pour un état fondamental. Au contraire la solution de (36) conduit à $A = -B$ et la fonction d'onde (27) s'annule sur le plan médian des deux particules lourdes.

Pour progresser dans la résolution de ce problème, il est maintenant utile de séparer les trois cas $|a| = +\infty$, $a > 0$, et $a < 0$, et nous allons commencer par le cas résonnant, $|a| = +\infty$.

2-3 Le cas résonnant : $|a| = +\infty$.

Une situation particulièrement remarquable se produit dans le cas résonnant $a = \pm\infty$, pour laquelle les deux équations (35) et (36) s'écrivent :

$$\boxed{\text{solution symétrique :} \quad \kappa R = e^{-\kappa R}} \quad (37)$$

et

$$\boxed{\text{solution antisymétrique :} \quad \kappa R = -e^{-\kappa R}} \quad (38)$$

Les quantités κ et R étant toutes deux positives, seule la première de ces deux équations, qui correspond à l'orbitale liante $A = B$ dans (27), possède une solution.

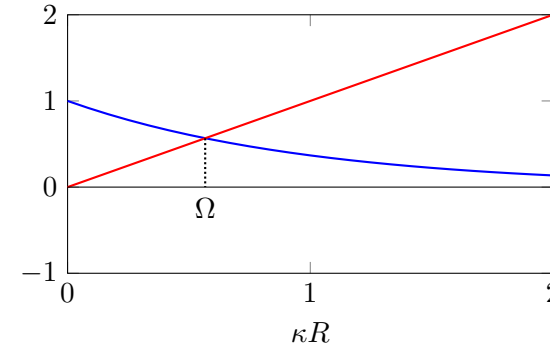


FIGURE 5. Résolution graphique de l'équation (35) dans le cas $|a| = +\infty$, c'est-à-dire $\kappa R = \exp(-\kappa R)$. On trouve une et une seule solution $\kappa R = \Omega$ avec $\Omega \approx 0.567143$.

Rappelons que l'on est alors juste au seuil d'apparition d'un état lié pour le problème à deux corps mM , quand une seule des particules lourdes est présente. En revanche, quand les deux particules lourdes sont présentes, la solution de (37) est une valeur non nulle de κ , donc un état lié de la particule légère autour des particules lourdes :

$$\boxed{a = \pm\infty : \quad \kappa = \frac{\Omega}{R} \quad \text{avec} \quad \Omega \approx 0.567} \quad (39)$$

où la constante Ω est l'unique solution de l'équation transcendante $\Omega = e^{-\Omega}$ (figure 5).

L'énergie fondamentale de la particule légère en interaction avec les deux particules lourdes est alors :

$$\boxed{a = \pm\infty : \quad E(R) = -\Omega^2 \frac{\hbar^2}{2mR^2} \quad \text{avec} \quad \Omega^2 \approx 0.322} \quad (40)$$

Quand nous interpréterons plus loin cette énergie comme un potentiel d'interaction entre les deux particules lourdes, nous disposerons ainsi de la loi en $1/R^2$ conduisant à l'invariance d'échelle mentionnée dans les chapitres précédents. Nous voyons donc comment une interaction à longue portée peut émerger à partir d'un potentiel de portée nulle.

Notons que par simple analyse dimensionnelle, on pouvait prévoir que l'énergie de l'état fondamental de la particule légère dans le cas $a = \infty$ serait proportionnelle à \hbar^2/mR^2 , puisque c'est la seule échelle d'énergie du problème. On ne pouvait néanmoins pas prévoir le signe de cette énergie et encore moins le coefficient de proportionnalité $-\Omega^2/2$.

3 Longueur de diffusion finie et problème mMM

3-1 Préliminaire : la fonction de Lambert

Dans ce qui suit, nous serons amenés à utiliser la fonction de Lambert $W(x)$ [cf. figure 6] définie comme l'unique solution $W(x)$ pour $x \geq -e^{-1}$ de l'équation

$$We^W = x. \tag{41}$$

La fonction $W \rightarrow We^W$ étant une bijection de $[-1, +\infty[$ vers $[-e^{-1}, +\infty[$, elle est inversible et il y a un seul W solution de (41) pour toute valeur de x dans l'intervalle $[-e^{-1}, +\infty[$. La fonction de Lambert est croissante et on trouve pour les petites valeurs de x :

$$|x| \ll 1 : \quad W(x) \approx x - x^2 + \mathcal{O}(x^3), \tag{42}$$

Dans le régime opposé des grandes valeurs de x , on a

$$x \gg 1; \quad W(x) \approx \ln x, \tag{43}$$

à des corrections logarithmiques près. Signalons enfin un point particulier que nous avons déjà rencontré en §2-3; il s'agit de $\Omega \equiv W(1) = 0.567 \dots$, c'est-à-dire la solution de $\Omega e^\Omega = 1$.

3-2 Cas d'une longueur de diffusion $a > 0$

Nous nous intéressons maintenant à la situation où un état lié à deux corps mM existe. Nous retrouvons cet état lié en prenant la limite $R \rightarrow \infty$ dans (34), qui conduit à $\kappa = 1/a$: la particule légère se lie à une des deux particules lourdes pour former un dimère mM d'énergie $-\hbar^2/2ma^2$. La question est maintenant de voir si on peut obtenir un abaissement de

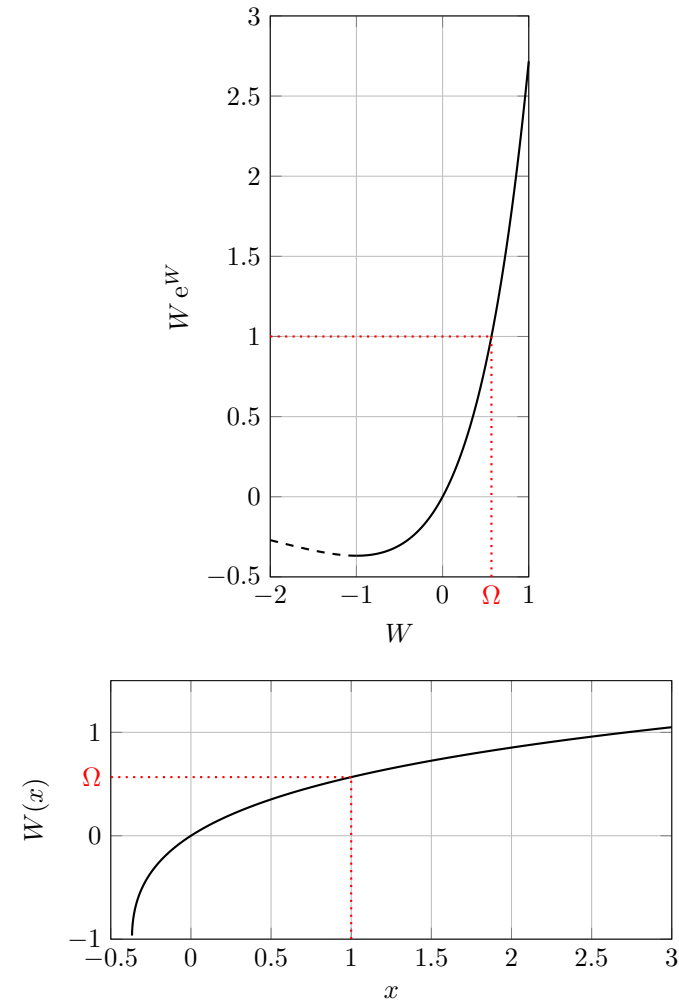


FIGURE 6. Haut : fonction $W \rightarrow We^W$. Bas : la fonction de Lambert $W(x)$ est l'inverse de la fonction tracée en haut, définie sur le domaine $x > -e^{-1}$.

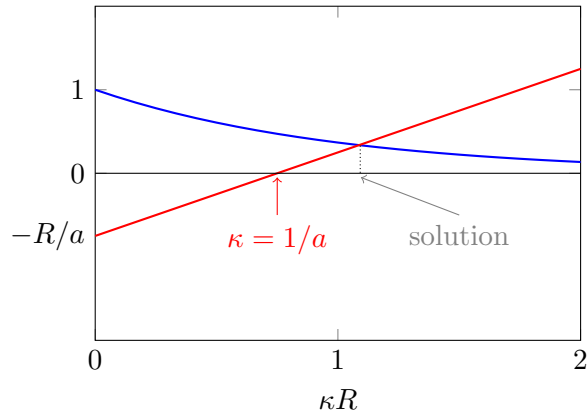


FIGURE 7. Résolution graphique de l'équation (44) dans le cas $a > 0$ pour l'orbitale liante, c'est-à-dire $x - x_0 = e^{-x}$ avec $x = \kappa R$ et $x_0 = R/a$. On trouve une et une seule solution avec $\kappa > 1/a$ pour toute valeur de R .

l'énergie de cet état lié, c'est-à-dire une augmentation de κ , quand les deux particules lourdes se rapprochent l'une de l'autre.

L'orbitale liante. Cette solution est associée au nombre d'onde κ solution de (35), que nous reproduisons ici :

$$\kappa R - \frac{R}{a} = e^{-\kappa R}. \quad (44)$$

Pour une valeur donnée de R/a , la résolution de cette équation transcendante avec l'inconnue κR peut se faire de manière graphique et on trouve immédiatement qu'il y a toujours une et une seule solution (figure 7). Ce choix conduit à la fonction d'onde symétrique $A = B$ en (27).

Cette solution peut s'écrire formellement en terme de la fonction de Lambert introduite en §3-1. Pour cela, écrivons (44) sous la forme

$$\left(\kappa - \frac{1}{a}\right) R = e^{-\kappa R} = e^{-(\kappa - \frac{1}{a})R} e^{-R/a}, \quad (45)$$

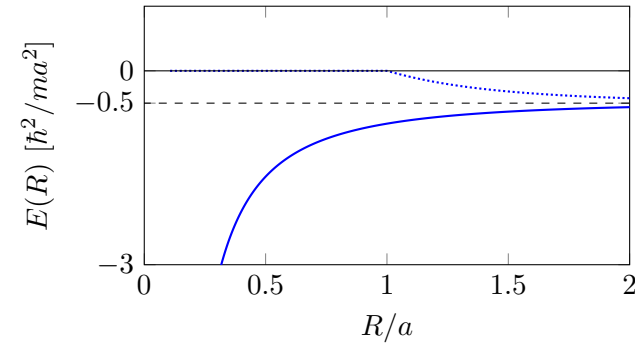


FIGURE 8. Pour $a > 0$, variation de l'énergie $E(R)$ de la particule légère (en unités de \hbar^2/ma^2) en fonction de la distance R (en unités de a) entre les deux particules lourdes. Pour l'orbitale liante [$A = B$ dans (27) et solution de (44)], l'énergie représentée en trait continu est abaissée en tout point R par rapport à l'énergie du dimère mM , donnée par $-\hbar^2/2ma^2$. Pour l'orbitale antiliante [$A = -B$ dans (27) et solution de (51)], l'énergie représentée par un trait pointillé est une fonction décroissante de R à partir de $R > a$ et ne peut pas conduire à la formation d'un édifice à trois corps stable.

ou encore

$$We^W = e^{-R/a} \quad \text{avec} \quad W = \left(\kappa - \frac{1}{a}\right) R, \quad (46)$$

ce qui conduit à :

$$a > 0, \text{ orbitale liante : } \kappa(R) = \frac{1}{a} + \frac{W(e^{-R/a})}{R} \quad (47)$$

L'énergie correspondante $E(R) = -\hbar^2 \kappa^2(R)/2m$ pour le système mMM est tracée en trait continu sur la figure 8. Elle est toujours plus basse que l'énergie $-\hbar^2/2ma^2$ du dimère mM et cela d'autant plus que R est petit. Cela suggère que l'échange de la particule légère entre les deux particules lourdes permet de stabiliser le système à trois corps, nous y reviendrons en détail plus tard.

Aux grandes distances $R \gg a$, on peut utiliser le développement

$W(x) \sim x$ pour $x \ll 1$, qui conduit à :

$$R \gg a : \quad \kappa \approx \frac{1}{a} + \frac{e^{-R/a}}{R} \quad (48)$$

et donc à l'énergie

$$R \gg a > 0, \text{ orbitale liante : } \quad E(R) \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2}{ma} \frac{e^{-R/a}}{R} \quad (49)$$

ce qui correspond à un potentiel de Yukawa de portée a .

Dans la limite $R \ll a$, on peut négliger le terme en $1/a$ dans (44) devant le terme en $1/R$ ($e^{-\kappa R}$ est d'ordre 1 dans ce cas) et on se retrouve dans la situation (37), ce qui conduit à :

$$R \ll a : \quad \kappa \approx \frac{\Omega}{R}, \quad E(R) \approx -\Omega^2 \frac{\hbar^2}{2mR^2}, \quad \Omega^2 \approx 0.322. \quad (50)$$

L'invariance d'échelle associée au potentiel en $-1/R^2$ ne sera toutefois pas exacte, puisque ce potentiel ne s'étend pas jusqu'à l'infini.

L'orbitale antiliante. Considérons maintenant l'équation (36), conduisant à la solution $A = -B$, c'est-à-dire une orbitale antiliante avec une fonction d'onde pour la particule légère qui s'annule sur le plan médian des deux atomes lourds.

On doit donc résoudre

$$\kappa R - \frac{R}{a} = -e^{-\kappa R}. \quad (51)$$

Cette équation admet une solution si et seulement si $R/a > 1$, et la valeur de κ obtenue est toujours inférieure à $1/a$ (figure 9). En d'autres termes, l'énergie de liaison à trois corps $-\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ est moins grande (en valeur absolue) que l'énergie de liaison $-\hbar^2 / 2ma^2$ du dimère mM seul. L'énergie du système sera donc minimisée en éloignant les deux particules lourdes l'une de l'autre ($R \rightarrow \infty$), ce qui n'est pas favorable à la formation d'un trimère mMM (figure 8, courbe pointillée).

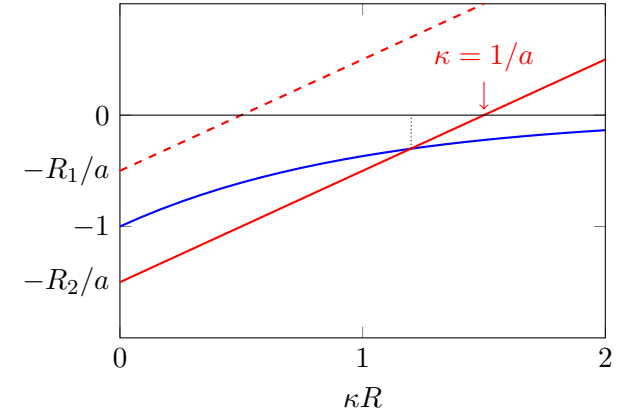


FIGURE 9. Résolution graphique de l'équation (44) dans le cas $a > 0$ pour l'orbitale antiliante, c'est-à-dire $x - x_0 = -e^{-x}$ avec $x = \kappa R$ et $x_0 = R/a$. On a pris deux valeurs de R , $R_1 < a$ et $R_2 > a$. On trouve une solution pour R_2 (droite en trait continu), mais pas pour R_1 (droite tiretée).

Quand cette solution existe, on peut là aussi l'exprimer à partir de la fonction de Lambert :

$$R > a > 0, \text{ orbitale antiliante : } \quad \kappa(R) = \frac{1}{a} + \frac{W(-e^{-R/a})}{R} \quad (52)$$

qui est définie quand son argument est plus grand que $-e^{-1}$, donc pour $R > a$. On en déduit l'énergie à grande distance :

$$R \gg a > 0, \text{ orbitale antiliante : } \quad E(R) \approx -\frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2}{ma} \frac{e^{-R/a}}{R} \quad (53)$$

3-3 Cas d'une longueur de diffusion $a < 0$

Dans ce cas, il n'y a pas d'état lié pour le dimère mM : l'attraction entre M et m n'est pas suffisamment forte pour lier les deux particules. En revanche, si R est suffisamment petit, plus précisément si $R < |a|$, la résolution graphique de la figure 10 montre qu'il y a une solution $\kappa > 0$ à

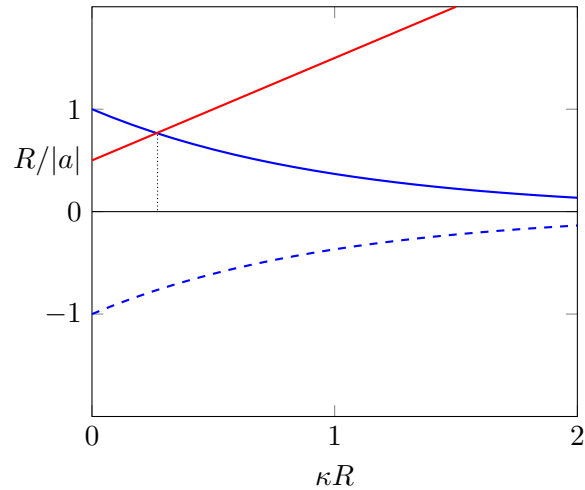


FIGURE 10. Résolution graphique de l'équation (54) dans le cas $a < 0$, c'est-à-dire $x + x_0 = e^{-x}$ pour l'orbitale liante, et $x + x_0 = -e^{-x}$ pour l'orbitale antiliante ($x = \kappa R$, $x_0 = R/|a|$). La solution pour l'orbitale liante n'existe que si $R/|a| < 1$. Il n'y a jamais de solution pour l'orbitale antiliante.

l'équation (35) pour l'orbitale liante, que nous réécrivons ici en prenant en compte le fait que a est négative :

$$\kappa R + \frac{R}{|a|} = e^{-\kappa R}. \quad (54)$$

L'énergie fondamentale de la particule légère est donc négative dans le cas $R < |a|$ (figure 11). Elle croît avec R jusqu'au point $R = |a|$, et elle s'annule à partir de ce point. Le potentiel d'interaction est attractif (à support borné), et cela ouvre la possibilité qu'un ou plusieurs états liés du système à trois corps mMM puissent exister dans ce cas, comme nous le verrons au chapitre suivant.

La résolution de (54) peut toujours se faire à l'aide de la fonction de

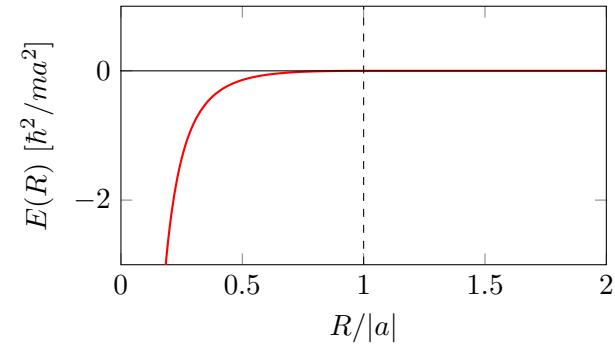


FIGURE 11. Pour $a < 0$, variation de l'énergie $E(R)$ de la particule légère (en unités de \hbar^2/ma^2) en fonction de la distance R (en unités de a) entre les deux particules lourdes. On rappelle que dans ce cas $a < 0$, le dimère mM n'est pas lié et l'énergie du système mM est toujours positive. L'énergie de l'état fondamental de la particule légère dans le système MMm est négative pour $R < |a|$, et nulle au delà.

Lambert et on trouve :

$$a < 0, R < |a|, \text{ orbitale liante : } \quad \kappa = -\frac{1}{|a|} + \frac{W(e^{R/|a|})}{R} \quad (55)$$

On s'intéresse à des solutions avec $\kappa > 0$ pour que la fonction d'onde (27) tende vers 0 à l'infini. Il faut donc que

$$W(e^{R/|a|}) > \frac{R}{|a|} \quad (56)$$

ce qui permet de retrouver le critère $R < |a|$ (on a en effet $W(e) = 1$).

Notons pour terminer que l'équation (36) déterminant la valeur de κ pour l'orbitale antiliante n'a pas de solution pour $a < 0$, puisque les deux membres de gauche devraient être positifs alors que le membre de droite est négatif dans ce cas.

4 Généralisation au problème à N corps

La modélisation des interactions binaires mM par la condition aux limites de Bethe–Peierls est formellement très simple et elle se prête bien à une généralisation où l'on augmente le nombre de particules légères et/ou de particules lourdes. Nous allons en donner quelques exemples (sans souci d'exhaustivité) dans les paragraphes qui suivent.

4-1 Peut-on lier l'édifice à quatre corps $mmMM$?

Pour commencer notre étude à plus de trois corps, supposons que l'on dispose de deux particules légères identiques, n'interagissant pas entre elles. Ces particules évoluent autour des particules lourdes, toujours supposées immobiles en $\pm R$. On se pose la question de la stabilité de cet édifice : son énergie s'abaisse-t-elle quand on approche les particules lourdes depuis $R = \infty$? Cette question est équivalente, pour une interaction en pseudo-potentiel, à celle de la formation de la molécule H_2 , dans un état singulet ou triplet, avec les deux protons dans le rôle des particules lourdes et les deux électrons dans le rôle des particules légères.

Cette question n'est pertinente que si les particules m sont fermioniques. S'il s'agit de bosons, on peut bien sûr en accumuler autant qu'on veut dans l'orbitale liante et obtenir un édifice dont l'énergie croît avec R ; on peut alors espérer former un état lié, au moins en absence de potentiel répulsif à courte portée entre les particules lourdes.

Si les particules m sont des fermions de spin $1/2$, on peut placer deux particules sur l'orbitale liante si l'état de spin total est un état singulet, et obtenir l'énergie $2E(R)$, où $E(R) = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ avec κ donné en (47) ou en (55). Là encore, on fabrique un état $mmMM$ dont l'énergie croît avec R , et qui donc va tendre à former un état lié.

Le cas où les particules légères sont des fermions polarisés est moins évident. Il faut alors disposer une particule légère sur l'orbitale liante et l'autre sur l'orbitale anti-liante, ce qui nécessite bien sûr que celle-ci existe. Cette condition exclut d'emblée la situation $a < 0$ et $a = \infty$. Dans le cas

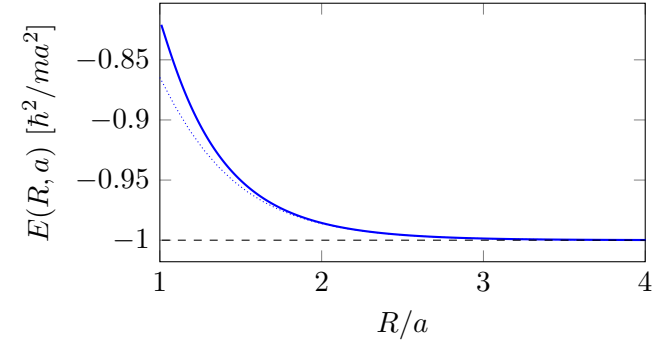


FIGURE 12. Énergie du système $mmMM$ quand on place les deux particules légères sur les deux orbitales liante et antiliante. Les particules lourdes M sont supposées fixes et séparées par une distance R . Le calcul est fait pour $0 < a < R$, condition nécessaire pour que l'orbitale antiliante existe.

$a > 0$, il faut se placer dans la situation $R > a$ et l'énergie obtenue s'écrit

$$R > a : \quad E_{\text{tot}}(R) = E_+(R) + E_-(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\kappa_+^2 + \kappa_-^2) \quad (57)$$

avec

$$\kappa_{\pm}(R) = \frac{1}{a} + \frac{W(\pm e^{-R/a})}{R}. \quad (58)$$

Cette énergie est tracée sur la figure 12. C'est une fonction décroissante de R , ce qui indique que l'édifice $mmMM$ n'est pas lié. Il va tendre à se séparer en deux dimères mM qui sont quant à eux bien liés, puisque nous avons considéré le cas $a > 0$.

Nous pouvons trouver une expression asymptotique de $E_{\text{tot}}(R)$ pour $R \gg 1$ en utilisant le développement (42) de la fonction de Lambert :

$$\kappa_{\pm}(R) \approx \frac{1}{a} \pm \frac{e^{-R/a}}{R} - \frac{e^{-2R/a}}{R}. \quad (59)$$

Cela donne pour $E_{\text{tot}}(R)$ définie en (57) :

$$R > a > 0 : \quad E_{\text{tot}}(R) \approx -\frac{\hbar^2}{ma^2} + \frac{2\hbar^2}{maR} \left(1 - \frac{a}{2R}\right) e^{-2R/a} \quad (60)$$

qui est une fonction décroissante de R et qui conduit bien à une dissociation en deux dimères. Cette énergie est tracée en pointillé sur la figure 12 et elle donne effectivement une bonne approximation du résultat exact dès que $R \gtrsim 1.5a$. Ce résultat est un cas particulier de celui dérivé pour N particules lourdes et N particules légères par PETROV, ASTRAKHARCHIK et al. (2007) (voir § 4-4).

4-2 Deux particules lourdes et N particules légères

Dans ce paragraphe, nous considérons l'extension de la procédure développée précédemment au cas où les deux particules lourdes sont plongées dans un bain de particules légères. Nous supposons que ces particules légères sont des fermions polarisés, et qu'elles sont préparées à température nulle. Nous souhaitons déterminer le type d'interaction médiée par le bain qui apparaît entre les deux particules lourdes.

De manière générale, une particule lourde placée dans un bain de particules légères (bosoniques ou fermioniques) forme un polaron (voir SCAZZA, ZACCANTI et al. (2022) pour une revue récente). Le problème qui nous intéresse ici peut donc être formulé en termes d'interaction polaron-polaron, dans le cas simple d'un bain de fermions sans interaction. On pourra consulter FUJII, HONGO et al. (2022) et ses références pour la discussion d'un bain superfluide, donc composé de particules en interaction.

Pour résoudre le problème qui nous intéresse, à savoir l'état à température nulle du bain de fermions polarisés, il faut déterminer les N premiers niveaux d'énergie des particules légères du fait de la présence des particules lourdes en $\pm R/2$. Ce problème a été traité par NISHIDA (2009) et nous suivons ici sa démarche, qui est directement inspirée de l'approche de BETH & UHLENBECK (1937) pour calculer le deuxième coefficient du viriel (cours 2021-22, chapitre 1).

Les états accessibles aux particules légères sont de deux types :

- État(s) discret(s) d'énergie négative : on sait qu'il y en a un ou deux dans le cas $a > 0$ (selon la valeur du rapport R/a) et un seul pour $a < 0$ ou $a = \infty$. Nous connaissons déjà ces états, obtenus par résolution de (35-36).
- États du continuum : ces états ont une énergie positive, ils occupent

l'ensemble de l'espace, et leur fonction d'onde est "distordue" par la présence des particules lourdes.

Puisque nous connaissons déjà les deux états discrets, intéressons-nous maintenant aux états du continuum. Ce sont des solutions de

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi \quad \Leftrightarrow \quad \nabla^2\psi + k^2\psi = 0 \quad \text{avec} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (61)$$

On s'intéresse aux solutions régulières en tout point sauf en $r = \pm R/2$ et qui satisfont en ces deux points la condition de Bethe–Peierls.

États de diffusion pour un centre unique. Rappelons tout d'abord ce qui est attendu pour un seul centre diffuseur décrit par la condition de Bethe–Peierls et placé en $r = 0$. On sait que la diffusion ne se produit qu'en onde s et que les autres ondes partielles ne sont pas affectées par le centre diffuseur. Pour tout vecteur d'onde incident \mathbf{k} , l'état stationnaire de diffusion est de la forme

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(k)\frac{e^{ikr}}{r}, \quad (62)$$

ce qui donne après projection sur l'onde s (c'est-à-dire moyenne sur les angles en coordonnées sphériques θ, φ) :

$$\bar{\psi}_{\mathbf{k}}(r) = \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{2ikr} + f(k)\frac{e^{ikr}}{r}, \quad (63)$$

ou encore

$$\bar{\psi}_{\mathbf{k}}(r) = -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} + \frac{e^{ikr}}{2ikr} e^{2i\delta(k)} \quad (64)$$

où l'on a introduit le déphasage $\delta(k)$ pour la diffusion en onde s

$$f(k) = \frac{1}{2ik} \left(e^{2i\delta(k)} - 1 \right) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{f(k)} = \frac{k}{\tan \delta(k)} - ik. \quad (65)$$

La forme (64) peut encore s'écrire, à un facteur global $e^{i\delta(k)}$ près, sans importance ici :

$$\bar{\psi}_{\mathbf{k}}(r) = \frac{\sin [kr + \delta(k)]}{kr}. \quad (66)$$

États de diffusion pour deux centres. Dans le cas de la diffusion par deux centres du pseudo-potentiel localisés en $+\mathbf{R}/2$ et $-\mathbf{R}/2$ (c'est-à-dire les deux particules M supposées fixes), on peut donc chercher les états stationnaires de diffusion sous la forme :

$$\psi_{\mathbf{k},\pm}(\mathbf{r}) = \frac{\sin[k|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2| + \delta_{\pm}(k)]}{k|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} \pm \frac{\sin[k|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2| + \delta_{\pm}(k)]}{k|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} \quad (67)$$

L'indice \pm désigne ici la symétrie de chaque état par échange des centres : $\mathbf{R}/2 \leftrightarrow -\mathbf{R}/2$. En effet, comme en §2, on peut chercher les états propres de l'hamiltonien sous forme de fonctions paires ou impaires de \mathbf{r} , étant entendu que le déphasage pour un état pair, $\delta_+(k)$ (le même pour chacun des deux centres diffuseurs), est *a priori* différent du déphasage pour un état impair, $\delta_-(k)$ (là aussi le même pour chaque centre diffuseur).

La condition de Bethe–Peierls impose :

$$-\frac{1}{ka} \sin[\delta_{\pm}(k)] = \cos[\delta_{\pm}(k)] \pm \frac{\sin[kR + \delta_{\pm}(k)]}{kR} \quad (68)$$

qui se résout en

$$\tan[\delta_{\pm}(k)] = -\frac{kR \pm \sin(kR)}{\frac{R}{a} \pm \cos(kR)}. \quad (69)$$

Pour évaluer la modification apportée par les particules lourdes à la densité d'états pour la particule légère, supposons que celle-ci est contenue dans une grande sphère de rayon $R_0 \gg R$, et que sa fonction d'onde $\psi_{\mathbf{k},\pm}(\mathbf{r})$ doit s'annuler sur les parois de cette sphère. Utilisons le développement suivant dans l'argument des sinus intervenant dans (67)

$$r \gg R : \quad |\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2| \approx r \pm \frac{1}{2}R \cos \theta \quad (70)$$

où θ est l'angle entre \mathbf{r} et \mathbf{R} , et prenons plus simplement $|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2| \approx r$ au dénominateur de (67). On trouve alors que la condition d'annulation de $\psi_{\mathbf{k},\pm}(\mathbf{r})$ en $r = R_0$ est satisfaite pour tout θ si et seulement si :

$$\sin[kR_0 + \delta_+(k)] = 0 \quad \text{ou} \quad \cos[kR_0 + \delta_-(k)] = 0 \quad (71)$$

soit deux ensembles de valeurs possibles pour k :

$$k_{n,+}R_0 + \delta_{n,+} = n\pi \quad k_{n,-}R_0 + \delta_{n,-} = (n + 1/2)\pi \quad (72)$$

Rappelons par ailleurs qu'en l'absence de potentiel diffuseur, les conditions de quantification dans une sphère de rayon R_0 s'écrivent $k_n R_0 = n\pi$ [resp. $k_n R_0 = (n + 1/2)\pi$] pour les ondes de moment cinétique ℓ pair [resp. impair].

Énergie de Fermi pour les particules légères. Nous étudions maintenant l'énergie nécessaire pour remplir tous les niveaux d'énergie des particules légères jusqu'à une valeur donnée $\mu = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. Le changement d'énergie lié à la présence des deux centres diffuseurs s'écrit donc :

$$\Delta E(R) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\kappa_+^2 + \kappa_-^2) + \frac{\hbar^2}{2m} \sum^{k_F} (k_{n,+}^2 + k_{n,-}^2) - (k_{n,+}^2 + k_{n,-}^2)_0 \quad (73)$$

En utilisant

$$k_{n,+}^2 = \frac{1}{R_0^2} (n\pi - \delta_{n,+})^2 \approx \left(\frac{n\pi}{R_0}\right)^2 - \frac{2n\pi}{R_0^2} \delta_{n,+} \quad (74)$$

on peut écrire ce changement d'énergie comme :

$$\Delta E(R) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\kappa_+^2 + \kappa_-^2) - \frac{\hbar^2}{m\pi} \int_0^{k_F} k [\delta_+(k) + \delta_-(k)] dk. \quad (75)$$

L'énergie d'interaction entre les deux particules lourdes vaut alors

$$V(R) = \Delta E(R) - \Delta E(+\infty) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} v(k_F R) \quad (76)$$

où la quantité sans dimension $v(k_F R)$ caractérise les propriétés physique du problème. Cette quantité, elle-même dépendant du paramètre sans dimension $k_F a$, est tracée en figure 13, extraite de NISHIDA (2009) et elle présente les caractéristiques suivantes :

- Dans le régime unitaire $a = \infty$, l'invariance d'échelle du problème à trois corps est brisée puisque le bain fermionique amène son échelle de longueur k_F^{-1} . On voit sur la figure 13 que $v(k_F R)$ présente des oscillations amorties avec cette échelle de longueur caractéristique.
- Dans le régime des valeurs positives et relativement faibles de a ($k_F a < 1$), le bain fermionique crée un potentiel répulsif assimilable à un cœur dur en $r \approx a$.

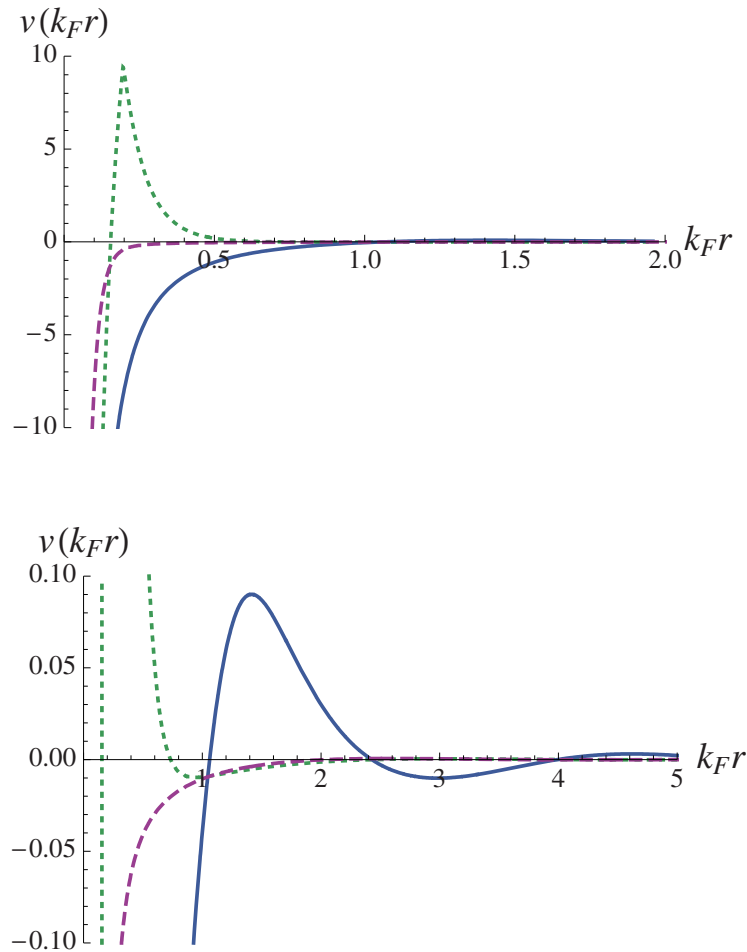


FIGURE 13. Energie d'interaction effective $v(k_F R)$ entre deux particules lourdes plongées dans un bain de particules fermioniques polarisées. Trait tireté : $(ak_F)^{-1} = -5$, trait plein : régime unitaire $(ak_F)^{-1} = 0$, trait pointillé : $(ak_F)^{-1} = 5$. La figure du bas est un agrandissement de la figure supérieure. Figures extraites de NISHIDA (2009).

— Dans le régime des valeurs négatives et relativement faibles de a ($k_F |a| < 1$), le bain crée un potentiel essentiellement attractif, qui prend des valeurs significatives pour $r \lesssim |a|$. Dans la limite $a \rightarrow 0_-$, NISHIDA (2009) montre que l'on retrouve le potentiel RKKY (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) entre deux impuretés magnétiques dans un liquide de Fermi.

Cette étude de NISHIDA (2009) a récemment été reprise par SUN & CUI (2019) avec en ligne de mire le cas d'impuretés ^{133}Cs plongées dans un bain de ^6Li . Nous aurons l'occasion de revenir sur ce mélange dans le chapitre suivant.

4-3 N particules lourdes et 1 particule légère

Le cas $mMM \cdots M$ est également une généralisation directe du formalisme que nous avons mis en place dans la section 2. On considère N particules de grande masse, immobiles aux points $\mathbf{R}_1, \cdots, \mathbf{R}_N$. Une particule légère, de masse m , évolue au sein de cet ensemble de centres diffuseurs et on cherche les états liés possibles de cette particule. Un exemple possible, étudié par CHRISTIANEN, CIRAC et al. (2022), est celui d'un atome de ^6Li bougeant dans une assemblée d'atomes de ^{133}Cs .

La fonction d'onde de la particule légère associée à une énergie E négative (donc un état lié) peut être cherchée sous la forme

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N A_j \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|}, \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}. \quad (77)$$

Cette fonction d'onde est une généralisation directe de la fonction d'onde (27) utilisée dans le cas $N = 2$. En dehors des points $\mathbf{r} = \mathbf{R}_j$, c'est une solution de l'équation de Schrödinger pour une particule libre d'énergie négative, $\nabla^2 \psi = \kappa^2 \psi$ et il faut maintenant imposer que la condition aux limites de Bethe–Peierls est satisfaite aux N points \mathbf{R}_j .

Prenons un point \mathbf{R}_i parmi les N possibles. Le terme en $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^{-1}$ qui émerge dans (77) quand on prend la limite $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_i$ est :

$$\text{terme en } |\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^{-1} : \quad A_i \quad (78)$$

De même, le terme en $|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^0$ dans cette limite $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_i$ est

$$\text{terme en } |\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^0 : \quad -\kappa A_i + \sum_{j \neq i} A_j \frac{e^{-\kappa R_{ij}}}{R_{ij}} \quad (79)$$

La condition de Bethe-Peierls exprime que ces deux termes doivent être dans un rapport $-1/a$, ce qui s'écrit :

$$-\frac{1}{a} A_i = -\kappa A_i + \sum_{j \neq i} A_j \frac{e^{-\kappa R_{ij}}}{R_{ij}}. \quad (80)$$

Cette condition doit être vérifiée pour tous les indices $i = 1, \dots, N$, ce qui signifie que les coefficients A_i doivent satisfaire un système de N équations à N inconnues :

$$[\mathcal{M}][A_i] = 0 \quad (81)$$

où $[\mathcal{M}]$ désigne la matrice $N \times N$ définie par :

$$\boxed{\mathcal{M}_{ii} = \frac{1}{a} - \kappa \quad i \neq j : \quad \mathcal{M}_{ij} = \frac{e^{-\kappa R_{ij}}}{R_{ij}}} \quad (82)$$

Pour que la solution de ce système soit autre que la solution nulle $A_i = 0$ pour tout i , il faut que le déterminant de la matrice $[\mathcal{M}]$ soit nul :

$$\boxed{\det[\mathcal{M}] = 0} \quad (83)$$

ce qui fournit, pour un jeu de positions \mathbf{R}_j données, une série de valeurs positive possibles pour κ , et donc une série d'états liés possibles pour la particule légère.

4-4 Système dilué : le potentiel binaire retrouvé

Nous poursuivons notre étude du cas $mMM \cdots M$ et nous nous plaçons dans ce paragraphe dans le cas $a > 0$, c'est-à-dire quand il existe un état lié entre la particule légère et une particule lourde. Nous supposons de plus que le gaz de particules lourdes est dilué, avec une distance moyenne entre particules lourdes grande devant a . Ce cas a été étudié en détail par

PETROV, ASTRAKHARCHIK et al. (2007) et nous allons suivre ici leur démarche.

Si les particules lourdes sont infiniment loin les unes des autres, le niveau fondamental de la particule légère est N fois dégénéré et il a pour énergie $E_0 = -\hbar^2/2ma^2$, c'est-à-dire $\kappa = 1/a$. La particule légère peut en effet se lier à une des N particules lourdes, sans que les $N - 1$ particules restantes ne jouent un rôle.

Prenons maintenant en compte de manière perturbative le couplage possible entre les effets de ces particules lourdes. La dégénérescence d'ordre N du niveau d'énergie E_0 va être levée et on va obtenir une série de N états d'énergie autour E_0 . Introduisons $x \equiv \frac{1}{a} - \kappa$ que nous allons traiter comme un petit paramètre. Cette variable apparaît directement sur les N coefficients diagonaux de la matrice $[\mathcal{M}]$. Par ailleurs, les coefficients non diagonaux de cette matrice peuvent se développer sous la forme

$$i \neq j : \quad \mathcal{M}_{ij} = \frac{e^{-\kappa R_{ij}}}{R_{ij}} \approx G_{ij} + x H_{ij}, \quad (84)$$

où l'on a posé

$$G_{ij} = \frac{e^{-R_{ij}/a}}{R_{ij}}, \quad H_{ij} = e^{-R_{ij}/a}. \quad (85)$$

Ces coefficients G_{ij} et H_{ij} sont exponentiellement petits quand la distance moyenne entre particules lourdes devient grande devant a . Le déterminant de la matrice $[\mathcal{M}]$ peut donc se développer comme un polynôme vis-à-vis de la variable x dans lequel on ne va garder que les termes dominants, en utilisant $G_{ij}, H_{ij} \ll x \ll 1$:

$$0 = \det[\mathcal{M}] = \begin{vmatrix} x & \cdots & G_{ij} + xH_{ij} & \cdots \\ \vdots & x & \vdots & \vdots \\ \cdots & G_{ij} + xH_{ij} & \cdots & x \end{vmatrix} \quad (86)$$

$$\approx x^N - \frac{1}{2} x^{N-2} \sum'_{i,j} (G_{ij} + xH_{ij})^2 \quad (87)$$

$$\approx x^N - x^{N-1} \sum'_{i,j} G_{ij} H_{ij} - \frac{1}{2} x^{N-2} \sum'_{i,j} G_{ij}^2 \quad (88)$$

où les sommes portent sur toutes les paires (i, j) en excluant le cas $i = j$ (c'est le sens du symbole $'$ sur le signe somme). Le facteur $\frac{1}{2}$ évite le double comptage de (i, j) et (j, i) . Les termes négligés¹ font intervenir des puissances supérieures des $e^{-R_{ij}/a}$. On obtient ainsi N valeurs de x , donc de κ , que nous noterons x_α et κ_α ($\alpha = 1, \dots, N$).

Supposons maintenant que l'on dispose de N particules légères, traitées comme des fermions polarisés, soit $m \cdots mM \cdots M$. L'état fondamental du système à $N + N$ particules s'obtient en disposant les N particules légères sur les N états que nous venons d'identifier, et on s'intéresse à l'énergie de cet état fondamental :

$$E = - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2 \kappa_\alpha^2}{2m} = - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{a^2} - \frac{2}{a} \sum_{\alpha} x_\alpha + \sum_{\alpha} x_\alpha^2 \right) \quad (89)$$

Cette quantité peut être évaluée à partir des relations bien connues donnant les sommes des racines d'un polynôme de degré N . À partir de (88), on trouve :

$$\sum_{\alpha} x_\alpha = \sum'_{i,j} G_{ij} H_{ij} \quad \sum'_{\alpha,\beta} x_\alpha x_\beta = - \sum'_{i,j} G_{ij}^2 \quad (90)$$

dont on déduit

$$\sum_{\alpha} x_\alpha^2 = \sum'_{i,j} G_{ij}^2 + \left(\sum'_{i,j} G_{ij} H_{ij} \right)^2 \quad (91)$$

où le second terme du membre de droite est exponentiellement petit devant le premier.

On arrive alors à l'énergie de l'état fondamental des N particules légères :

$$E \approx E_0 + \frac{1}{2} \sum'_{i,j} U(R_{ij}) \quad \text{avec} \quad E_0 = -N \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (92)$$

où le potentiel binaire $U(R)$ est identique à celui apparaissant en (60) :

$$U(R) = \frac{2\hbar^2}{maR} \left(1 - \frac{a}{2R} \right) e^{-2R/a} \quad (93)$$

1. On néglige en particulier des termes en $e^{-R_{ij}/a} e^{-R_{jk}/a}$ qui ne sont significatifs que si les trois particules lourdes i, j, k sont dans un voisinage de taille a .

Il s'agit d'un potentiel répulsif entre les particules lourdes, l'énergie étant minimisée en plaçant infiniment loin les un des autres les dimères mM .

En conclusion, si le cas $mM \cdots M$ peut donner naissance à un état lié collectif en abaissant l'énergie par rapport à mM (avec les $N - 1$ autres particules M immobiles à l'infini), ce n'est pas le cas si on cherche à mettre autant de particules légères que de particules lourdes. Le principe de Pauli oblige en effet à placer certaines des particules m sur des orbitales anti-liantes, ce qui déstabilise l'édifice $N + N$. Une question intéressante, mais qui dépasse le cadre de ce cours, porte sur le cas général $N'_m + N_M$, abordée par exemple par GIVOIS, TONONI et al. (2022) qui prévoient dans un modèle à une dimension, la formation d'ondes de densité.

Références

- BETH, Erich & George E UHLENBECK (1937), « The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures », in *Physica* **4**, p. 915-924.
- CHRISTIANEN, Arthur, J Ignacio CIRAC & Richard SCHMIDT (2022), « Chemistry of a light impurity in a Bose-Einstein condensate », in *Physical Review Letters* **128**, p. 183401.
- EFIMOV, V. (1973), « Energy levels of three resonantly interacting particles », in *Nuclear Physics A* **210**, p. 157-188.
- FONSECA, Antonio C., Edward F. REDISH & P.E. SHANLEY (1979), « Efimov effect in an analytically solvable model », in *Nuclear Physics A* **320**, p. 273-288.
- FUJII, Keisuke, Masaru HONGO & Tilman ENSS (2022), « Universal van der Waals Force Between Heavy Polarons in Superfluids », in *Phys. Rev. Lett.* **129**, p. 233401.
- GIVOIS, J, A TONONI & DS PETROV (2022), « Self-binding of one-dimensional fermionic mixtures with zero-range interspecies attraction », in *arXiv preprint arXiv :2207.04742*.
- NISHIDA, Yusuke (2009), « Casimir interaction among heavy fermions in the BCS-BEC crossover », in *Physical Review A* **79**, p. 013629.
- PETROV, DS, GE ASTRAKHARCHIK, DJ PAPOULAR, C SALOMON & GV SHLYAPNIKOV (2007), « Crystalline phase of strongly interacting Fermi mixtures », in *Physical Review Letters* **99**, p. 130407.
- SCAZZA, Francesco, Matteo ZACCANTI, Pietro MASSIGNAN, Meera M. PARISH & Jesper LEVINSSEN (2022), « Repulsive Fermi and Bose Polarons in Quantum Gases », in *Atoms* **10**, p. 55.
- SUN, Mingyuan & Xiaoling CUI (2019), « Efimov physics in the presence of a Fermi sea », in *Physical Review A* **99**, p. 060701.
- YAMAGUCHI, Yoshio (1954), « Two-Nucleon Problem When the Potential Is Nonlocal but Separable. I », in *Phys. Rev.* **95**, p. 1628-1634.