

Les interactions dans les gaz d'atomes froids (III)

Le problème à trois corps et l'effet Efimov

Jean Dalibard
Collège de France, chaire *Atomes et rayonnement*

Cours 2023



Table des matières

Introduction	7		
I Le potentiel en $1/r^2$ et son invariance d'échelle	11		
1 Le problème à deux corps	12		
1-1 Séparation des variables	12		
1-2 L'invariance par rotation	12		
1-3 Recherche des états liés	13		
1-4 Solution d'énergie nulle et longueur de diffusion . .	14		
2 Potentiels attractifs en loi de puissance $r^{-\beta}$	15		
2-1 Approche qualitative en terme de paquet d'ondes . .	15		
2-2 Le cas $\beta < 2$	16		
2-3 Le cas $\beta > 2$	17		
2-4 Combien y a-t-il d'états liés?	17		
3 Le potentiel $1/r^2$ en mécanique classique	18		
3-1 Mouvement classique et chute vers le centre	19		
3-2 L'interaction atome – fil chargé	20		
3-3 Les résultats de Denschlag et al	20		
4 Le potentiel en $1/r^2$ en mécanique quantique	21		
		4-1 L'invariance d'échelle	21
		4-2 Brisure de l'invariance d'échelle	22
		4-3 Potentiel adimensionné et solution d'énergie nulle . .	23
		4-4 Point critique $\alpha = -1/4$ et anomalie quantique	25
		II États stationnaires et dynamique dans un potentiel en $1/r^2$	27
		1 Les états liés du potentiel en α/r^2	28
		1-1 Absence d'état lié pour $\alpha > -1/4$	28
		1-2 L'invariance d'échelle partiellement retrouvée	29
		1-3 L'énergie de l'état fondamental	31
		2 Interaction électrostatique et potentiel en $1/r^2$	33
		2-1 L'interaction charge-dipôle	33
		2-2 Une charge peut-elle lier un dipôle?	35
		2-3 L'expérience de Desfrancois <i>et al.</i>	36
		3 Potentiel en $1/r^2$ et invariance conforme	38
		3-1 Les symétries de l'équation de Schrödinger	38
		3-2 Particule unique dans un potentiel extérieur	39
		3-3 Les générateurs associés à l'invariance conforme	40

3-4	La tour d'états propres	41	IV L'effet Efimov pour un système léger-lourd-lourd	63
3-5	Le mode de respiration	42	1 L'effet Efimov pour $a = \infty$	65
4	Le cas uni-dimensionnel	43	1-1 Le collapse de Thomas	65
4-1	Le spectre du problème à N corps	43	1-2 Le cas des bosons : onde s	66
4-2	Dynamique du système	44	1-3 Le paramètre à trois corps R_0	67
4-3	Le mouvement classique	44	1-4 Le cas des fermions polarisés : onde p	67
III	De l'interaction de contact au potentiel en $1/r^2$	45	2 Autour de la résonance : $a < 0$ ou $a > 0$	68
1	Interaction à deux corps à basse énergie	46	2-1 Le cas $a < 0$ et les états borroméens	68
1-1	Diffusion en onde s	46	2-2 Le cas $a > 0$ et la compétition dimère-trimère	71
1-2	Résonances de diffusion	47	2-3 Courbes complètes	73
1-3	Le pseudo-potentiel	48	3 Expériences sur le cas léger-lourd-lourd	75
1-4	Conditions aux limites de Bethe-Peierls	49	3-1 Expériences sur les mélanges de gaz atomiques	75
2	Force à longue portée pour le problème mMM	50	3-2 Résonance de Fano–Feshbach lithium-césium	75
2-1	Le problème à trois corps mMM	50	3-3 La formation de trimères du côté $a < 0$	76
2-2	Quels états liés pour la particule légère?	50	3-4 Discussions et prolongements	78
2-3	Le cas résonnant $ a = +\infty$	52	4 Trimères universels de Kartavtsev & Malykh	79
3	Longueur de diffusion finie et problème mMM	52	4-1 Retour sur le cas des fermions	79
3-1	Préliminaire : la fonction de Lambert	52	4-2 Approche Born–Oppenheimer	80
3-2	Cas d'une longueur de diffusion $a > 0$	53	4-3 Résultats de Kartavtsev-Malykh et prolongements	81
3-3	Cas d'une longueur de diffusion $a < 0$	55	V Le problème d'Efimov pour trois bosons identiques	85
4	Généralisation au problème à N corps	56	1 Paramétrisation de l'espace	86
4-1	Peut-on lier l'édifice à quatre corps $mmMM$?	56	1-1 Condition aux limites de Bethe–Peierls	86
4-2	Deux particules lourdes et N particules légères	57	1-2 Coordonnées de Jacobi	87
4-3	N particules lourdes et 1 particule légère	60	1-3 Composantes de Faddeev	88
4-4	Système dilué : le potentiel binaire retrouvé	60	1-4 Hyperrayon et angle de Delves	89

2	La solution dans le cas résonnant	92	1-2	Partie $a < 0$ de la résonance	108
2-1	Séparation des variables pour $a = \pm\infty$	92	1-3	Partie $a > 0$ de la résonance	110
2-2	Équation angulaire et effet Efimov	93	1-4	Lien entre les deux côtés de la résonance	111
2-3	Vérification : le cas sans interaction	94	2	Observation des principales caractéristiques	112
3	La solution dans le cas général	94	2-1	Première observation sur le césium	112
3-1	Séparation des variables angulaires et radiales	94	2-2	Connexion des régions $a < 0$ et $a > 0$	113
3-2	Les potentiels hypersphériques	95	2-3	La suite géométrique d’Efimov	114
3-3	Universalité pour le problème à trois bosons	96	2-4	Le croisement dimère - trimère	115
4	Un premier exemple : le trimère d’hélium	98	3	Le paramètre à trois corps	118
4-1	Un bon candidat : l’atome d’hélium	98	3-1	Une coïncidence surprenante?	118
4-2	Le trimère He_3 fondamental	99	3-2	Retour vers l’approche hypersphérique	119
4-3	Le trimère He_3 excité	101	3-3	Emergence d’un cœur dur en $\sim 2R_{\text{vdW}}$	120
5	Appendice : équation de Skorniakov Ter-Martirosian	102	4	Au delà de l’effet Efimov standard	122
5-1	Définition des composantes de Faddeev	102	4-1	Trois fermions identiques	122
5-2	Potentiel à un corps séparable	103	4-2	Trois particules discernables	123
5-3	Problème à trois corps et potentiels séparables	104	4-3	Quatre bosons identiques	123
			4-4	N_f fermions identiques et une autre particule	124
VI L’effet Efimov exploré avec des gaz d’atomes froids		107	Références		126
1	Le taux de recombinaison à trois corps	108			
1-1	Loi d’échelle pour le coefficient L_3	108			

Introduction

Une des toutes premières descriptions mathématiques du problème à trois corps se trouve dans les *Principia* de Newton, publiés en 1687. On connaît le succès éclatant de Newton pour la résolution du problème à deux corps de masses m_1 et m_2 en interaction gravitationnelle :

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{G m_1 m_2}{r_{12}}, \quad r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|. \quad (1)$$

Une fois la solution du problème à deux corps bien établie, Newton s'est intéressé à un système à trois corps du type Soleil-Terre-Lune représenté sur la figure 1. Ce problème, appelé "théorie lunaire", correspond à une énergie potentielle du système

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = -G \left(\frac{m_1 m_2}{r_{12}} + \frac{m_2 m_3}{r_{23}} + \frac{m_3 m_1}{r_{31}} \right). \quad (2)$$

Newton s'est notamment posé la question de la stabilité d'un tel système. Il l'a abordé en mettant en œuvre des calculs complexes fondés sur la théorie des perturbations. À son grand dépit – il en perdit l'appétit et le sommeil – Newton ne réussit pas à y apporter une réponse générale convaincante. Il écrivit d'ailleurs à un de ses amis, John Machin, qu'il n'avait jamais mal à la tête, sauf lors de ses recherches sur la théorie lunaire... (Westfall 1980).

Cette question a ensuite occupé les plus brillants mathématiciens et physiciens pendant le XVIII^{ème} et XIX^{ème} siècles : Euler, d'Alembert, Clairault, Lagrange, Laplace, Poisson, Jacobi, Cauchy... y feront des contributions notables sans le résoudre véritablement. Au tournant du XX^{ème} siècle, Poincaré identifie pour ce problème une dépendance sensible aux conditions initiales et développe des outils mathématiques désormais centraux en théorie du chaos, une branche très active de la physique et des mathématiques (Gutzwiller 1998 ; Chenciner 2014).

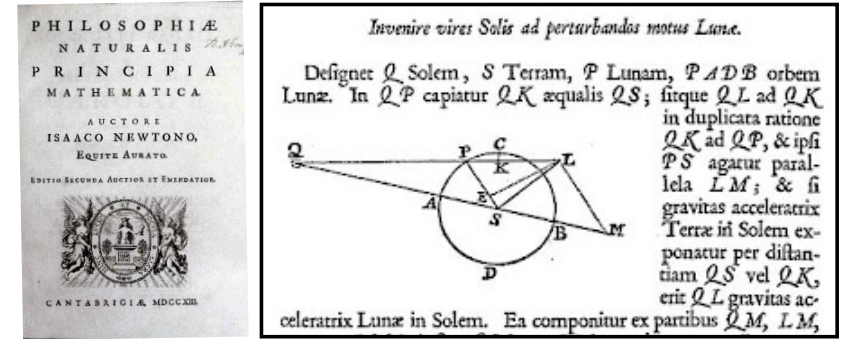


FIGURE 1. Le système soleil-terre-lune décrit par Newton dans ses *Principia*.

Dans ce cours, nous allons nous intéresser à la transposition du problème à trois corps au domaine quantique. Comme pour le problème lunaire, nous allons nous concentrer sur un système dans lequel l'énergie d'interaction peut s'écrire comme une somme de termes binaires :

$$V = V_{12} + V_{23} + V_{31}. \quad (3)$$

Toutefois, l'interaction binaire sera très différente de celle des astronomes. La loi en $1/r$ de l'attraction gravitationnelle (1) sera remplacée par une interaction à courte portée. Plus précisément, la portée b des potentiels binaires interatomiques sera supposée beaucoup plus petite que la distance moyenne entre les édifices à trois corps qui seront formés (figure 2).

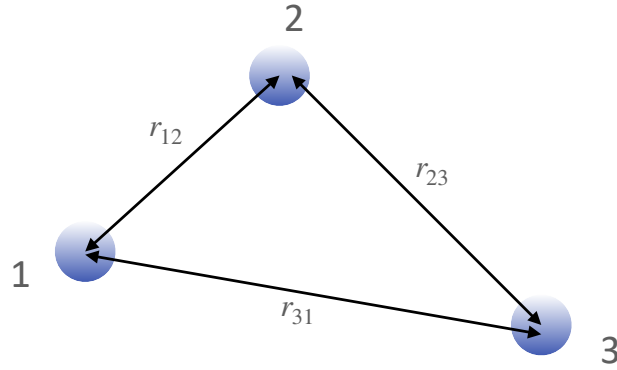


FIGURE 2. Trois corps en interaction. La taille des boules représente la portée du potentiel à deux corps, notée b . Nous nous intéresserons principalement à des situations où la distance entre particules r_{ij} est grande devant b .

Pour l'instant, nous écrivons cette interaction sous la forme

$$V_{ij} = g \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (4)$$

où le symbole $\delta(\mathbf{r})$ représente "presque" une distribution de Dirac. Le point central de ce cours portera sur le cas résonnant, c'est-à-dire une combinaison des masses atomiques et de l'intensité g du potentiel telle qu'un état lié à deux corps soit juste au seuil d'apparition pour l'hamiltonien (voir figure 3)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \hat{V}_{12}. \quad (5)$$

Notons que dans l'équation ci-dessus, nous avons donné la même masse aux deux particules, mais nous rencontrerons également des situations intéressantes dans lesquelles ces masses sont différentes.

Une notion très importante du cours sera l'émergence pour le problème à trois corps d'un potentiel variant comme l'inverse du carré d'une distance caractéristique R :

$$V(R) = -\frac{\gamma}{R^2}. \quad (6)$$

La distance R en jeu ici pourra être par exemple l'hyperrayon pour le sys-

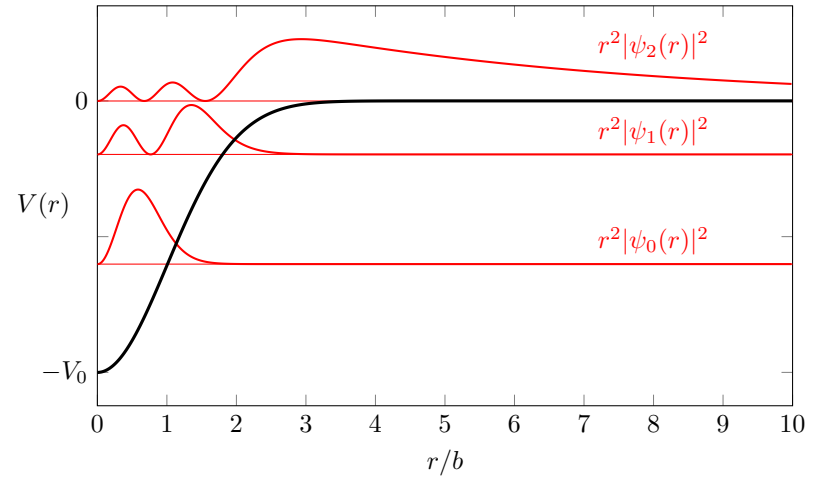


FIGURE 3. Un exemple de résonance de diffusion pour un potentiel gaussien $V(r) = -V_0 \exp(-r^2/2b^2)$, mis en évidence sur la densité de probabilité radiale $r^2|\psi_n(r)|^2$ des états liés pour un moment cinétique nul ($\ell = 0$). On a choisi le couple (V_0, b) de sorte que le dernier état lié $\psi_2(r)$ est très proche de la limite de dissociation ($2mb^2V_0/\hbar^2 = 23.5$). L'extension de cet état faiblement lié est alors beaucoup plus grande que la portée b . L'état fondamental $\psi_0(r)$ et le premier état excité $\psi_1(r)$ sont au contraire fortement liés et d'extension $\sim b$. C'est la physique associée à l'état faiblement lié qui va nous intéresser principalement dans ce cours.

tème à trois corps

$$R \propto \sqrt{r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2}. \quad (7)$$

Cette émergence d'un potentiel attractif en $1/R^2$ a été découverte par Vitaly Efimov dans une série d'articles remarquables (Efimov 1970; Efimov 1971; Efimov 1972; Efimov 1973). Insistons sur le fait que ce potentiel à longue portée est absent de la physique à deux corps qui, comme nous l'avons écrit, est à courte portée, voire même de portée nulle. C'est pour cette raison qu'on le qualifie de propriété "émergente", qui ne se concrétise que lorsque les trois corps sont simultanément présents.

La particularité du potentiel en $1/R^2$ est son invariance d'échelle qui va nous occuper intensivement dans les premiers chapitres de ce cours. Cette



FIGURE 4. Anneaux borroméens tirant leur nom de la famille italienne des Borromée, dont les armoiries portent les anneaux depuis le XV^{ème} siècle. Photo de Wikimedia Commons, prise dans l'église San Pancrazio à Florence.

invariance s'illustre de manière simple sur l'hamiltonien à une particule

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{\gamma}{R^2}. \quad (8)$$

Si une fonction d'onde $\psi(R)$ est état propre de cet hamiltonien pour l'énergie E , on peut alors vérifier que la famille infinie de fonctions $\psi(\lambda R)$ pour λ réel quelconque est également état propre de $\hat{H}$ pour la valeur propre $\lambda^2 E$. Cette propriété du potentiel en $1/R^2$ est unique dans la famille des interactions en loi de puissance !

La physique découverte par Efimov (et pressentie auparavant par d'autres physiciens comme Thomas (1935)) entraîne l'existence d'états borroméens. Même si le potentiel $V(r_{12})$ est légèrement trop faible pour admettre un état lié à deux corps, le problème à trois corps peut quant à lui posséder un certain nombre d'états liés. Ces états ne "tiennent" que parce que les trois corps sont simultanément présents. Cette situation rappelle celle des trois anneaux entrelacés et inséparables montrés sur la figure 4 : si on en sectionne un, les deux autres sont libérés.

Quand Efimov publia ses prédictions au début des années 1970, il n'y avait que très peu de systèmes dans la nature sur lesquels on pouvait espérer les tester. Efimov s'intéressait essentiellement à des problèmes de phy-

sique nucléaire, comme trois particules α pouvant se lier pour former un noyau de carbone ^{12}C ou encore le problème du noyau de tritium formé de deux neutrons et un proton. Mais la théorie d'Efimov était difficilement applicable à ces situations car les interactions binaires n'y étaient pas résonnantes.

La physique atomique, notamment avec les gaz quantiques et leurs résonances de Fano–Feshbach ajustables, est venue enrichir considérablement le paysage en offrant des systèmes où l'invariance d'échelle trouvée par Efimov et l'universalité qui lui est liée pouvaient être testées de manière quantitative. Les expériences sur le trimère He_3 (Schöllkopf & Toennies 1994; Kunitski, Zeller et al. 2015) et celles menées sur un gaz de césium (Kraemer, Mark et al. 2006) ont ouvert un vaste champ de recherche que nous allons décrire dans les cours qui vont suivre. Compte tenu du temps limité, cette description ne sera bien sûr que partielle et nous renvoyons les lecteurs désireux d'en apprendre plus vers les articles de revue publiés sur le sujet au cours des vingt dernières années, comme Nielsen, Fedorov et al. (2001), Braaten & Hammer (2006), Braaten & Hammer (2007a), Ferlaino & Grimm (2010), Efimov (2011), Petrov (2012), Wang, Julienne & Greene (2015), Greene, Giannakeas et al. (2017), Naidon & Endo (2017) et D'Incao (2018).

Le cours de cette année sera composé de trois grandes parties, chacune constituée de deux chapitres.

- Dans les deux premiers chapitres, nous allons nous intéresser au problème à deux corps et montrer pourquoi le potentiel en $1/r^2$ est singulier parmi tous les potentiels en loi de puissance $1/r^\beta$. Nous montrerons que cette particularité du potentiel est liée à son invariance d'échelle, et plus généralement à son invariance conforme qui se manifeste dans la dynamique du problème. Nous illustrerons ces propriétés sur plusieurs exemples, comme l'interaction charge-fil et l'interaction charge-dipôle. Nous décrirons également quelques résultats théoriques remarquables du problème uni-dimensionnel (Calogero-Sutherland-Moser).
- Dans les chapitres 3 et 4, nous aborderons le problème à trois corps dans une version relativement simple, celui de deux particules lourdes de masse M liées par une particule légère de masse $m \ll M$. Nous utiliserons une approche de type Born–Oppenheimer : dans un premier

temps, nous supposerons les particules lourdes immobiles à une distance R l'une de l'autre et nous déterminerons l'énergie $E(R)$ de l'état fondamental de la particule légère. Nous verrons ainsi comment une loi $E(R) \propto -1/R^2$ peut émerger. Nous passerons ensuite au mouvement des particules lourdes, avec $E(R)$ jouant le rôle de potentiel effectif d'interaction entre elles. Nous montrerons qu'il apparaît alors une série théoriquement infinie d'états liés pour le système mMM , avec des énergies en progression géométrique, et nous décrirons des expériences menées sur des gaz d'atomes froids ayant mis en évidence les premiers états de cette suite.

- Les chapitres 5 et 6 seront consacrés au problème à trois corps pour des bosons identiques, ce qui correspond au cas initialement considéré par Efimov. Le traitement théorique complet est alors considérablement plus complexe que dans le cas mMM . Nous décrirons ses grandes lignes en nous appuyant sur le formalisme des potentiels hypersphériques. Nous décrirons un certain nombre d'expériences menées récemment sur un jet d'hélium ou sur des gaz d'atomes froids. Nous discuterons également une universalité inattendue, celle portant sur le *paramètre à trois corps*. L'introduction de ce paramètre est nécessaire pour empêcher la *chute vers le centre* du système à trois corps et correspond à la mise en place d'une coupure à courte distance R_0 . Pour de nombreuses espèces atomiques, il apparaît que R_0 est uniquement déterminé par la masse des atomes et leur coefficient de van der Waals C_6 . Nous terminerons par une brève discussion de la physique à petit nombre de corps au delà du cas à trois bosons considéré par Efimov. Nous verrons que l'universalité efimovienne ne se reproduit généralement pas, sauf dans deux cas spécifiques que nous discuterons.

Note. Ce cours est le troisième d'une série consacrée aux interactions entre atomes dans les gaz quantiques. Il n'est pas utile d'avoir suivi ou lu les cours des deux années précédentes pour comprendre celui-ci. Toutes les notions utilisées seront rappelées (sans démonstration) quand elles seront nécessaires et les références précises aux cours précédents seront indiquées.

Remerciements. Je suis très reconnaissant envers Jérôme Beugnon, Raphaël Lopes et Sylvain Nascimbene pour leurs commentaires sur une ver-

sion préliminaire de ces notes de cours.

Chapitre I

Le potentiel en $1/r^2$ et son invariance d'échelle

Comme annoncé dans l'introduction générale de ce cours, l'effet Efimov pour le problème à trois corps trouve son origine dans l'émergence d'un potentiel attractif à longue portée, variant comme $1/r^2$ où r est une coordonnée spatiale pertinente, l'hyperrayon dans le cas de trois particules en interaction.

Le simple problème d'une particule unique en mouvement dans un potentiel en g/r^2 est en fait très riche et d'une grande subtilité. L'intuition qu'on a pu acquérir en étudiant par exemple le potentiel coulombien en $-e^2/r$ est souvent mise en défaut. Par exemple, il n'y a pas d'état fondamental dans ce potentiel en g/r^2 avec g négatif et suffisamment grand en valeur absolue : partant d'un état lié donné, on peut fabriquer des états d'énergie négative arbitrairement grande. C'est le problème de "la chute de la particule vers le centre" [Landau & Lifshitz (1975), § 35].

Le mouvement d'une particule de masse m dans un potentiel en $1/r^2$ est un bel exemple d'un problème invariant d'échelle, pour lequel les constantes physiques nécessaires pour sa description ne fournissent aucune échelle de longueur. Par opposition, le problème coulombien conduit naturellement à l'échelle de longueur du rayon de Bohr $a_0 = \hbar^2/me^2$. Le remède au problème quantique de la chute vers le centre impose une taille minimale *ad hoc* aux états physiquement acceptables, ce qui vient briser – au moins partiellement – cette invariance d'échelle.

Le problème du potentiel en $1/r^2$ est traité explicitement dans plusieurs livres et articles. En plus de Landau & Lifshitz (1975) déjà mentionné, citons

notamment Mott & Massey (1949), chapitre II, § 7, Case (1950), Coon & Holstein (2002), Essin & Griffiths (2006), Dereziński & Richard (2017) et Paik (2018). Ce problème reste néanmoins relativement méconnu et Essin & Griffiths (2006) avancent une "bonne" raison pour cela : "*It violates every rule in the book, and discredits all the intuition we are trying to instill in our students.*" Comme ce problème joue un rôle central dans la physique efimovienne, il nous a donc semblé utile de lui consacrer ce chapitre et le suivant.

Dans ce premier chapitre, nous allons commencer par rappeler les bases du traitement quantique du mouvement d'une particule dans un potentiel central, en particulier la recherche des états liés. Après avoir établi les résultats généraux principaux pour un potentiel en g/r^β , nous nous concentrerons sur le cas $\beta = 2$ pour explorer l'invariance d'échelle mentionnée plus haut. Nous examinerons également un premier exemple d'application, portant sur l'interaction entre un atome polarisable et un fil uniformément chargé.

1 Le problème à deux corps

1-1 Séparation des variables

Considérons deux particules de masse m_j , $j = 1, 2$ interagissant par le potentiel $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. L'hamiltonien total

$$H_{\text{tot}} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (1)$$

se réécrit en fonction des variables du centre de masse

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad (2)$$

et de la variable relative

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{p} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}, \quad (3)$$

sous la forme

$$H_{\text{tot}} = H_{\text{cm}} + H_{\text{rel}} \quad \text{avec} \quad H_{\text{cm}} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M}, \quad H_{\text{rel}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_r} + V(\mathbf{r}) \quad (4)$$

où nous avons introduit la masse totale $M = m_1 + m_2$ et la masse relative $m_r = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$.

On vérifie simplement que les variables du centre de masse commutent avec les variables relatives, de sorte que l'on peut chercher une base de fonctions propres communes à H_{cm} et H_{rel} . Une base de fonctions propres de H_{cm} est constituée par les états d'impulsion bien déterminée (ondes planes en $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$), ce qui n'appelle pas de commentaire particulier. Dans ce qui suit, nous supposons que nous nous sommes placés dans le référentiel du centre de masse, c'est-à-dire que nous avons choisi l'état $\mathbf{K} = 0$, et nous nous intéresserons aux états propres de H_{rel} .

On s'est donc ramené d'un problème à 6 degrés de liberté $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ à un problème à trois degrés de liberté seulement $(\mathbf{r})$ en exploitant l'invariance par translation de l'hamiltonien (1).

1-2 L'invariance par rotation

Nous allons maintenant nous intéresser au cas fréquemment rencontré en pratique d'un potentiel V à symétrie centrale : $V(\mathbf{r}) = V(r)$. L'hamiltonien relatif H_{rel} commute alors avec les trois composantes de l'opérateur moment cinétique $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, de sorte que l'on peut chercher une base de fonctions propres communes à H_{rel} , $\mathbf{L}^2$, et une des trois composantes de $\mathbf{L}$, par exemple L_z .

On écrit donc les fonctions propres $\Psi(\mathbf{r})$ en coordonnées sphériques sous la forme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \quad (5)$$

où la dépendance angulaire $Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$ est entièrement fixée par le fait d'imposer à Ψ d'être état propre de $\mathbf{L}^2$ et de L_z . Rappelons que le nombre quantique ℓ est un entier positif ou nul, et qu'il caractérise la valeur propre de $\mathbf{L}^2$. Le nombre quantique m , qui appartient à l'ensemble $\{-\ell, -\ell+1, \dots, \ell\}$, caractérise la valeur propre de L_z :

$$\mathbf{L}^2 Y_{\ell, m} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell, m} \quad L_z Y_{\ell, m} = \hbar m Y_{\ell, m}. \quad (6)$$

Il ne reste plus qu'à déterminer la dépendance radiale $\psi(r)$ de la fonction d'onde Ψ . En pratique, il est commode d'introduire la fonction d'onde radiale réduite $u(r) = r \psi(r)$ qui vérifie l'équation uni-dimensionnelle :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} u''(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \right] u(r) = E u(r) \quad (7)$$

Chaque valeur de ℓ définit un canal d'interaction, pour lequel on obtient une équation aux valeurs propres qui a la structure d'une équation de Schrödinger avec un potentiel total :

$$V_{\text{tot}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \quad (8)$$

somme du potentiel réel et du potentiel centrifuge. Cette équation est définie *a priori* sur la demi-droite $r \geq 0$. Si nous faisons l'hypothèse que $\Psi(\mathbf{r})$ est régulière en $r = 0$, cela impose :

$$u(0) = 0. \quad (9)$$

Faisons de plus l'hypothèse que $V(r) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow +\infty$. L'équation (49) admet généralement des solutions d'énergie E négative, correspondant à des états liés du système à deux corps, et des solutions d'énergie positive, décrivant une collision (élastique) entre les deux particules asymptotiquement libres. Compte tenu de la définition des harmoniques sphériques, la condition de normalisation pour la fonction d'onde des états liés s'écrit :

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = \int |\psi(r)|^2 |Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\ &= \int_0^\infty |u(r)|^2 dr. \end{aligned} \quad (10)$$

En exploitant l'invariance par translation de l'hamiltonien (1), puis l'invariance par rotation du potentiel d'interaction, on est donc passé d'un problème à 6 degrés de liberté $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ à un problème à un seul degré de liberté (r) .

1-3 Recherche des états liés

Une partie importante du cours de cette année sera consacrée à la recherche d'états liés à plusieurs corps. Indiquons donc comment cette recherche peut se faire pour le problème à deux corps.

Commençons par établir une borne inférieure à l'énergie d'éventuels états liés. Si le potentiel $V(r)$ est lui-même borné inférieurement par une valeur $-|V_0|$, comme les potentiels carrés ou gaussiens représentés sur les figures I.1ab, on peut montrer simplement que l'énergie de chaque état lié, quand il en existe, est toujours supérieure à $-|V_0|$. Il suffit pour cela de multiplier (7) par $u^*(r)$ et intégrer le résultat entre 0 et $+\infty$ pour trouver, en utilisant (10) :

$$\frac{\hbar^2}{2m_r} \int |u'(r)|^2 dr + \int \left[V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \right] |u(r)|^2 dr = E. \quad (11)$$

Le premier terme du membre de gauche est toujours positif (énergie ciné-

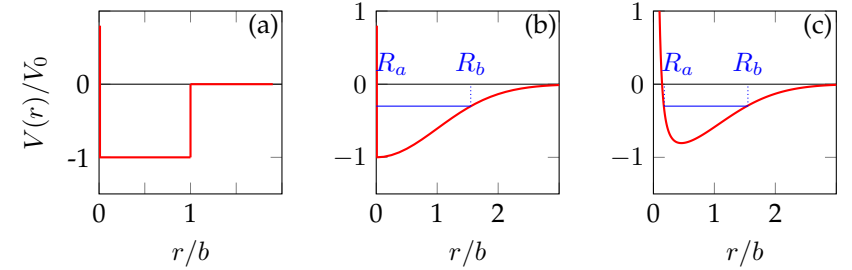


FIGURE I.1. Quelques potentiels à deux corps simples. (a) Puits carré de profondeur V_0 et de portée b . (b) Potentiel gaussien. (c) Potentiel gaussien superposé au potentiel centrifuge pour $\ell \neq 0$. On a indiqué en (b) et (c) les points tournants utilisés pour le calcul de l'énergie d'un état lié par la méthode WKB.

tique), et le second est supérieur ou égal à $-|V_0|$ puisque :

$$\int \left[V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \right] |u(r)|^2 dr \geq \int V(r) |u(r)|^2 dr \geq -|V_0| \int |u(r)|^2 dr \quad (12)$$

d'où le résultat annoncé en utilisant (10).

Existence d'états liés. Rappelons que l'existence d'états liés n'est pas garantie, même si $V(r)$ est négatif en tout point. Prenons l'exemple du potentiel carré représenté en figure I.1b, que nous avons étudié en détail dans le cours 2021 (chapitre 3, §3), intéressons-nous au canal de moment cinétique $\ell = 0$ et posons $V_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m_r$. On peut montrer simplement que le puits ne contient aucun état lié si $k_0 b / \pi \leq 1/2$, contient un seul état lié pour $1/2 < k_0 b / \pi < 3/2$, et plus généralement n états liés pour $n - 1/2 < k_0 b / \pi < n + 1/2$.

Nombre d'états liés. Sur l'exemple du puits carré que nous venons de donner, le nombre d'états liés est toujours fini, quelles que soient les valeurs de la profondeur V_0 et de la portée b . Il en va de même pour tout potentiel tendant suffisamment vite vers 0 à l'infini, mais ce n'est pas le cas du potentiel coulombien que nous examinerons un peu plus loin.

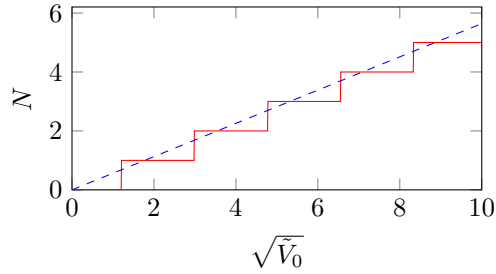


FIGURE I.2. Ligne rouge continue : Nombre d'états liés dans le potentiel gaussien $V(r) = -V_0 e^{-r^2/2b^2}$, avec $\tilde{V}_0 = 2m_r V_0 b^2 / \hbar^2$. Ligne bleue tiretée : valeur approchée donnée par l'argument de la fonction $I(x)$ en (15).

Une méthode simple pour estimer le nombre d'états liés consiste à utiliser la méthode semi-classique, encore appelée méthode WKB (Wentzel - Kramers - Brillouin). Nous nous contenterons d'énoncer ici le résultat utile pour notre étude et nous renvoyons le lecteur intéressé vers Schiff (1968) et vers le cours 2021 (chapitre 4, §1), où cette méthode a été présentée en détail.

Le résultat principal de la méthode WKB pour les états liés s'écrit comme une condition de quantification de l'énergie E du $n^{\text{ème}}$ état lié¹ :

$$\int_{R_a}^{R_b} k_E(r) dr \approx n\pi \quad (13)$$

où k_E est le nombre d'onde local associé à l'énergie E :

$$\frac{\hbar^2 k_E^2(r)}{2m_r} + V_{\text{tot}}(r) = E \quad \text{avec} \quad V_{\text{tot}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2}. \quad (14)$$

Les points R_a et R_b correspondent aux points de rebroussement gauche et droit du mouvement classique : $V_{\text{tot}}(R_a) = V_{\text{tot}}(R_b) = E$.

1. En toute rigueur, le terme de droite de (13) n'est pas $n\pi$, mais plutôt $(n - 1/2)\pi$ ou $(n - 1/4)\pi$, selon que les variations du potentiel aux deux points tournants classiques R_a et R_b sont "douce" (figure I.1c) ou qu'un des deux bords est "dur" (figure I.1b). Mais ce détail n'a pas d'importance si l'on s'intéresse à des valeurs de n relativement grandes.

Pour estimer la position des états liés, on peut donc balayer la valeur de E depuis $E = -|V_0|$ jusqu'à $E = 0$. Pour chaque valeur de E , on calcule l'intégrale (13) et on obtient une valeur approchée de l'énergie d'un état lié quand cette intégrale est un multiple entier de π . En particulier, la valeur de l'intégrale en $E = 0$ donne une estimation généralement assez fiable du nombre d'états liés :

$$N_{\text{lie}} \approx I \left[\frac{1}{\pi} \int_{R_a}^{R_b} k_{E=0}(r) dr \right] \quad (15)$$

où $I(x)$ désigne l'entier le plus proche de x et où R_a et R_b sont les points tournants du mouvement classique d'énergie nulle, par exemple $R_a = 0$, $R_b = +\infty$ dans le cas de la figure I.1b. L'existence d'un nombre infini d'états liés se manifeste alors par la non-convergence de cette intégrale en $R_b = \infty$.

Le critère de validité de l'approximation semi-classique est lié au fait que le nombre d'onde $k_E(r)$ doit varier assez lentement avec r . Plus précisément, si on introduit la longueur de de Broglie $\lambda = 2\pi/k$, ce critère s'écrit :

$$\frac{1}{2\pi} \frac{d\lambda}{dx} \ll 1. \quad (16)$$

Nous verrons un peu plus loin comment ce critère s'applique pour des potentiels en loi de puissance.

Exemple. Pour un potentiel gaussien $V(r) = -V_0 e^{-r^2/2b^2}$, on trouve pour l'argument x de la fonction $I(x)$ la valeur $\sqrt{\tilde{V}_0}/\pi$, avec $\tilde{V}_0 = 2m_r V_0 b^2 / \hbar^2$. La comparaison entre le nombre approché d'états liés $\sqrt{\tilde{V}_0}/\pi$ et le nombre trouvé par une résolution numérique de l'équation de Schrödinger est indiquée en figure I.2.

1-4 Solution d'énergie nulle et longueur de diffusion

Pour terminer ce bref rappel sur la description des interactions à deux corps, intéressons-nous pour simplifier au canal de collision $\ell = 0$ et à la solution d'énergie nulle, qui vérifie :

$$E = 0 : \quad -u''(r) + \frac{2m_r V(r)}{\hbar^2} u(r) = 0 \quad (17)$$

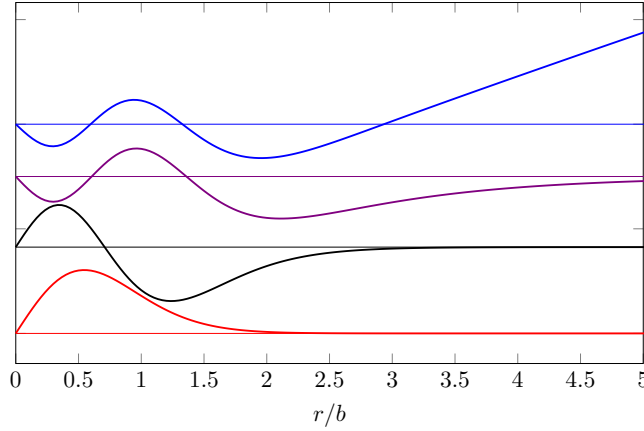


FIGURE I.3. De bas en haut : Fonction d'onde réduite $u(r)$ pour les trois états liés et l'état d'énergie nulle dans le potentiel gaussien $V(r) = -V_0 e^{-r^2/2b^2}$ avec $\tilde{V}_0 = 2m_r V_0 b^2 / \hbar^2 = 29$. Les états ne sont pas normalisés.

Considérons la solution de cette équation satisfaisant la condition aux limites $u(0) = 0$ [ou la condition $u(R_a) = 0$ si l'on est conduit à imposer un cœur dur en R_a pour régulariser le potentiel $V(r)$]. Cette solution est intéressante car l'examen de son nombre de nœuds permet de déduire immédiatement le nombre d'états liés dans le potentiel $V(r)$ pour le canal considéré (ici $\ell = 0$). Ce point découle directement du théorème de Sturm–Liouville, qui permet de classer les états propres de l'hamiltonien par énergie croissante en comptant le nombre de nœuds de leur fonction d'onde. L'état fondamental n'a pas de nœud², le premier état excité a un et un seul nœud, etc. Si l'état d'énergie nulle possède n nœuds, on en déduit donc qu'il y a n états d'énergie $E < 0$, donc liés.

Longueur de diffusion. Supposons que le potentiel $V(r)$ décroît "vite" à l'infini [en pratique, cela veut dire plus vite que $1/r^3$ (Landau & Lifshitz 1975)]. Rappelons la forme de la solution d'énergie nulle de l'équation radiale (7) dans ce cas : dans une région loin de l'origine, telle que le potentiel

2. L'annulation en $r = 0$ ou au niveau du cœur dur R_a ne compte pas comme un nœud.

$V(r)$ est négligeable, c'est-à-dire pour r grand devant la portée b du potentiel, cette équation devient simplement $u''(r) = 0$, dont les solutions sont de la forme $u(r) = c_0 + c_1 r$, que l'on écrit plutôt

$$E = 0, r \gg b : \quad u(r) \propto r - a \quad \Leftrightarrow \quad \psi(r) \propto \frac{1}{a} - \frac{1}{r} \quad (18)$$

La quantité a est appelée longueur de diffusion. Elle peut être positive, nulle ou négative, voire infinie, et elle constitue la caractéristique principale du processus de diffusion à très basse énergie.

Un exemple est donné pour le potentiel gaussien sur la figure I.3. On voit le comportement linéaire $u(r) \propto r - a$ avec ici $a \approx 3b$. On a également tracé les états liés dans ce piège, qui sont au nombre de trois pour la valeur choisie pour $\tilde{V}_0 = 2m_r V_0 b^2 / \hbar^2$. Comme attendu, l'état fondamental n'a pas de nœud, et les deux états excités ont un et deux nœuds. L'état d'énergie nulle possède 3 nœuds, les deux premiers étant très proches de ceux du dernier état lié, et le troisième est ici voisin de la longueur de diffusion a .

On pourra consulter le cours 2021, chapitre 3, pour une présentation détaillée du traitement de la collision de deux particules à basse énergie et pour des exemples de calculs de longueur de diffusion.

2 Potentiels attractifs en loi de puissance $1/r^\beta$

2-1 Approche qualitative en terme de paquet d'ondes

Dans la partie précédente, nous n'avons pas considéré explicitement le cas où le potentiel $V(r)$ pouvait être à la fois attractif et singulier à l'origine, c'est-à-dire $V(r) \rightarrow -\infty$ quand $r \rightarrow 0$. Ainsi, les potentiels représentés sur la figure I.1 sont tous bornés inférieurement, ce qui vient immédiatement mettre une limite inférieure à l'énergie du fondamental [cf. § 1-3].

Nous allons nous intéresser maintenant aux potentiels en loi de puissance

$$V(r) = \frac{g}{r^\beta}, \quad (19)$$

où l'exposant β est à ce stade quelconque et où nous considérons essentiellement le cas attractif, c'est-à-dire $g < 0$. Au moins pour le canal de moment

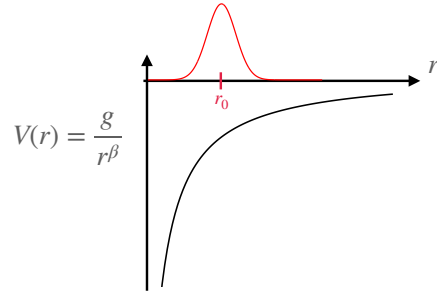


FIGURE I.4. Paquet d'ondes de position et d'extension $\sim r_0$ dans un potentiel attractif en loi de puissance.

cinétique $\ell = 0$, l'existence d'une borne inférieure pour l'état fondamental n'est alors pas acquise.

Commençons cette étude par une remarque fondée sur l'analyse dimensionnelle. Pour une particule de masse m_r placée dans un potentiel en g/r^β avec $\beta \neq 2$, on peut construire en mécanique quantique une échelle naturelle de longueur

$$r_* = \left(\frac{m_r |g|}{\hbar^2} \right)^{1/(\beta-2)} \quad (20)$$

Pour le potentiel coulombien, on retrouve ainsi (à un facteur multiplicatif près) le rayon de Bohr. À cette échelle de longueur r_* est associée l'échelle d'impulsion $\hbar/r_*$, ainsi que l'échelle d'énergie $\hbar^2/m_r r_*^2$. Cet argument dimensionnel disparaît bien sûr quand on prend $\beta = 2$ puisque (20) n'a plus de sens. On pressent ainsi que ce cas $\beta = 2$ va jouer un rôle particulier dans l'étude des potentiels en loi de puissance.

Pour obtenir une intuition des différents cas de figure possibles, considérons un paquet d'ondes centré³ en r_0 et d'extension également $\sim r_0$ (figure I.4). On sait que l'énergie moyenne de ce paquet d'ondes est nécessairement supérieure à l'énergie de l'état fondamental (théorème à la base de la méthode variationnelle). L'énergie cinétique du mouvement relatif

3. Pour être plus précis, on peut prendre une coquille de rayon r_0 et d'épaisseur Δr égale à une fraction de r_0 . Nous ne le ferons pas ici pour ne pas multiplier les symboles mathématiques.

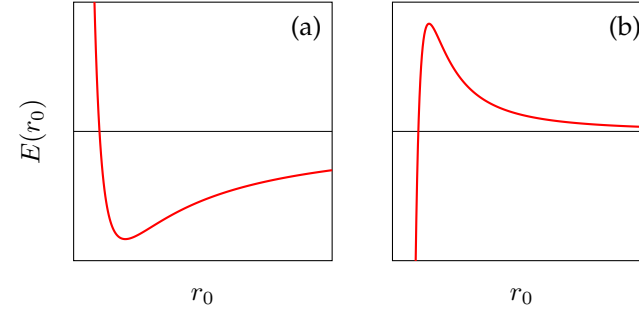


FIGURE I.5. Énergie totale d'un paquet d'ondes de taille r_0 dans un potentiel en loi de puissance, $V(r) = g/r^\beta$ avec $g < 0$. (a) Cas $\beta < 2$, l'énergie cinétique (positive) domine à courte distance. (b) Cas $\beta > 2$, l'énergie potentielle (négative) domine à courte distance, ce qui permet de générer des paquets d'ondes d'énergie arbitrairement négative.

$E_c \sim (\Delta p)^2/2m_r$ est liée au confinement sur la taille r_0 , donc à une dispersion en impulsion Δp d'au moins $\sim \hbar/r_0$. L'énergie cinétique et l'énergie potentielle E_p sont ainsi respectivement de l'ordre de

$$E_c \sim \frac{\hbar^2}{2m_r r_0^2}, \quad E_p \sim -\frac{|g|}{r_0^\beta}, \quad (21)$$

de sorte que deux situations émergent pour la variation de l'énergie totale $E = E_c + E_p$ avec la taille r_0 , selon que l'exposant β est inférieur ou supérieur à 2 (voir figure I.5). Nous allons maintenant passer ces deux situations en revue.

2-2 Le cas $\beta < 2$.

Dans ce cas, l'énergie cinétique (positive) est dominante pour les petites valeurs de r_0 et l'énergie potentielle (négative) est dominante pour les grandes valeurs de r_0 . L'énergie totale passe donc par un minimum pour une valeur de r_0 de l'ordre de r_* (figure I.5a). Cela indique qu'un état fondamental peut exister, ce qu'une analyse quantitative confirme.

Le potentiel coulombien fournit un exemple de ce cas, avec $\beta = 1$ et $g = -e^2$. La minimisation de l'énergie totale

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2m_r r_0^2} - \frac{e^2}{r_0} \quad (22)$$

fait apparaître la taille caractéristique $r_0 = \hbar^2/m_r e^2$ égale au rayon de Bohr et l'énergie $-m_r e^4/2\hbar^2$, l'énergie de l'état 1s de l'atome d'hydrogène⁴.

2-3 Le cas $\beta > 2$.

La situation est alors inversée : l'énergie cinétique domine aux grandes valeurs de r_0 , alors que l'énergie potentielle domine aux petites valeurs de r_0 (figure I.5b). Il s'ensuit que l'on peut fabriquer des paquets d'ondes avec une énergie négative et arbitrairement grande en valeur absolue, ce qui indique que le système n'a pas d'état fondamental bien défini. Le spectre de l'hamiltonien s'étend jusqu'à $E = -\infty$ et on qualifie cette situation de "chute vers le centre" (*fall to the center*).

On rencontre ce cas pour les interactions de van der Waals ($\beta = 6$, $g = -C_6$) ainsi que pour les interactions dipole-dipole ($\beta = 3$) bien que ce dernier cas soit un peu plus compliqué à traiter en raison du caractère anisotrope du potentiel $V(r)$. Le remède à ce problème est bien connu, et physiquement tout à fait pertinent. Les interactions de van der Waals par exemple ne représentent que la composante à grande distance des interactions entre deux atomes neutres. À courte distance, quand les nuages électroniques des atomes commencent à se recouvrir, des forces répulsives deviennent dominantes et empêchent l'effondrement qui amènerait les deux atomes l'un sur l'autre.

Un moyen phénoménologique simple de décrire cette répulsion à courte distance et de s'affranchir de la chute vers le centre est d'imposer un cœur dur à une distance $R_a > 0$, c'est-à-dire $u(R_a) = 0$ (figure I.6a). Une alternative consiste à prendre un potentiel répulsif additionnel en loi de puissance,

4. Le fait que l'on trouve *exactement* le résultat pour la taille de l'état fondamental ne doit pas faire illusion. Notre estimation de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle du paquet d'ondes n'était qu'approchée...

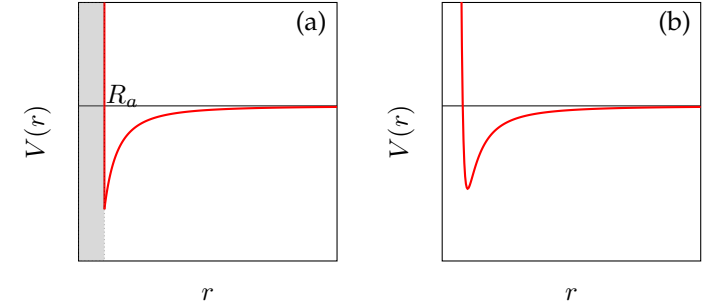


FIGURE I.6. Ajout d'un potentiel répulsif à courte distance pour empêcher la chute vers le centre dans un potentiel algébrique en $r^{-\beta}$ avec $\beta > 2$. (a) : cœur dur en $r = R_a$, (b) : ajout d'un potentiel répulsif avec une loi de puissance plus élevée.

par exemple le potentiel de Lennard-Jones :

$$V_{\text{LJ}}(r) = -\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_{12}}{r^{12}} \quad (23)$$

pour empêcher l'effondrement en $r = 0$ (figure I.6b). Dans ce qui suit, nous adopterons la première stratégie, qui est plus simple à traiter mathématiquement.

Cas "frontière" $\beta = 2$. Ce cas, qui jouera un rôle central dans la suite du cours, sera abordé en détail un peu plus loin. Signalons simplement que le fait qu'énergie cinétique et énergie potentielle ont alors la même dépendance vis-à-vis de la taille r_0 du paquet d'ondes est une signature de l'invariance d'échelle du potentiel en r^{-2} .

2-4 Combien y a-t-il d'états liés ?

Pour le potentiel coulombien, la réponse est bien connue. Les états liés sont repérés par le nombre quantique principal n et ont pour énergie $E_n = -E_I/n^2$, où $-E_I$ est l'énergie de l'état fondamental (-13.6 eV pour l'atome d'hydrogène). Le nombre n peut s'écrire $n = n' + \ell + 1$, où n' est le nombre

Exposant β	Comportement à l'origine	Nombre d'états liés	Exemple
$\beta < 2$	régulier	infini	coulombien
$\beta > 2$	non régulier	fini	van der Waals

TABLE I.1. Comportement des états liés d'une particule en mouvement dans un potentiel $V(r) = -|g|/r^\beta$. Un comportement non régulier à l'origine indique qu'il faut régulariser le potentiel $V(r)$ à courte distance, par exemple avec l'ajout d'un potentiel de cœur dur, pour assurer l'existence d'un état fondamental d'énergie finie.

quantique radial, c'est-à-dire le nombre de nœuds de la fonction d'onde radiale $\psi(r)$. Comme n peut être égal à n'importe quel entier positif, on en déduit que le nombre d'états liés est infini, quelle que soit la valeur ℓ du moment cinétique.

On peut retrouver ce résultat simplement à partir de l'estimation donnée en (15). Considérons les états de moment cinétique nul pour simplifier, c'est-à-dire $V_{\text{tot}}(r) = -e^2/r$. Le résultat (15) devient :

$$N_{\text{lie}} \approx \frac{\sqrt{2m_r e^2}}{\pi \hbar} \int_0^{+\infty} \frac{dr}{\sqrt{r}}. \quad (24)$$

Cette intégrale est divergente vis-à-vis de sa borne supérieure $r = +\infty$, indiquant que l'on peut former un nombre infiniment grand d'états liés avec des énergies arbitrairement proches de zéro.

La divergence de cette intégrale va subsister pour tous les potentiels en loi de puissance $V(r) = -|g|/r^\beta$ jusqu'à la valeur $\beta = 2$ incluse. On s'attend donc à un nombre infini d'états liés pour toute cette classe d'exposants.

Pour $\beta > 2$, nous avons vu qu'il est nécessaire de régulariser le potentiel $V(r)$ au voisinage de l'origine pour assurer l'existence d'un état fondamental d'énergie bien définie. Pour la régularisation obtenue en imposant un cœur dur en $r = R_a$ (figure I.6), on obtient à partir de (15) :

$$N_{\text{lie}} \approx I \left[\frac{\sqrt{2m_r |g|}}{\pi \hbar} \int_{R_a}^{+\infty} \frac{dr}{r^{\beta/2}} \right]. \quad (25)$$

L'intégrale est convergente et il y a un nombre fini d'états liés.

Pour le potentiel de van der Waals, $V(r) = -C_6/r^6$, on trouve ainsi

$$N_{\text{lie}} \approx I \left[\frac{2}{\pi} \frac{R_{\text{vdW}}^2}{R_a^2} \right] \quad \text{avec} \quad R_{\text{vdW}} = \frac{1}{2} \left(\frac{2m_r C_6}{\hbar^2} \right)^{1/4}, \quad (26)$$

un résultat déjà mentionné dans le cours 2021 (Chapitre 4, §2.1). Les résultats présentés dans cette section sont regroupés dans le tableau I.1.

Validité de l'approche semi-classique. Pour un potentiel en loi de puissance, le critère de validité écrit en (16) s'écrit pour la solution d'énergie nulle :

$$\frac{d(1/k)}{dr} = \frac{\hbar \beta}{\sqrt{8m_r |g|}} r^{\beta/2-1} \ll 1. \quad (27)$$

Là encore, il est essentiel de séparer les cas $\beta < 2$ et $\beta > 2$:

- Si $\beta < 2$, i.e. $\frac{\beta}{2} - 1 < 0$, ce critère de validité est satisfait aux distances r suffisamment grandes. Même si l'approximation semi-classique ne décrit pas correctement le comportement aux petits r , la conclusion concernant le nombre infini d'états liés, qui sont essentiellement concentrés loin de l'origine, reste valable.
- Si $\beta > 2$, i.e. $\frac{\beta}{2} - 1 > 0$, ce critère de validité est au contraire rempli pour les petites valeurs de r . Une étude plus précise du cas du potentiel de van der Waals, obtenu pour $\beta = 6$, montre que l'on décrit correctement presque tous les états liés (cf. cours 2021, chapitre 4, §4) : seule la position du dernier état lié est mal estimée par l'approche semi-classique. En particulier, l'estimation du nombre total d'états liés donnée en (26) est tout à fait pertinente.
- Pour $\beta = 2$, on remarque que le critère de validité (27) n'apporte pas de contrainte sur la position r , mais seulement sur l'amplitude du potentiel $|g|$, qui doit être notablement plus grande que $\hbar^2/m_r$.

On notera que le cas $\beta = 2$ joue là aussi un rôle de frontière séparant deux situations radicalement différentes.

3 Le potentiel $1/r^2$ en mécanique classique

L'essentiel du cours sera consacré aux propriétés quantiques de particules en mouvement dans un potentiel en $1/r^2$. Il est toutefois intéressant

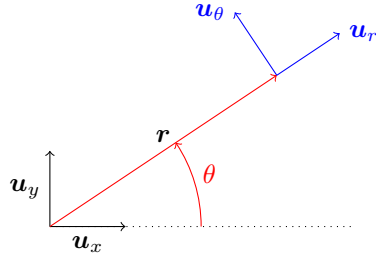


FIGURE I.7. Définition des coordonnées polaires pour décrire le mouvement classique d'une particule dans un potentiel central.

de commencer notre étude par la version *classique* du problème, qui contient plusieurs précurseurs des spécificités qui vont nous occuper dans la suite.

3-1 Mouvement classique et chute vers le centre

Rappelons brièvement la nature du mouvement classique d'une particule de masse m_r dans un potentiel central quelconque. Partant de la position $\mathbf{r} = r\mathbf{u}_r$ de la particule (voir figure I.7), on trouve sa vitesse en coordonnées polaires :

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \dot{r}\mathbf{u}_r + r\dot{\mathbf{u}}_r = \dot{r}\mathbf{u}_r + r\dot{\theta}\mathbf{u}_\theta. \quad (28)$$

On en déduit l'accélération

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2)\mathbf{u}_r + (2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta})\mathbf{u}_\theta. \quad (29)$$

Les projections de l'équation du mouvement sur l'axe radial et sur l'axe orthoradial conduisent à :

$$m_r(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) = -\frac{dV}{dr} \quad 2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta} = 0. \quad (30)$$

avec pour le cas qui nous intéresse ici $V(r) = g/r^2$.

La deuxième équation de (30) traduit la conservation du moment cinétique

$$\mathbf{L} = m_r \mathbf{r} \times \mathbf{v} = m_r r^2 \dot{\theta} \mathbf{u}_z, \quad (31)$$

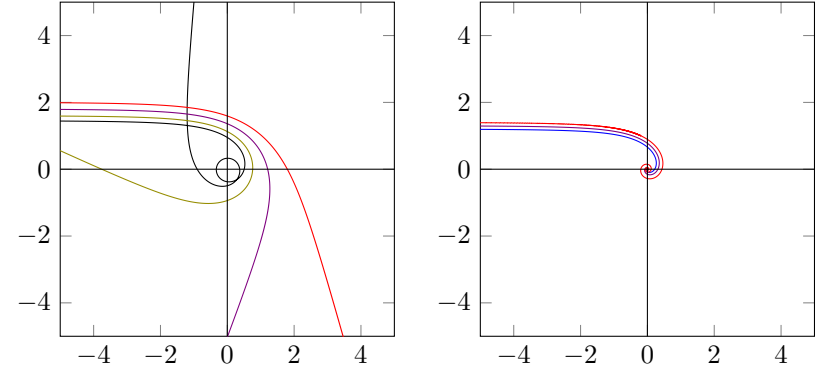


FIGURE I.8. Trajectoires classiques dans le potentiel g/r^2 avec $g < 0$. Gauche, moment cinétique $L > L_c$: $L/L_c = 1.025, 1.13, 1.27, 1.41$. Droite, chute vers le centre pour $L < L_c$: $L/L_c = 0.85, 0.92, 0.99$.

ce qui entraîne que le mouvement est planaire, ce plan étant défini par les vecteurs position initiale $\mathbf{r}_i$ et vitesse initiale $\mathbf{v}_i$.

La première équation s'interprète comme l'équation d'un mouvement à une dimension :

$$m_r \ddot{r} = -\frac{dV_{\text{tot}}}{dr} \quad \text{avec} \quad V_{\text{tot}}(r) = V(r) + \frac{L^2}{2m_r r^2} \quad (32)$$

Cette équation doit bien sûr être vue comme l'équivalent classique de l'équation de Schrödinger radiale donnée en (7).

Pour le potentiel $V(r) = g/r^2$ avec $g < 0$, on voit donc que deux cas sont possibles (figure I.8) :

— Si $L > L_c$, où L_c est la valeur critique définie par

$$L_c = \sqrt{2m_r|g|} \quad (33)$$

une particule arrivant de l'infini ne pourra pas s'approcher arbitrairement du centre puisque $V_{\text{tot}}(r) \rightarrow +\infty$ quand $r \rightarrow 0$. Elle pourra éventuellement effectuer un ou plusieurs tours avant de repartir vers l'infini.

— Si $L < L_c$, la particule tombe alors sur le centre.

Si l'on introduit le paramètre d'impact b et la vitesse v de l'atome arrivant depuis l'infini, on a $L = m_r v b$ de sorte que la condition de chute vers le centre s'écrit

$$L < L_c \quad \Leftrightarrow \quad b < \sqrt{\frac{2|g|}{m_r v^2}}. \quad (34)$$

Le fait que le critère de chute vers le centre puisse s'écrire aussi simplement en terme du seul moment cinétique est spécifique du potentiel en r^{-2} , qui a la même dépendance spatiale que le terme d'énergie centrifuge. Nous retrouverons d'ailleurs la condition (34) à peine modifiée dans le cas quantique.

3-2 L'interaction atome – fil chargé

Nous allons maintenant décrire une première implémentation expérimentale du mouvement d'une particule atomique dans un potentiel en $1/r^2$, due à Denschlag, Umshaus et al. (1998). Bien qu'on ait affaire à des particules microscopiques, il n'est pas nécessaire d'avoir recours au formalisme quantique pour traiter ce problème qui est bien décrit par une approche classique.

La géométrie est bi-dimensionnelle, et utilise le potentiel électrostatique créé par un fil rectiligne uniformément chargé, avec une densité linéique de charges que nous noterons Λ (figure I.9). Le fil est orienté selon l'axe z et on s'intéresse au mouvement des particules dans le plan xy .

Le fil crée en tout point de l'espace (en dehors du fil lui-même) le champ électrique

$$\mathcal{E} = \frac{\Lambda}{2\pi\epsilon_0 r} \mathbf{u}_r. \quad (35)$$

On considère un atome neutre de polarisabilité $\alpha_a > 0$ placé dans ce champ électrostatique. Un dipôle électrique $\mathbf{d} = \alpha_a \mathcal{E}$ est induit au sein de l'atome, et l'énergie d'interaction entre l'atome et le champ s'écrit :

$$E = -\frac{\alpha_a}{2} \mathcal{E}^2 = \frac{g}{r^2} \quad \text{avec} \quad g = -\frac{\alpha_a}{2} \left(\frac{\Lambda}{2\pi\epsilon_0} \right)^2 < 0. \quad (36)$$

On génère donc bien le potentiel attractif en $1/r^2$ désiré.

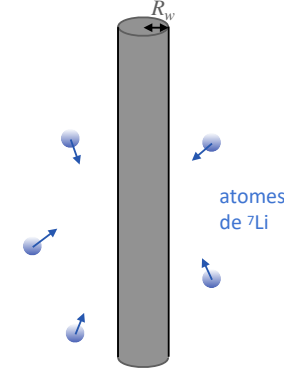


FIGURE I.9. Principe de l'expérience de Denschlag, Umshaus et al. (1998). On étudie le mouvement d'atomes neutres polarisables (^7Li) dans le champ électrostatique créé par un fil uniformément chargé.

3-3 Les résultats de Denschlag et al

L'expérience de Denschlag, Umshaus et al. (1998) a été menée avec des atomes de lithium de masse m capturés dans un piège magnéto-optique. Le fil métallique chargé électriquement peut être placé au centre du piège magnéto-optique ou bien à l'extérieur de ce piège (inset de la figure I.11, gauche). On mesure le taux de pertes des atomes dans les deux cas, en variant la charge linéique du fil et en utilisant le fait que les atomes venant au contact du fil se collent sur lui. La chute vers le centre se traduit donc par une perte accrue d'atomes, s'ajoutant aux pertes inévitables dues aux collisions avec les molécules du gaz résiduel dans l'enceinte expérimentale.

Le fil ayant une extension R_w non nulle, on pourra montrer que la condition (34) pour perdre un atome incident avec un paramètre d'impact b et une vitesse v devient (voir figure I.10)

$$b < \sqrt{R_w^2 + \frac{2|g|}{mv^2}}. \quad (37)$$

Il faut ensuite moyenner cette condition sur les positions et les vitesses des atomes piégés pour en déduire le taux de perte d'atomes induit par la présence du fil chargé.

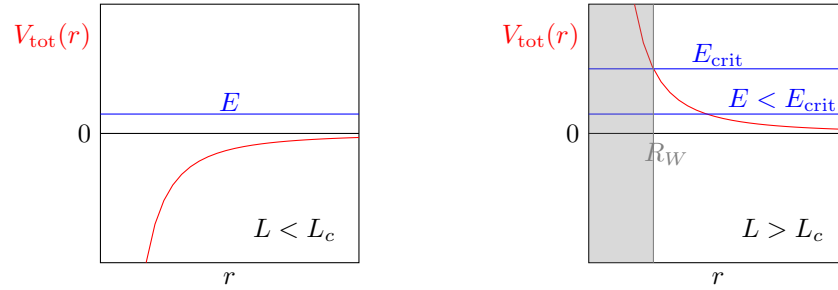


FIGURE I.10. Les deux cas possibles dans l'expérience de Denschlag, Umshaus et al. (1998). Si $L < L_c$ (figure de gauche), la chute vers le centre se produit avec certitude, quelle que soit l'énergie incidente. Si $L > L_c$ (figure de droite), l'atome peut toucher le fil de rayon R_w si son énergie dépasse la valeur critique $E_{\text{crit}} = V_{\text{tot}}(R_w)$, ce qui correspond à la condition (37).

Un résultat typique montrant la décroissance du nombre d'atomes piégés est représenté en figure I.11, gauche. La présence du fil chargé à l'intérieur du nuage d'atomes conduit à une augmentation spectaculaire du taux de décroissance. Pour un fil de rayon R_w donné, ce taux de décroissance augmente quasi-linéairement avec la charge linéique Λ , comme attendu d'après (37) quand la contribution de R_w devient négligeable (figure I.11, droite). Les résultats expérimentaux sont en excellent accord avec la modélisation du processus prenant en compte la polarisation de l'atome de lithium.

4 Le potentiel en $1/r^2$ en mécanique quantique

Nous nous intéressons maintenant à la version quantique du cas critique $\beta = 2$, qui va jouer un rôle crucial dans la physique à trois corps. L'analyse en terme de paquet d'ondes nous a montré que les deux contributions antagonistes, énergie cinétique et énergie potentielle, ont la même loi d'échelle vis-à-vis de la taille r_0 . On pressent donc que tout va se jouer en fonction de l'amplitude g du potentiel.

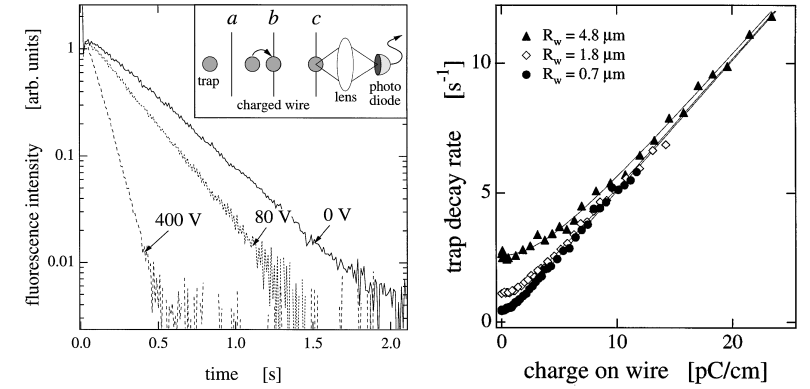


FIGURE I.11. Pertes induites au sein d'un piège magnéto-optique de lithium par un fil métallique uniformément chargé. Figure extraite de Denschlag, Umshaus et al. (1998).

4-1 L'invariance d'échelle

Le potentiel en $1/r^2$ possède une propriété spécifique, unique parmi les potentiels en loi de puissance : il est invariant d'échelle, ce qui signifie qu'une solution donnée de l'équation de Schrödinger (indépendante ou dépendante du temps) permet de générer une famille infinie de solutions de cette même équation. Ce résultat est indépendant de la dimension d'espace.

Commençons par le cas indépendant du temps et considérons une fonction $\Psi(\mathbf{r})$ état propre de l'hamiltonien :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_\tau} \nabla^2 \Psi + \frac{g}{r^2} \Psi = E \Psi. \quad (38)$$

Introduisons la fonction Φ définie par

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Psi(\lambda \mathbf{r}), \quad (39)$$

où λ est un nombre réel positif, qui peut être pris quelconque à ce stade⁵.

5. Une valeur $\lambda > 1$ correspond à une fonction Φ plus concentrée à l'origine que la fonction de départ Ψ . Son énergie cinétique est donc augmentée (elle varie sur une échelle plus courte) ainsi que son énergie potentielle en valeur absolue.

Il est immédiat de vérifier que Φ vérifie l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \Phi + \frac{g}{r^2} \Phi = (\lambda^2 E) \Phi. \quad (40)$$

La fonction Φ est donc elle aussi état propre de l'hamiltonien, avec l'énergie $\lambda^2 E$. Cela correspond au résultat annoncé : partant de l'énergie propre E et de sa fonction propre associée, n'importe quelle énergie E' de même signe que E peut s'écrire $E' = \lambda^2 E$ et est donc également valeur propre de l'hamiltonien. Cela résulte simplement du fait que l'opérateur ∇^2 provenant de l'énergie cinétique et le terme $1/r^2$ provenant de l'énergie potentielle ont le même comportement dans le changement d'échelle de longueur $\mathbf{r} \rightarrow \lambda \mathbf{r}$.

L'invariance d'échelle que nous venons de trouver pour les états propres de l'hamiltonien se généralise aux problèmes dépendant du temps. Considérons une fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ solution de

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \Psi + \frac{g}{r^2} \Psi. \quad (41)$$

On peut alors vérifier que la fonction

$$\boxed{\Phi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\lambda \mathbf{r}, \lambda^2 t)} \quad (42)$$

est également solution de (41). Ce changement d'échelle sur le temps est relié au changement d'échelle sur l'énergie, $E \rightarrow \lambda^2 E$, apparaissant sur (40). En effet, si $\Psi_E(\mathbf{r})$ est état propre de l'hamiltonien pour l'énergie E , la substitution :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \longrightarrow \Phi(\mathbf{r}, t) = \Psi_E(\lambda \mathbf{r}) e^{-iE\lambda^2 t/\hbar} \quad (43)$$

indique que l'on a trouvé une fonction $\psi_E(\lambda \mathbf{r})$ d'énergie $\lambda^2 E$.

Invariance d'échelle en mécanique classique. Cette invariance d'échelle du potentiel en $1/r^2$ est également présente en mécanique classique. Notons d'abord que dans le changement d'échelle $\mathbf{r} \rightarrow \lambda \mathbf{r}$, $t \rightarrow \lambda^2 t$, les vitesses sont modifiées selon la loi :

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \longrightarrow \frac{\mathbf{v}}{\lambda}. \quad (44)$$

On peut alors vérifier que, partant d'une trajectoire de condition initiale $(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$ et satisfaisant aux équations du mouvement

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \left(\frac{g}{r^2} \right) = \frac{2g}{r^3} \mathbf{u}_r, \quad (45)$$

on obtient une famille de trajectoires solutions de l'équation du mouvement $\mathbf{r}'(t'), \mathbf{v}'(t')$ en posant $t' = \lambda^2 t$, $\mathbf{r}' = \lambda \mathbf{r}$ et $\mathbf{v}' = \mathbf{v}/\lambda$. Toutes ces trajectoires se déduisent donc les unes des autres par une homothétie de rapport λ . On remarquera également que le moment cinétique $\mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v}$ n'est pas modifié par ce changement d'échelle, ce qui assure que la condition de chute vers le centre (34) reste la même pour tous les membres d'une même famille. C'était bien sûr indispensable pour qu'on puisse passer d'un membre de la famille à un autre par une homothétie.

4-2 Brisure de l'invariance d'échelle

Pour les énergies E positives, décrivant les états de diffusion, ce résultat concernant l'invariance d'échelle n'appelle pas de commentaire particulier. Il est très commode en pratique, puisqu'il assure que la connaissance d'un état de diffusion à une énergie donnée permet de générer une famille infinie d'autres états de diffusion, d'énergie arbitraire.

Pour les énergies E négatives, décrivant les états liés, ce résultat est au contraire problématique. Il indique que si un état lié d'énergie E existe, on peut générer des états d'énergie $E' = \lambda^2 E$ arbitrairement négative : le spectre de l'hamiltonien n'est donc pas borné inférieurement, ce qui n'est pas acceptable physiquement. Sur le plan mathématique, cela indique que l'hamiltonien n'est pas auto-adjoint (voir remarque ci-dessous).

Le remède à cette difficulté a déjà été mentionné plus haut pour les potentiels en $1/r^\beta$ avec $\beta > 2$: pour éviter la chute de la particule sur le centre, il faut régulariser le potentiel au voisinage de l'origine, par exemple en imposant la présence d'un cœur dur en $r = R_a > 0$. Notons que ce remède vient briser l'invariance d'échelle continue que nous venons de décrire. Si on se donne $\lambda > 0$ quelconque et un état propre $\Psi(r)$ d'énergie $E < 0$ satisfaisant $\Psi(r) = 0$ en $r = R_a$, il n'y a aucune raison pour que l'état transformé $\Phi(r) = \Psi(\lambda r)$ satisfasse également $\Phi(r) = 0$ en R_a . En d'autres termes, une fois imposé le cœur dur en R_a , partant de $\Psi(r)$ avec l'énergie $E < 0$, on ne

pourra pas fabriquer des états propres d'énergie $E' < 0$ avec $|E'|$ arbitrairement grande, ce qui conduirait à un spectre non borné inférieurement.

Remarque : opérateurs hermitiens et opérateurs auto-adjoints. En mathématiques, on définit l'adjoint $\hat{A}^\dagger$ d'un opérateur $\hat{A}$ de la manière suivante (voir par exemple les discussions de Bonneau, Faraut et al. (2001) et Araujo, Coutinho et al. (2004) qui prennent des exemples simples basés sur l'équation de Schrödinger à une dimension) :

- On part d'un opérateur $\hat{A}$ défini par son action sur les fonctions d'onde $|\phi\rangle$ et par son domaine $\mathcal{D}(\hat{A})$, c'est-à-dire l'espace des fonctions d'onde physiquement pertinentes sur lesquelles $\hat{A}$ va agir. La définition du domaine prend en compte les conditions aux limites, comme la contrainte $u(0) = 0$ pour la fonction d'onde radiale réduite.
- On définit l'adjoint $\hat{A}^\dagger$ et le domaine de l'adjoint $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$ comme l'ensemble des fonctions $|\psi\rangle$ telles que la forme linéaire

$$|\phi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A}) \longrightarrow \langle \psi | \hat{A} \phi \rangle \quad (46)$$

soit continue. On sait alors que pour chaque $|\psi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$, il existe un état $|\psi'\rangle$ de l'espace de Hilbert tel que $\langle \psi | \hat{A} \phi \rangle = \langle \psi' | \phi \rangle$ pour tout $|\phi\rangle \in \mathcal{D}(\hat{A})$. On pose $|\hat{A}^\dagger \psi\rangle = |\psi'\rangle$, c'est-à-dire

$$\langle \psi | \hat{A} \phi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi | \phi \rangle. \quad (47)$$

- L'opérateur $\hat{A}$ est dit symétrique (ou hermitien) si $\hat{A}$ et $\hat{A}^\dagger$ ont la même expression mathématique, en terme de dérivée par rapport aux variables r ou multiplication par des fonctions de r par exemple.
- L'opérateur $\hat{A}$ est dit auto-adjoint s'il est symétrique et si les domaines $\mathcal{D}(\hat{A})$ et $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$ coïncident.

On peut montrer que l'existence d'une borne inférieure au spectre d'énergie et donc d'un état fondamental n'est assurée que pour des opérateurs auto-adjoints. En dimension finie, l'opérateur $\hat{A}$ peut être représenté par une matrice carrée et les deux notions "hermitien" et "auto-adjoint" coïncident. En dimension infinie, ce n'est pas toujours le cas, un exemple simple étant fourni par le puits de potentiel carré infini (Bonneau, Faraut et al. 2001). On trouvera une discussion de ce problème pour le cas spécifique du potentiel en $1/r^2$ dans Essin & Griffiths (2006).

4-3 Potentiel adimensionné et solution d'énergie nulle

Revenons maintenant au cas spécifique d'un mouvement à 3 dimensions. Rappelons que puisque le potentiel g/r^2 est isotrope, nous pouvons chercher les états propres de l'hamiltonien sous la forme $\psi(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$. L'équation aux valeurs propres vérifiée par la fonction d'onde radiale réduite $u(r) = r \psi(r)$ s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{g}{r^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \right] u(r) = E u(r) \quad (48)$$

avec $E < 0$ pour un état lié, ou encore

$$-u'' + \frac{\alpha}{r^2} u = \epsilon u \quad (49)$$

où nous avons posé

$$\alpha = \frac{2m_r g}{\hbar^2} + \ell(\ell+1) \quad \epsilon = \frac{2m_r E}{\hbar^2} \quad (50)$$

Notons que même si le coefficient g est choisi ici négatif (potentiel attractif), le coefficient α peut être positif ou négatif, selon la valeur du moment cinétique. Dans ce qui suit, nous nous intéresserons principalement au cas où α reste négatif, c'est-à-dire à un moment cinétique suffisamment faible pour que l'attraction due à $V(r)$ domine la répulsion centrifuge. Pour $\alpha > 0$, l'équation (49) n'admet évidemment pas d'états liés.

Dans cette partie, nous allons nous intéresser uniquement à la solution d'énergie nulle et nous reportons la recherche explicite des états liés au chapitre suivant. Comme nous l'avons vu en § 1-4, le nombre de nœuds de cette solution d'énergie nulle fournit d'emblée une indication du nombre d'états liés. Rappelons également que le potentiel en $1/r^2$ décroît trop lentement quand $r \rightarrow +\infty$ pour que le concept de longueur de diffusion soit applicable.

Nous considérons donc l'équation

$$-u'' + \frac{\alpha}{r^2} u = 0, \quad u(R_a) = 0. \quad (51)$$

Les solutions peuvent être recherchées sous une forme simple pour le potentiel en $1/r^2$:

$$u(r) = r \psi(r) = r^{s+1} \quad (52)$$

avec $[-s(s+1) + \alpha] r^{s-1} = 0$. L'exposant s est donc solution de l'équation du second degré

$$s^2 + s - \alpha = 0 \quad (53)$$

dont les racines s'écrivent

$$s_1 = -\frac{1}{2} + \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \quad s_2 = -\frac{1}{2} - \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \quad (54)$$

Ces deux racines, réelles ou complexes selon le signe de $\alpha + \frac{1}{4}$, correspondent à deux solutions indépendantes de l'équation (51), comme attendu pour une équation du deuxième ordre.

La prise en compte de la condition aux limites pour un cœur dur en R_a fournit la fonction solution recherchée :

$$\psi(r) = \left(\frac{r}{R_a}\right)^{s_1} - \left(\frac{r}{R_a}\right)^{s_2} \quad (55)$$

à une constante multiplicative près.

Deux cas sont à discuter, selon le signe de l'argument de la racine carrée qui intervient dans (54).

Cas : $\alpha > -1/4$. Ce cas, qui se produit si $|g|$ est choisi d'emblée petit ou quand on prend ℓ assez grand, conduit à des valeurs réelles pour s_1 et s_2 , avec $s_2 < -\frac{1}{2} < s_1$. La fonction $\psi(r)$ n'a alors pas de nœuds (figure I.12), ce qui veut dire qu'il n'y a pas d'états propres d'énergie négative, donc pas d'états liés.

Ce résultat très fort provient du caractère radical utilisé pour régulariser le potentiel à l'origine, en imposant un cœur dur en R_a . Une régularisation plus douce pourrait conduire à la présence d'un ou plusieurs états liés mais en tout état de cause, on ne trouve pas dans ce cas un nombre infini d'états liés comme c'était le cas pour le potentiel coulombien, ou comme on va le voir dans ce qui suit pour une valeur plus grande de $|\alpha|$.

Notons que la régularisation par un cœur dur en R_a n'est pas indispensable dans ce cas $\alpha > -1/4$. Quand on fait tendre R_a vers 0 dans l'expression (55), on trouve, à un facteur multiplicatif près :

$$\psi(r) \propto r^{s_1} - R_a^{\sqrt{4\alpha+1}} r^{s_2} \quad (56)$$

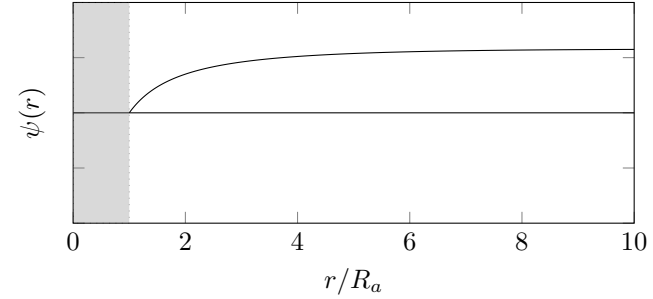


FIGURE I.12. Cas $\alpha > -1/4$. Fonction propre d'énergie nulle pour le potentiel α/r^2 , tracée pour $\alpha = -1/8$.

ce qui signifie que le poids de r^{s_2} dans cette solution tend vers 0 quand $R_a \rightarrow 0$. On peut retrouver ce résultat en imposant à l'intégrale donnant la valeur moyenne de l'énergie potentielle, proportionnelle à

$$\int \frac{g}{r^2} |\psi(r)|^2 d^3r = 4\pi g \int_0^\infty |\psi(r)|^2 dr, \quad (57)$$

d'être convergente en $r = 0$. Cela signifie que $\psi(r)$ doit diverger moins vite que $r^{-1/2}$ au voisinage de l'origine. C'est bien le cas pour la racine s_1 , mais pas pour la racine s_2 .

Cas : $\alpha < -1/4$. Il s'agit de la situation qui sera la plus intéressante dans les chapitres qui vont suivre. Dans ce cas, les deux racines (54) sont complexes conjuguées l'une de l'autre et s'écrivent

$$\alpha < -1/4 : \quad s_1 = -\frac{1}{2} + i|s_0|, \quad s_2 = -\frac{1}{2} - i|s_0|, \quad (58)$$

avec

$$\alpha < -1/4 : \quad s_0 \equiv \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} = i \left[\frac{2m_r|g|}{\hbar^2} - \left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2 \right]^{1/2} \in i\mathbb{R} \quad (59)$$

La fonction $\psi(r)$ s'écrit alors

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{R_a}{r}} \left[e^{i|s_0| \ln(r/R_a)} - e^{-i|s_0| \ln(r/R_a)} \right] \quad (60)$$

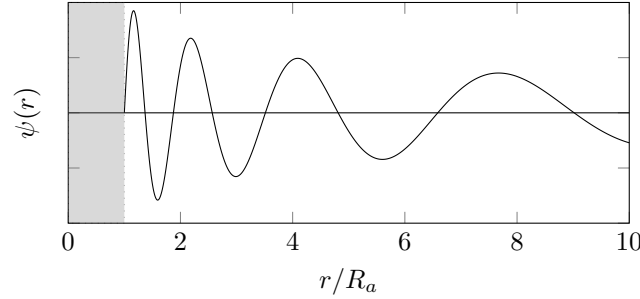


FIGURE I.13. Cas $\alpha < -1/4$. Fonction propre d'énergie nulle pour le potentiel α/r^2 , tracée pour $s_0 \equiv (\alpha + 1/4)^{1/2} = 10i$.

ou encore, à une constante multiplicative près

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} \sin[|s_0| \ln(r/R_a)] \quad (61)$$

Cette fonction "log-périodique" est tracée en figure I.13 pour $|s_0| = 10$.

Cette fonction possède une infinité de nœuds, localisés aux points r_n tels que

$$|s_0| \ln(r_n/R_a) = n\pi \quad \Rightarrow \quad r_n = R_a e^{n\pi/|s_0|}. \quad (62)$$

où n est un entier strictement positif. Ces nœuds forment une suite géométrique de raison $e^{\pi/|s_0|} > 1$. On en déduit qu'il y a une infinité d'états liés dans ce potentiel, en dépit de la régularisation par le cœur dur en R_a . La situation est donc radicalement différente de celle trouvée pour les potentiels décroissant plus rapidement à l'infini ($\beta > 2$).

Pour résumer, le potentiel en α/r^2 pour $\alpha < -1/4$ combine les deux types de "pathologie" décrits en §2 (cf. table I.2) :

- Ce potentiel diverge vite au voisinage de l'origine et nécessite une régularisation, par exemple avec un cœur dur en R_a , tout comme les potentiels en $1/r^\beta$ avec $\beta > 2$. Cette régularisation n'est au contraire pas nécessaire pour le potentiel coulombien en $1/r$. Comme signalé plus haut (cf. figure I.6), on peut choisir une régularisation plus douce pour empêcher la chute vers le centre, voire même invoquer des effets liés

Exposant β	Comportement à l'origine	Nombre d'états liés	Exemple
$\beta < 2$	régulier	infini	coulombien
$\beta > 2$	non régulier	fini	van der Waals
$\beta = 2$ et $\alpha < -1/4$	non régulier	infini	efimovien

TABLE I.2. Version complétée de la table I.1, incluant le cas du potentiel g/r^2 .

aux interactions de champ moyen dans les systèmes à N corps [voir par exemple Sakaguchi & Malomed (2011), Astrakharchik & Malomed (2015) et Malomed (2018)].

- Ce potentiel tend lentement vers 0 à l'infini et conduit à une infinité d'états faiblement liés, tout comme le potentiel coulombien.

Le cas du potentiel coulombien. Dans ce cas, la solution d'énergie nulle de $\psi'' + \frac{2}{r}\psi' + \frac{1}{r}\psi = 0$ (état $\ell = 0$) s'écrit $\psi(r) = J_1(2\sqrt{r})/\sqrt{r}$ où J_1 est la fonction de Bessel d'ordre 1. La fonction $\psi(r)$ possède donc bien une infinité de zéros, mais ne présente pas de singularité en $r = 0$.

4-4 Point critique $\alpha = -1/4$ et anomalie quantique

L'étude du problème quantique nous a révélé l'existence du point critique $\alpha = -1/4$, c'est-à-dire

$$\frac{2m_r g}{\hbar^2} + \ell(\ell + 1) = -\frac{1}{4} \quad (63)$$

ou encore

$$\left(\ell + \frac{1}{2}\right) \hbar = \sqrt{2m_r |g|}. \quad (64)$$

Il est intéressant de relier ce point critique à celui trouvé en mécanique classique $L_c = \sqrt{2m_r |g|}$ en identifiant la valeur caractéristique du moment cinétique du canal associé au nombre quantique ℓ : $L \sim (\ell + \frac{1}{2}) \hbar$. On retrouve donc ce même point critique dans les deux problèmes, classique et quantique.

Quand α est plus grand que la valeur critique $-1/4$ (cas quantique) ou quand $L > L_c$ (cas classique), les approches classiques et quantiques révèlent toutes les deux une invariance d'échelle sans singularité notable :

- Une famille infinie de trajectoires $r_\lambda(t)$ avec $r \rightarrow +\infty$ quand $t \rightarrow \pm\infty$, ces trajectoires se déduisant les unes des autres par une homothétie de facteur λ au niveau classique.
- Une famille infinie d'états propres, tous d'énergie positive, se déduisant les uns des autres par $\Phi_\lambda(\mathbf{r}) = \Psi(\lambda\mathbf{r})$ au niveau quantique.

Quand α est inférieur à la valeur critique $-1/4$, l'invariance d'échelle subsiste telle quelle au niveau classique avec des familles de trajectoires "tombant toutes sur le centre". En revanche, nous avons vu que cette invariance d'échelle est brisée au niveau quantique, du fait de l'introduction indispensable de l'échelle de régularisation R_a pour assurer que l'hamiltonien reste auto-adjoint.

Cette brisure de l'invariance d'échelle est un exemple d'*anomalie quantique* (Coon & Holstein 2002 ; Moroz 2011 ; Sundaram, Burgess et al. 2021). Partant d'un problème possédant une symétrie au niveau classique, ici l'invariance d'échelle, nous constatons que cette symétrie ne peut pas être maintenue quand on quantifie le problème. En l'occurrence, nous verrons plus loin qu'une partie de cette symétrie subsiste, dans la mesure où il existe une invariance d'échelle *discrète*, une fois la version quantique de ce problème établie. Le lien entre ce point critique et la notion habituelle de transition de phase est discutée par Ovdad & Akkermans (2021).

Chapitre II

États stationnaires et dynamique dans un potentiel en $1/r^2$

Nous avons expliqué au chapitre précédent l'importance d'une bonne compréhension du mouvement d'une particule dans un potentiel attractif en $-1/r^2$ pour aborder ensuite la physique à trois corps dans le régime d'Efimov. Ce type de potentiel émerge en effet quand les interactions binaires sont résonantes, c'est-à-dire décrites par une longueur de diffusion infinie, ou au moins grande devant la taille des édifices atomiques considérés.

Nous allons poursuivre ici l'étude du problème à un corps décrit par l'équation aux valeurs propres

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \Psi + \frac{g}{r^2} \Psi = E \Psi, \quad g < 0, \quad (1)$$

pour laquelle nous avons présenté au chapitre précédent la solution d'énergie nulle. Nous allons continuer cette étude et déterminer les éventuels états liés ($E < 0$) pour ce problème. Nous illustrerons nos résultats sur un problème concret : une charge électrique et un dipôle électrique peuvent-ils former un état lié ? Nous terminerons notre étude par une généralisation de l'invariance d'échelle déjà abordée : nous introduirons la notion d'invariance conforme et nous expliquerons pourquoi celle-ci entraîne des propriétés remarquables pour la dynamique du système.

Commençons par rappeler les principaux résultats obtenus au chapitre précédent. Pour tirer parti de l'invariance par rotation du problème, on peut travailler dans un canal de moment cinétique ℓ donné et chercher $\Psi(\mathbf{r})$ sous la forme $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ où $Y_{\ell,m}$ est une harmonique sphérique.

On introduit la fonction d'onde radiale réduite $u(r) = r \psi(r)$ qui vérifie l'équation de Schrödinger à une dimension

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{g}{r^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_r r^2} \right] u(r) = E u(r). \quad (2)$$

Cette équation s'écrit sous la forme compacte

$$\boxed{-u'' + \frac{\alpha}{r^2} u = \epsilon u} \quad (3)$$

avec

$$\boxed{\alpha = \frac{2m_r g}{\hbar^2} + \ell(\ell+1) \quad \epsilon = \frac{2m_r E}{\hbar^2}} \quad (4)$$

Pour l'énergie nulle $\epsilon = 0$, les solutions de cette équation peuvent être cherchées sous forme d'une loi de puissance

$$u(r) = r \psi(r) = r^{s+1} \quad \text{avec} \quad s^2 + s - \alpha = 0. \quad (5)$$

Les deux racines de cette équation du second degré donnent chacune un exposant possible pour la loi de puissance

$$s_1 = -\frac{1}{2} + \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}}, \quad s_2 = -\frac{1}{2} - \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}}. \quad (6)$$

Le cas intéressant pour la suite de ce cours, conduisant à l'existence d'états liés, correspond à la situation $\alpha + \frac{1}{4} < 0$ pour laquelle les deux

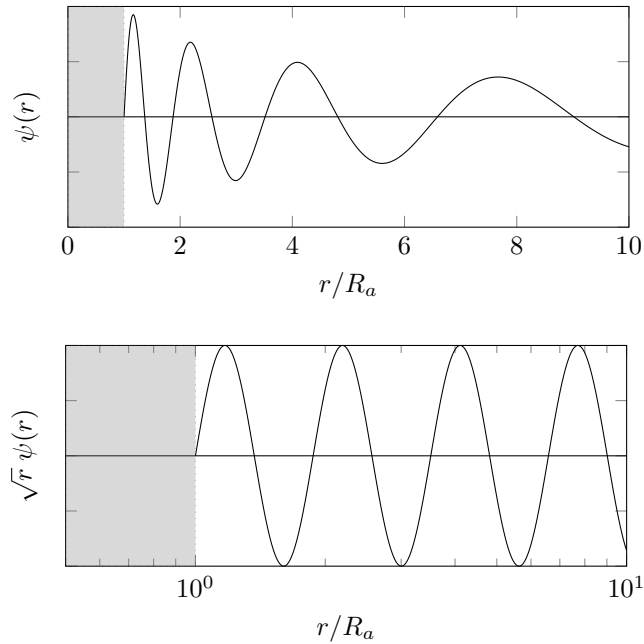


FIGURE II.1. Fonction d'onde à énergie nulle dans un potentiel en $1/r^2$ dans le cas $\alpha < -1/4$. Haut coordonnées linéaire, bas : coordonnées semi-logarithmiques.

racines sont complexes conjuguées l'une de l'autre

$$s_1 = -\frac{1}{2} + i|s_0|, \quad s_2 = -\frac{1}{2} - i|s_0|, \quad (7)$$

avec le nombre imaginaire pur s_0 défini par

$$s_0 \equiv \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \in i\mathbb{R} \quad (8)$$

Pour résoudre le problème de la "chute vers le centre", c'est-à-dire le caractère non borné inférieurement du spectre de l'hamiltonien intervenant dans (1) ou dans (3), nous supposons la présence d'un cœur dur en $r =$

$R_a > 0$, ce qui revient à imposer $\psi(R_a) = u(R_a) = 0$. La solution d'énergie nulle s'écrit alors

$$E = 0 : \quad \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{r}} \sin[|s_0| \ln(r/R_a)] \quad (9)$$

et elle admet une infinité de nœuds, situés aux points r_n tels que (cf. figure II.1)

$$|s_0| \ln(r_n/R_a) = n\pi \quad \Rightarrow \quad r_n = R_a e^{n\pi/|s_0|}. \quad (10)$$

Nous allons maintenant nous appuyer sur ces résultats pour construire les états d'énergie négative.

1 Les états liés du potentiel en α/r^2

1-1 Absence d'état lié pour $\alpha > -1/4$

En examinant la forme de la fonction d'onde à énergie nulle en présence d'un cœur dur en R_a , nous avons montré au chapitre précédent qu'il ne pouvait y avoir d'état lié quand α était supérieur à la valeur critique $-1/4$. Cette fonction d'onde s'écrit en effet :

$$\psi(r) = \left(\frac{r}{R_a}\right)^{s_1} - \left(\frac{r}{R_a}\right)^{s_2} \quad (11)$$

où s_1 et s_2 sont les solutions de l'équation du second degré (5) : $s^2 + s - \alpha = 0$. Comme ces racines s_1 et s_2 sont réelles si $\alpha > -1/4$, cela entraîne que $\psi(r)$ n'a pas de nœud dans l'intervalle $]R_a, +\infty[$: c'est l'état fondamental du système et il ne peut pas y avoir d'état propre d'énergie inférieure à 0.

Montrons comment retrouver ce résultat directement, en l'absence de toute régularisation du potentiel en $1/r^2$. Nous allons pour cela suivre une méthode proposée par Essin & Griffiths (2006). Commençons par remarquer que l'équation de Schrödinger (3) vérifiée par la fonction radiale réduite peut se mettre sous la forme

$$\epsilon u = \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\alpha}{r^2}\right) u = \left(\frac{d}{dr} + \frac{s+1}{r}\right) \left(-\frac{d}{dr} + \frac{s+1}{r}\right) u \quad (12)$$

où s est une solution de $s^2 + s - \alpha = 0$. Notons par ailleurs que si s est réel, on trouve pour tout couple de fonctions $u_1(r), u_2(r)$ régulières sur l'intervalle $[0, +\infty[$, tendant vers 0 en $+\infty$ et vérifiant la condition aux limites $u_j(0) = 0$:

$$\int_0^\infty u_2^*(r) \left[\left(\frac{d}{dr} + \frac{s+1}{r} \right) u_1(r) \right] dr = \int_0^\infty \left[\left(-\frac{d}{dr} + \frac{s+1}{r} \right) u_2(r) \right]^* u_1(r) dr \quad (13)$$

Supposons qu'un état lié d'énergie $E < 0$ et de fonction d'onde radiale réduite $u(r)$ (normée) existe. Multiplions l'équation aux valeurs propres (12) par $u(r)$, intégrons sur l'intervalle $[0, +\infty[$ et utilisons le résultat (13). On trouve

$$\frac{2m_r E}{\hbar^2} = \int \left| \left(-\frac{d}{dr} + \frac{s+1}{r} \right) u(r) \right|^2 dr \quad (14)$$

ce qui est clairement impossible pour une énergie $E < 0$, puisque le membre de droite est toujours positif ou nul. On ne peut donc pas avoir d'état lié régulier sur $[0, +\infty[$.

1-2 L'invariance d'échelle partiellement retrouvée

La recherche des états liés passe par la résolution de l'équation différentielle (3). Celle-ci peut bien sûr se faire numériquement, ou alors en passant par des fonctions spéciales, en l'occurrence les fonctions de Bessel modifiées de première et de deuxième espèce, $I_\nu(x)$ et $K_\nu(x)$, solutions de

$$x^2 y''(x) + x y'(x) - (x^2 + \nu^2) y(x) = 0 \quad (15)$$

Pour $\alpha < -1/4$, on peut en effet réécrire l'équation aux valeurs propres sous cette forme en posant pour $E < 0$:

$$x = \kappa r \quad y(x) = \frac{u(r)}{\sqrt{r}} = \sqrt{r} \psi(r) \quad \text{avec} \quad \nu = s_0, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m_r |E|}}{\hbar}, \quad (16)$$

et comme précédemment $s_0 = (\alpha + 1/4)^{1/2} \in \mathbb{R}$. Pour obtenir une fonction normalisable, tendant vers 0 à l'infini, on doit en fait se limiter à la fonction $K_{|s_0|}$ (Essin & Griffiths 2006) et les valeurs de κ correspondant aux états liés sont obtenues en imposant l'annulation de $\psi(r)$ en R_a .

Les fonctions d'onde $\psi_n(r)$ des premiers états liés sont tracées sur les figures II.2, II.3, ainsi que la fonction d'onde d'énergie nulle (9). Pour mettre en évidence les éléments importants de ces fonctions d'onde, nous avons en fait représenté $\sqrt{r} \psi(r)$ et nous avons choisi des coordonnées logarithmiques pour l'axe des abscisses, de sorte que la fonction d'onde (9) pour $E = 0$ est une simple sinusoïde.

Ce tracé appelle plusieurs commentaires qui vont jouer un rôle important dans toute la suite de ce cours :

1. Une partie significative du tracé des états liés excités (et dans une moindre mesure de l'état fondamental $n = 0$) est pratiquement identique à l'état d'énergie nulle. Cela se comprend aisément : dès que r est significativement plus petit que le point de rebroussement du mouvement classique R_b , défini par $|\alpha|/R_b^2 = \kappa^2$, l'équation différentielle définissant l'état lié

$$-u'' + \frac{\alpha}{r^2} u = -\kappa^2 u \quad (17)$$

est pratiquement identique à l'équation pour l'énergie nulle

$$-u'' + \frac{\alpha}{r^2} u = 0 \quad (18)$$

puisque la contribution de $\kappa^2 u$ est alors négligeable devant celle de $\alpha u/r^2$. Par exemple, sur la figure II.3, l'état excité $\psi_{n=4}(r)$ ($\kappa R_a \approx 6.4 \times 10^{-4}$) est très proche de l'état d'énergie nulle sur toute la plage $r/r_0 \in [1, 1000]$, c'est-à-dire jusqu'à $\kappa r \sim 0.6$.

2. Le fait que les états liés soient sur la majeure partie de leur étendue (*grosso modo* avant leur dernière arche) bien décrits par la solution d'énergie nulle, $\sqrt{r} \psi(r) \propto \sin[|s_0| \ln(r/R_a)]$ vient restaurer une invariance d'échelle, discrète cette fois-ci. Considérons par exemple la fonction d'onde du quatrième état excité, $\psi_4(r)$, et faisons la transformation d'échelle

$$\phi(r) = \psi_4(\lambda r) \quad (19)$$

avec

$$|s_0| \ln(\lambda) = \pi. \quad (20)$$

En coordonnées logarithmiques, cette homothétie sur r revient à faire une translation vers la gauche de longueur $\ln(\lambda)$, en oubliant la partie de la fonction qui va se retrouver en deçà du cœur dur en R_a . Or le

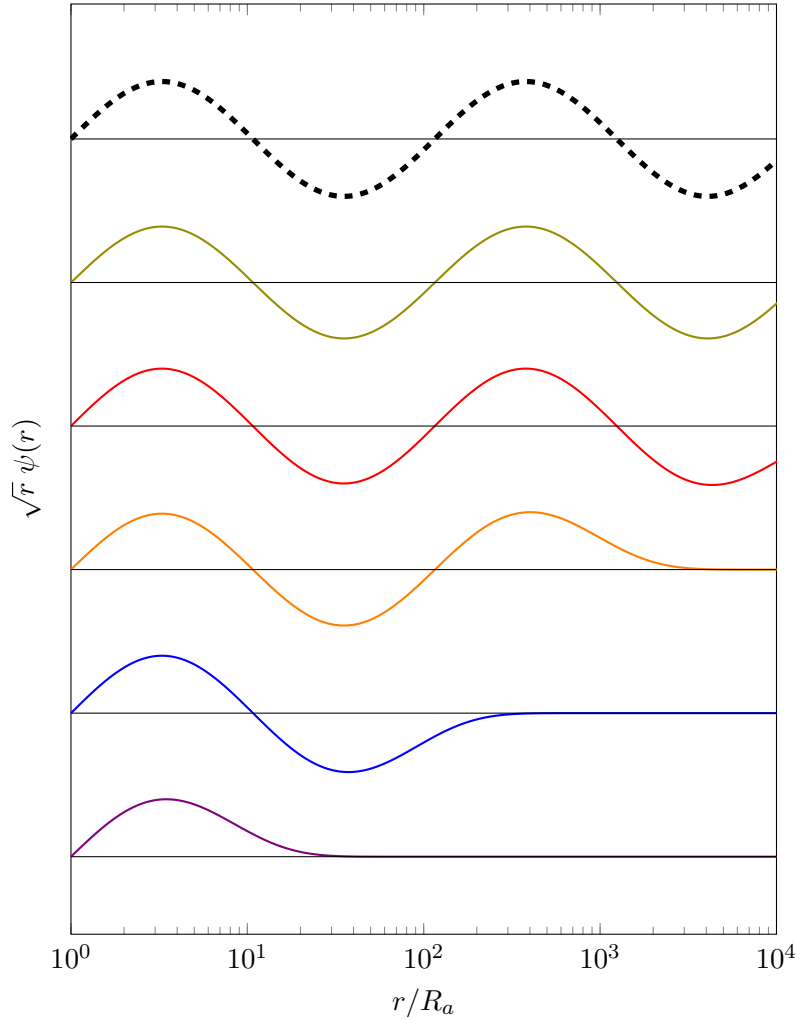


FIGURE II.2. Traits continus : fonctions d'onde radiales $\sqrt{r} \psi_n(r)$ (non normalisées) des cinq premiers états liés pour un potentiel en $-|g|/r^2$ tronqué par un cœur dur en R_a . La courbe pointillée noire représente l'état d'énergie nulle donné en (9). Ces courbes ont été tracées pour $\alpha = -2$ (et donc $|s_0| \sim 1.32$). La loi d'échelle $\psi_{n+1}(\mathbf{r}) \propto \psi_n(\mathbf{r}/\lambda)$ se manifeste ici par une simple invariance par translation discrète car l'axe x est logarithmique.

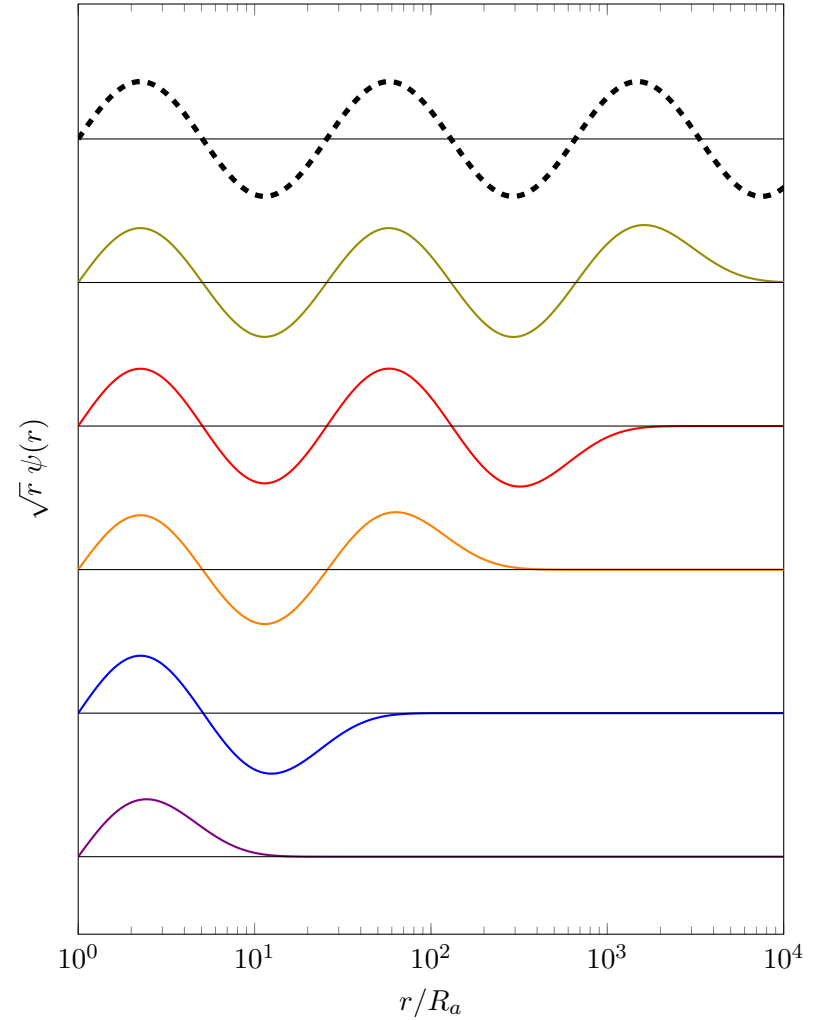


FIGURE II.3. Traits continus : fonctions d'onde radiales $\sqrt{r} \psi_n(r)$ (non normalisées) des cinq premiers états liés pour un potentiel en $-|g|/r^2$ tronqué par un cœur dur en R_a . La courbe pointillée noire représente l'état d'énergie nulle donné en (9). Ces courbes ont été tracées pour $\alpha = -4$ (et donc $|s_0| \sim 1.94$). La loi d'échelle $\psi_{n+1}(\mathbf{r}) \propto \psi_n(\mathbf{r}/\lambda)$ se manifeste ici par une simple invariance par translation discrète car l'axe x est logarithmique.

choix proposé pour λ assure pour un état de la forme $\sin[|s_0| \ln(r/R_a)]$ que l'on retrouve un zéro en $r = R_a$. On génère ainsi un autre état propre possible de l'hamiltonien, avec un nœud de moins que l'état de départ ψ_4 . On obtient donc en très bonne approximation l'état ψ_3 , et ainsi de suite.

3. Le fait que l'état lié $\psi_{n-1}(r)$ se déduise de l'état lié $\psi_n(r)$ par une transformation d'échelle de paramètre λ donné en (19) entraîne que leurs énergies sont reliées par

$$E_n = \frac{1}{\lambda^2} E_{n-1} \quad \text{ou encore} \quad \frac{E_n}{E_{n-1}} = e^{-2\pi/|s_0|} \quad (21)$$

On obtient ainsi les énergies de la série infinie d'états liés, de plus en plus proches de la limite de dissociation $E = 0$, ces énergies formant une suite géométrique de raison $e^{-2\pi/|s_0|}$. Les énergies calculées numériquement sont tracées en figure II.4 pour deux valeurs différentes de α (donc de $|s_0|$) et on peut constater que cette loi d'échelle est très bien vérifiée. Cette invariance d'échelle discrète jouera un rôle central dans la physique d'Efimov. On trouve en figure II.5 une autre manière de tracer ces données, mettant en évidence que le rapport E_{n+1}/E_n est effectivement quasi-indépendant de n , pour une valeur donnée de α .

En résumé, l'introduction d'un cœur dur en R_a a brisé l'invariance d'échelle continue du problème initial, mais elle ne l'a pas complètement supprimée. Une invariance d'échelle discrète subsiste, avec le facteur d'échelle $e^{\pi/|s_0|}$ pour les distances et $e^{2\pi/|s_0|}$ pour l'énergie, ces facteurs d'échelle étant (heureusement!) indépendants de la valeur choisie pour R_a .

Quelles valeurs prendre pour α (ou s_0) ? Dans ce qui précède, la valeur de l'amplitude g du potentiel $V(r)$ et donc des coefficients sans dimension α et s_0 définis en (4) et (8) sont quelconques. Dans l'effet Efimov de base, qui se produit entre trois particules identiques bosoniques avec une interaction binaire résonante, nous verrons aux chapitres 5 et 6 que l'on arrive à $\alpha \approx -1.263$, ce qui est en valeur absolue bien supérieur au seuil de $-1/4$ que nous avons dégagé. Le paramètre s_0 vaut alors $s_0 \approx i \times 1.00624$ et le paramètre d'échelle associé est $\lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 22.7$. Ce nombre est relativement grand et rend difficile l'observation de plusieurs états liés puisqu'il y a un facteur $\lambda^2 \approx 515$ entre les énergies de deux états consécutifs.

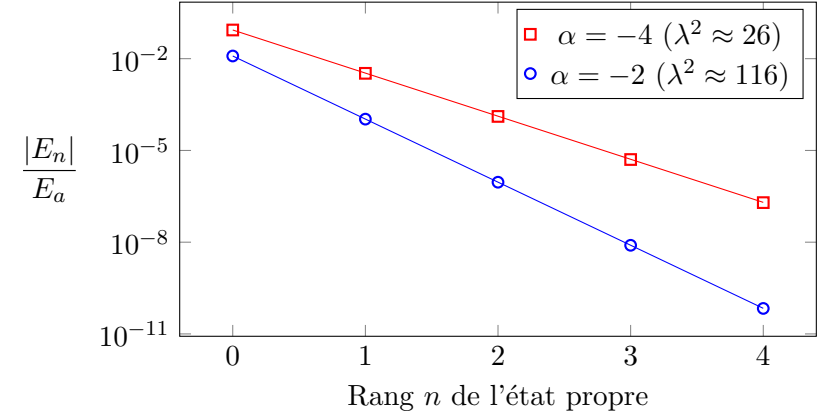


FIGURE II.4. Énergies de liaison E_n des premiers états liés dans un potentiel en $-1/r^2$ tronqué par un cœur dur en R_a , pour deux valeurs du paramètre sans dimension α . L'indice $n = 0$ correspond à l'état fondamental. L'unité d'énergie est $E_a \equiv \hbar^2/m_\tau R_a^2$. Les lignes continues représentent la loi d'échelle $E_n = E_0/\lambda^{2n}$.

Dans le cas où deux particules de masse M sont en interaction résonante avec une troisième de masse $m \ll M$, nous verrons aux chapitres 3 et 4 qu'une interaction effective en $-1/r^2$ peut également se produire. Dans ce cas, le paramètre $|s_0|$ peut devenir arbitrairement grand quand M/m tend vers l'infini. Cela facilite l'observation de plusieurs états liés consécutifs puisque le paramètre d'échelle λ est alors notablement réduit.

1-3 L'énergie de l'état fondamental

Une fois établie la relation (21) entre les énergies des différents états liés, il ne reste plus qu'à déterminer l'énergie d'un état lié, par exemple l'état fondamental, pour en déduire l'énergie des autres. Nous utiliserons dans ce qui suit l'échelle d'énergie naturelle du problème, $E_a \equiv \hbar^2/m_\tau R_a^2$ et nous considérerons uniquement le canal de moment cinétique $\ell = 0$ pour simplifier les notations.

Plusieurs approches peuvent être développées pour cela. La première

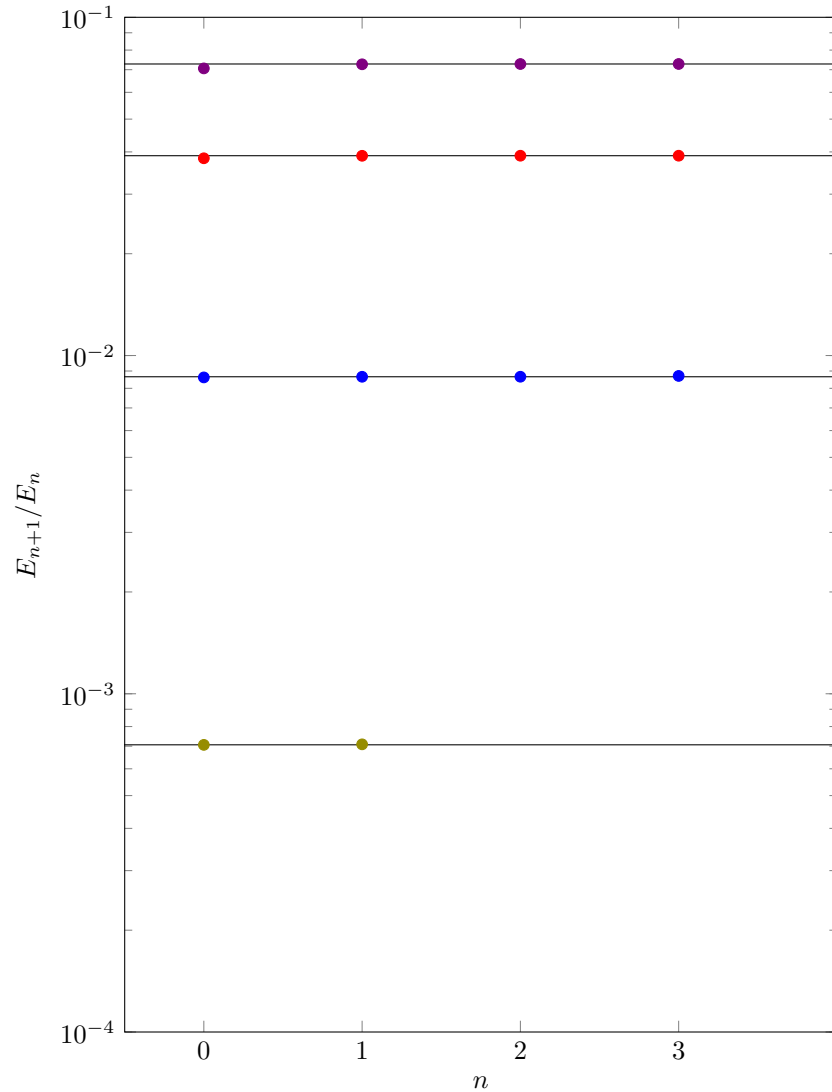


FIGURE II.5. Rapport E_{n+1}/E_n pour différentes valeurs de α . De bas en haut : $\alpha = -1, -2, -4, -6$. Les lignes continues indiquent la prédiction $e^{-2\pi/|s_0|}$ avec $s_0 \equiv \sqrt{\alpha + 1/4}$. Pour $\alpha = -1$, seuls les trois premiers états liés ont pu être déterminés avec une précision convenable. L'indice $n = 0$ correspond à l'état fondamental.

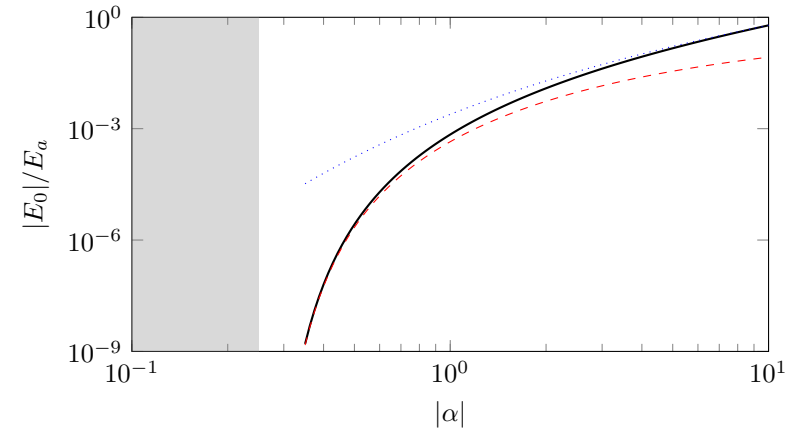


FIGURE II.6. Valeur absolue de l'énergie de l'état fondamental dans un potentiel g/r^2 attractif, avec $g = \hbar^2 \alpha / 2m_r$ et $\alpha < 0$, en présence d'un cœur dur en R_a . L'unité d'énergie est $E_a \equiv \hbar^2 / m_r R_a^2$. Les états liés n'existent que pour $|\alpha| > 1/4$. La courbe tirée rouge donne le résultat approché (22) de Essin & Griffiths (2006), valable pour $|\alpha|$ proche de $1/4$. La courbe pointillée représente le résultat (26) de l'approche WKB présentée dans le texte.

est numérique, qui conduit aux résultats tracés en figure II.6 avec une ligne continue noire. Une autre approche consiste à utiliser l'expression asymptotique des zéros de la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce, $K_{i|s_0|}(x)$, qui est la solution physiquement pertinente de l'équation de Schrödinger pour un état lié [cf. (15)]. Cette approche est développée en particulier par Essin & Griffiths (2006). Nous ne la reproduirons pas ici et nous donnons simplement son résultat dans la limite $\alpha \approx -1/4$:

$$|\alpha| \rightarrow 1/4_+ : \quad \frac{E_0}{E_a} \approx -\frac{2}{\gamma^2} \exp\left(-\frac{2\pi}{|s_0|}\right) \quad (22)$$

où $\gamma = e^C$, $C = 0.577 \dots$ étant la constante d'Euler. Cette prédiction est tracée en ligne tirée rouge sur la figure II.6. Elle est particulièrement utile quand on souhaite étudier le voisinage du point critique $\alpha = -1/4$ par une approche "groupe de renormalisation". Nous ne détaillerons pas cette approche ici car elle ne sera pas nécessaire dans la suite. Nous renvoyons

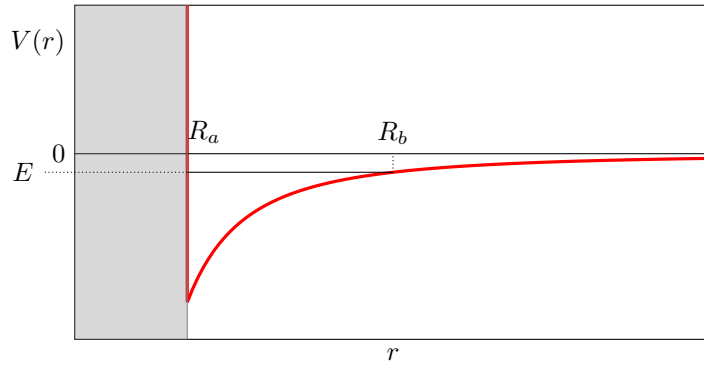


FIGURE II.7. Points tournants R_a et R_b associés à l'énergie $E < 0$, intervenant dans le calcul de l'intégrale WKB (23).

les lectrices et lecteurs intéressés vers Gupta & Rajeev (1993), Camblong, Epele et al. (2000), Camblong, Epele et al. (2001a), Camblong, Epele et al. (2001c), Burgess, Hayman et al. (2017) et Paik (2018).

On peut également utiliser l'approximation WKB pour estimer l'énergie de l'état fondamental, même si l'on sait que cette approximation est plutôt adaptée au régime quasi-classique, donc aux états excités. Nous avons vu au chapitre 1 (§ 2.4) que, pour un potentiel en $1/r^2$, cette approximation est valable pour $|\alpha|$ notablement plus grand que 1, donc le régime opposé du résultat (22). Avec un cœur dur en R_a , la condition de quantification semi-classique s'écrit :

$$\int_{R_a}^{R_b} k(r, E_n) dr = \left(n + \frac{3}{4}\right) \pi \quad (23)$$

avec $n = 0$ pour l'état fondamental. Le point tournant extérieur R_b est relié à l'énergie cherchée E_0 par (cf. figure II.7)

$$E_0 = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m_r R_b^2} < 0 \quad (24)$$

et un calcul relativement simple de l'intégrale de (23) conduit à :

$$\ln [\tan(u/2)] + \cos(u) = -\frac{3\pi}{4\sqrt{|\alpha|}} \quad \text{avec} \quad \sin u = \frac{R_a}{R_b}. \quad (25)$$

Limitons-nous pour simplifier au cas où α n'est pas extrêmement grand devant 1, ce qui entraîne que R_b est significativement plus grand que R_a . En pratique, cette simplification est encore valable pour $\alpha \sim 10$ et permet de traiter u comme un petit paramètre dans (25). On trouve alors $u \approx 2 \exp[-1 - 3\pi/(4\sqrt{|\alpha|})]$, ce qui conduit à

$$\text{approche WKB :} \quad \frac{E_0}{E_a} \approx -\frac{2|\alpha|}{e^2} \exp\left(-\frac{3\pi}{2\sqrt{|\alpha|}}\right) \quad (26)$$

Le résultat est tracé en ligne pointillée sur la figure II.6. Pour des valeurs encore plus grandes de α (non pertinentes en pratique pour les problèmes qui nous intéresseront dans ce cours), R_b et R_a sont comparables et l'approximation conduisant à (26) n'est plus valable. L'état fondamental va se concentrer tout au fond du puits de potentiel et on attend $E_0 \approx -\frac{|\alpha|}{2} E_a$.

Loi d'échelle approchée. Dans l'hypothèse $R_a/R_b \ll 1$, l'approche WKB fournit une valeur approchée pour l'énergie de chaque état lié :

$$\text{approche WKB :} \quad \frac{E_n}{E_a} \approx -\frac{2|\alpha|}{e^2} \exp\left[-\frac{2\pi}{\sqrt{|\alpha|}} \left(n + \frac{3}{4}\right)\right] \quad (27)$$

ce qui correspond à la loi d'échelle $E_{n+1}/E_n = \exp(-2\pi/\sqrt{|\alpha|})$. On retrouve la loi (21) à condition de faire la substitution

$$|s_0| = \sqrt{\left|\alpha + \frac{1}{4}\right|} \approx \sqrt{|\alpha|} \quad (28)$$

valable dans l'hypothèse $|\alpha|$ notablement plus grand que 1, ce qui est une condition nécessaire de validité de l'approche WKB, comme mentionné plus haut.

2 Interaction électrostatique et potentiel en $1/r^2$

2-1 L'interaction charge-dipôle

Nous étudierons dans les chapitres suivants l'émergence d'un potentiel en $1/r^2$ à partir d'une interaction de courte portée (mais résonnante) entre

différents constituants. Ici, nous allons aborder une situation physique où le potentiel en $1/r^2$ est naturellement présent : l'interaction entre une charge électrique q et un dipôle électrique $\mathbf{D}$, supposé ponctuel. L'énergie d'interaction électrostatique entre ces deux objets s'écrit

$$V = \frac{q \mathbf{D} \cdot \mathbf{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} = \frac{qD}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cos \theta \quad (29)$$

où θ désigne l'angle entre l'orientation du dipôle et le rayon vecteur $\mathbf{r}$ joignant le dipôle et la charge (figure II.8). On trouve donc bien la dépendance radiale en $1/r^2$, superposée à une dépendance angulaire en $\cos \theta$ qui est un ingrédient nouveau par rapport à ce que nous avons étudié auparavant.

L'orientation du dipôle est supposée fixe et nous la prendrons par convention alignée avec l'axe z . Nous allons nous intéresser ici aux états propres $\Psi(\mathbf{r})$ de l'hamiltonien du mouvement relatif

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 + \frac{qD}{4\pi\epsilon_0 r^2} \cos \theta \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (30)$$

Le système étant invariant par rotation autour de l'axe z , nous allons chercher ces états propres en coordonnées sphériques sous la forme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \Phi(r, \theta) e^{im\varphi}, \quad (31)$$

où φ désigne l'angle azimutal et θ l'angle polaire d'axe z . Nous cherchons donc des fonctions propres communes à l'hamiltonien et à la projection $\hat{L}_z$ de l'opérateur moment cinétique sur l'axe z (avec la valeur propre $\hbar m$).

Nous utiliserons dans ce qui suit l'expression de l'opérateur laplacien ∇^2 dans ces coordonnées :

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} (\nabla_\theta^2 + \nabla_\varphi^2) \quad (32)$$

où nous avons posé

$$\nabla_r^2 \Psi \equiv \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) \quad \nabla_\theta^2 \Psi \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) \quad \nabla_\varphi^2 \Psi \equiv \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \quad (33)$$

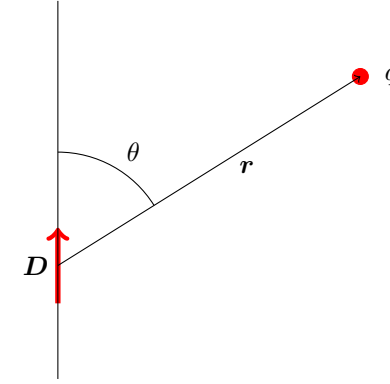


FIGURE II.8. Interaction électrostatique entre une charge q et un dipôle $\mathbf{D}$.

Nous cherchons donc les fonctions $\Phi(r, \theta)$ solutions de l'équation aux valeurs propres :

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r^2} \nabla_\theta^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \tilde{D} \cos \theta \right) \right] \Phi = \epsilon \Phi \quad (34)$$

où l'on a introduit le dipôle réduit (sans dimension)

$$\tilde{D} = \frac{2m_r q D}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \quad (35)$$

Ce problème a fait l'objet de plusieurs études théoriques (essentiellement concordantes) au milieu des années 1960 (Turner & Fox 1966; Mittelman & Myerscough 1966; Brown & Roberts 1967; Levy-Leblond 1967; Coulson & Walmsley 1967). Il a également été abordé sur le plan expérimental par Desfrancois, Abdoul-Carime et al. (1994), avant d'être repris théoriquement – notamment avec des outils provenant du groupe de renormalisation – par Camblong, Epele et al. (2001b), Alhaidari (2008), Connolly & Griffiths (2007) et Alhaidari & Bahlouli (2008).

2-2 Une charge peut-elle lier un dipôle ?

Pour trouver les éventuels états liés solutions de (30), nous allons chercher les fonctions Φ solutions sous une forme factorisée

$$\Phi(r, \theta) = u(r) f(\theta), \quad (36)$$

en utilisant la méthode de séparation des variables. Nous retrouverons une méthode similaire lorsque nous aborderons le problème à trois corps en utilisant la technique des potentiels hypersphériques.

L'équation aux valeurs propres (34) s'écrit alors

$$-u''f + \frac{u}{r^2} \left\{ \left[-\nabla_\theta^2 + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \tilde{D} \cos \theta \right] f \right\} = \epsilon u f. \quad (37)$$

La stratégie est alors simple : on commence par chercher des fonctions propres $f(\theta)$ de l'opérateur apparaissant entre accolades $\{\dots\}$ dans (37) sous la forme :

$$\left[-\nabla_\theta^2 + \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \tilde{D} \cos \theta \right] f(\theta) = \alpha f(\theta) \quad (38)$$

La valeur propre α joue ici le rôle de *constante de séparation*. Une fois déterminées les valeurs propres possibles, on reporte le résultat dans (37) pour obtenir l'équation aux valeurs propres pour la fonction radiale $u(r)$:

$$-u''(r) + \frac{\alpha}{r^2} u(r) = \epsilon u(r) \quad (39)$$

On s'est bien ramené à notre équation radiale désormais familière dans un potentiel en α/r^2 .

On sait d'après notre étude précédente que la question de l'existence d'états liés se ramène à la condition :

$$\text{états liés si et seulement si } \alpha < -\frac{1}{4} \quad (40)$$

et toute la question est donc reportée sur l'équation aux valeurs propres (38) pour la fonction $f(\theta)$. Pour un dipôle $\tilde{D}$ donné, nous cherchons la plus petite valeur propre possible α pour déterminer si elle atteint le seuil critique $-1/4$. Pour atteindre ce seuil, il est clair que l'on a intérêt à minimiser

le potentiel toujours positif $m^2/\sin^2 \theta$ en prenant $m = 0$. On se ramène donc au problème plus simple :

$$\left(-\nabla_\theta^2 + \tilde{D} \cos \theta \right) f(\theta) = \alpha f(\theta) \quad (41)$$

La résolution de cette équation peut se faire en développant $f(\theta)$ sur la base des polynômes de Legendre $P_n(\cos \theta)$:

$$f(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n P_n(\cos \theta), \quad (42)$$

ces polynômes étant solutions de l'équation

$$-\nabla_\theta^2 P_n(\cos \theta) = n(n+1) P_n(\cos \theta). \quad (43)$$

Les polynômes de Legendre vérifient par ailleurs la relation

$$x P_n(x) = \frac{n}{2n+1} P_{n-1}(x) + \frac{n+1}{2n+1} P_{n+1}(x). \quad (44)$$

On arrive ainsi à un système tri-diagonal pour déterminer les coefficients c_n :

$$\tilde{D} \frac{n}{2n-1} c_{n-1} + [n(n+1) - \alpha] c_n + \tilde{D} \frac{n+1}{2n+3} c_{n+1} = 0. \quad (45)$$

En pratique, on peut tronquer ce système à une valeur $n_{\max}$, puis écrire la condition pour avoir une solution $\{c_n\} \neq 0$: le déterminant de ce système doit être nul. Si on prend $n_{\max} = 1$, on arrive ainsi à

$$\begin{vmatrix} -\alpha & \tilde{D}/3 \\ \tilde{D} & 2 - \alpha \end{vmatrix} = \alpha^2 - 2\alpha - \frac{\tilde{D}^2}{3} = 0, \quad (46)$$

auquel cas la valeur critique $\alpha_c = -1/4$ est atteinte pour $\tilde{D}_c = 3\sqrt{3}/4 \approx 1.299$. On peut affiner ce résultat en prenant $n_{\max}$ plus grand et on trouve $\tilde{D}_c \approx 1.279$ (figure II.9).

Considérons le cas d'un électron en présence d'un dipôle électrique beaucoup plus lourd, soit $m_r \approx m_{\text{électron}}$. On obtient alors :

$$D_c = 5.5 \cdot 10^{-30} \text{ C.m} = 1.6 \text{ Debye} \quad (47)$$

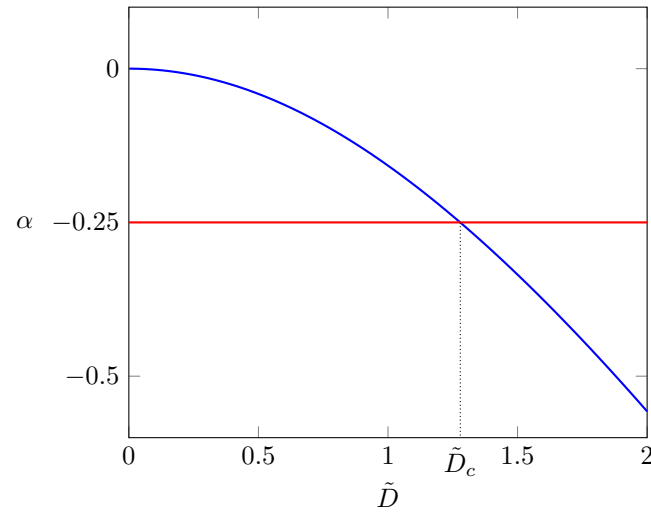


FIGURE II.9. Valeur propre α minimale pour le problème aux valeurs propres angulaire (41), en fonction du dipôle réduit $\tilde{D}$. La valeur critique $\alpha = -1/4$ est obtenue pour $\tilde{D}_c \approx 1.279$.

avec $1 \text{ Debye} = 3.336 \cdot 10^{-30} \text{ C.m.}$ Pour un dipôle inférieur à cette valeur, il n'y aura pas d'état lié charge-dipôle. Pour un dipôle supérieur à cette valeur, notre modèle prédit qu'il y aura au contraire une infinité d'états liés dans le canal $m = 0$.

Comme nous l'avons vu plus haut, pour assurer que le système admet un état fondamental, il faut prendre en compte le fait que le potentiel α/r^2 ne s'applique pas jusqu'à des distances arbitrairement petites. En l'occurrence, la notion de dipôle électrique n'est pas valable aux très courtes distances : c'est une idéalisation d'un système de deux charges $\pm Q$ séparées par une distance d , avec $D = Qd$. Quand la variable r devient $\lesssim d$, il faut résoudre explicitement le problème à trois corps $+Q, -Q, q$ [voir par exemple Wallis, Herman et al. (1960), Mittleman & Myerscough (1966), Levy-Leblond (1967) et Crawford (1967)]. On retrouve alors l'invariance d'échelle discrète présentée dans la partie précédente.

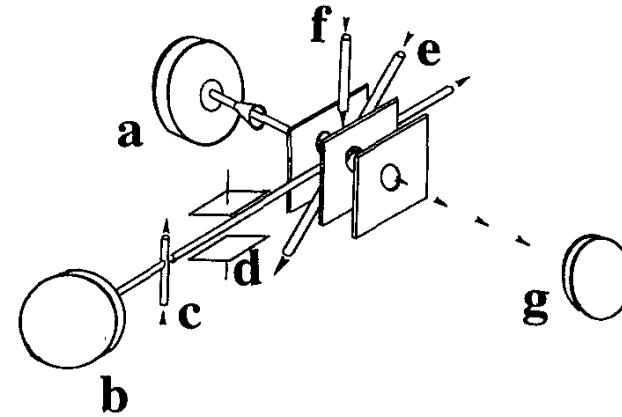


FIGURE II.10. Schéma expérimental utilisé pour étudier la capture d'un électron par le champ électrique créé par le dipôle d'une molécule. (a) : valve pour le jet moléculaire, (b) : valve pour le xénon, (c) : excitation du xénon par un faisceau d'électrons, (d) : zone de filtrage des différents niveaux de Rydberg, (g) galette multi-canaux pour la détection des ions. Figure extraite de Desfrancois, Khelifa et al. (1992).

2-3 L'expérience de Desfrancois et al.

L'expérience de Desfrancois, Abdoul-Carime et al. (1994) a consisté à prendre une série d'espèces moléculaires possédant un moment dipolaire électrique non nul et déjà mesuré par ailleurs, et une structure électronique avec une couche complète, de sorte que l'affinité électronique de la molécule M est avec une bonne probabilité négative.

Pour mesurer si un électron peut se lier à la molécule sous l'effet du seul potentiel dipolaire, on effectue une collision entre un jet de ces molécules¹ et des atomes de xénon portés dans un état de Rydberg (nombre quantique principal n élevé, figure II.10). Ce nombre quantique est varié de $n = 7$ à $n = 70$: on varie ainsi fortement l'énergie à fournir pour détacher l'élec-

1. Ces molécules sont ensemencées dans un jet atomique d'hélium. Les molécules ont une température rotationnelle de 5 à 10 K.

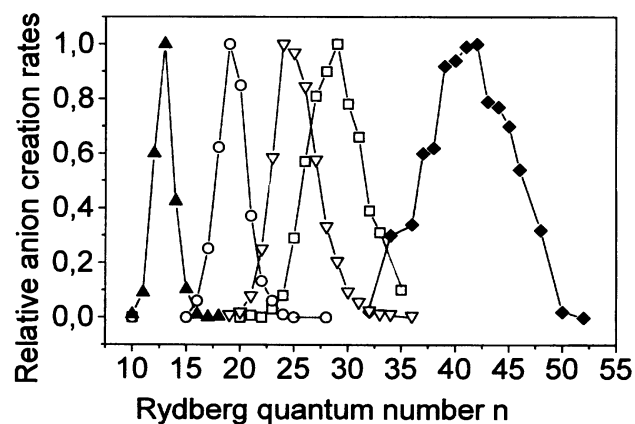
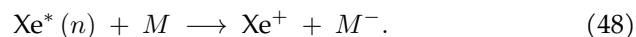


FIGURE II.11. Taux de formation de M^- en fonction du nombre quantique principal de l'état de Rydberg de Xe fournissant l'électron à la molécule neutre M . Par ordre de moment dipolaire décroissant : triangles pleins : acétonitrile; disques creux : cyclohexanone, triangles creux : acétone, carrés creux : cyclobutanone, losanges : acétaldéhyde. Figure extraite de Desfrancois, Abdoul-Carime et al. (1994).

tron externe de l'atome de xénon, cet électron étant ensuite capturé par la molécule dipolaire :



Les ions M^- sont ensuite accélérés et détectés derrière un spectromètre de masse. On montre en figure II.11 le taux de création de M^- en fonction du nombre quantique n de l'état de Rydberg du xénon. Le caractère assez fortement piqué de ce taux est en accord avec l'idée que l'électron peut être capturé de manière résonnante par la molécule pour former un état lié. L'énergie à laquelle cette résonance se produit dépend de la molécule.

Pour déterminer précisément l'énergie de liaison de M^- , on mesure le champ électrique nécessaire pour détacher l'électron capturé lors de la réaction (48). Les résultats sont reportés sur la figure II.12 en fonction du moment dipolaire de la molécule. Pour des molécules de moment dipolaire inférieur à 2.6 Debye, aucun signal n'a été mesuré. Pour les moments dipolaires plus grands, un état lié est effectivement détecté avec une énergie en

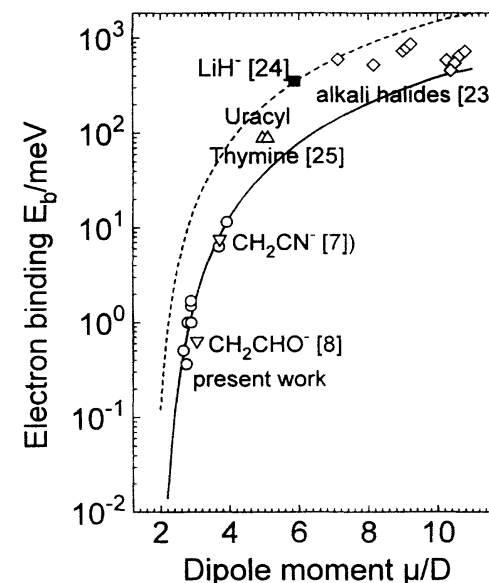


FIGURE II.12. Énergie de liaison de l'édifice M^- en fonction du dipôle électrique (noté ici μ et mesuré en Debye) de la molécule parente M . Les courbes en traits plein et tireté correspondent à deux prédictions théoriques fondées sur des modélisations différentes de la physique à courte distance, quand la distance charge-dipôle devient comparable à l'extension du dipôle lui-même. Figure extraite de Desfrancois, Abdoul-Carime et al. (1994).

bon accord avec la modélisation théorique proposée par les auteurs. Cette modélisation consiste à tronquer le potentiel en α/r^2 à courte distance par un autre potentiel faisant intervenir des paramètres moléculaires connus (polarisabilité par exemple).

On notera que l'on ne détecte dans cette expérience qu'un seul état lié de l'électron autour du dipôle moléculaire, alors que la théorie que nous avons développée jusqu'ici en prédit une infinité, formant une suite géométrique. Desfrancois, Abdoul-Carime et al. (1994) relie ce résultat à la prédiction de Garrett (1980), selon laquelle le mouvement des atomes composant la molécule dipolaire vient fortement restreindre le nombre d'états

molécule	dipole (Debye)
RbYb	0.21
KRb	0.57
RbCs	1.2
RbSr	1.5
NaK	2.7
NaRb	3.3
LiRb	4.1
LiCs	5.5

TABLE II.1. Moment dipolaire de quelques molécules di-atomiques utilisées dans les expériences de gaz ultra-froids. Valeurs extraites de Gadway & Yan (2016).

M^- possibles.

On remarquera également que la valeur seuil trouvée expérimentalement, 2.6 Debye, est notablement supérieure à la limite trouvée en (47). Cela est dû (au moins en partie) au fait que les auteurs ne disposaient que de molécules relativement complexes, et que la détection d'états faiblement liés était alors rendue compliquée par le mouvement de rotation de ces molécules aux températures disponibles. Les progrès récents dans la préparation de molécules di-atomiques ultrafroides pourraient permettre de reprendre ces expériences avec des moments dipolaires voisins de la valeur critique attendue théoriquement (table II.1).

3 Potentiel en $1/r^2$ et invariance conforme

3-1 Les symétries de l'équation de Schrödinger

L'invariance d'échelle du potentiel en $1/r^2$ que nous avons mentionnée au chapitre précédent fait partie d'un ensemble plus vaste de symétries de l'équation de Schrödinger, appelé groupe d'invariance conforme. Ces symétries viennent s'ajouter aux propriétés d'invariance géométrique, comme la symétrie de translation ou la symétrie de rotation.

Pour une particule libre décrite par l'équation de Schrödinger, cette in-

variance conforme a été découverte par Hagen (1972) et Niederer (1972). Elle a été étendue au cas d'une particule dans un piège harmonique par Niederer (1973), puis au cas du potentiel qui nous intéresse ici, $1/r^2$, par Alfaro, Fubini et al. (1976).

Cette invariance peut se généraliser à un ensemble de particules en interaction, pourvu que le potentiel correspondant satisfasse à la propriété d'invariance d'échelle (Pitaevskii & Rosch 1997)

$$V(\lambda \mathbf{r}_1, \dots, \lambda \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\lambda^2} V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (49)$$

Elle est également présente dans un gaz de fermions de spin 1/2 à la limite unitaire avec $m_\uparrow = m_\downarrow$ (Werner & Castin 2006). Dans ce cas, la longueur de diffusion est infinie et ne fournit donc aucune échelle de longueur. Par ailleurs, le caractère fermionique des particules empêche la formation d'édifice à trois corps qui pourraient eux aussi amener une échelle de longueur.

Cette invariance conforme se manifeste par ailleurs pour l'équation de Gross-Pitaevskii à deux dimensions, qui décrit par un champ classique la dynamique de particules interagissant par un potentiel de contact $g\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ (Pitaevskii & Rosch 1997; Saint-Jalm, Castilho et al. 2019). Dans ce cas, l'invariance d'échelle résulte du fait que l'on a à deux dimensions

$$\delta(\lambda \mathbf{r}) = \frac{1}{\lambda^2} \delta(\mathbf{r}). \quad (50)$$

La recherche des propriétés d'invariance de l'équation de Schrödinger se fait de la manière suivante. Partant d'une solution $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ de cette équation dans un potentiel extérieur $U(\mathbf{r})$:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \text{avec} \quad \hat{H} = \sum_i \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\mathbf{r}_i) \right] + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (51)$$

on cherche s'il existe des transformations des positions et du temps

$$\boxed{\mathbf{r}'_i = g(\mathbf{r}_i, t) \quad t' = h(t)} \quad (52)$$

accompagnées d'un changement de jauge de la fonction d'onde

$$\boxed{\psi'(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N, t') = f(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t)} \quad (53)$$

de sorte que ψ' soit également solution de l'équation de Schrödinger (51).

3-2 Particule unique dans un potentiel extérieur

Pour simplifier cette présentation, nous allons considérer ici le cas d'une particule unique, mais les résultats peuvent s'étendre sans difficulté au cas de N particules, voir par exemple Werner & Castin (2006). Nous ne traiterons pas ici les symétries bien connues de translation ou de rotation, et nous allons nous concentrer sur la symétrie "cachée" (ou symétrie dynamique), liée à l'invariance conforme.

Nous nous intéressons dans un premier temps au cas où la particule est libre ou évolue dans le potentiel $U(r) = g/r^2$. L'équation de Schrödinger s'écrit donc :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{g}{r^2} \psi. \quad (54)$$

Donnons-nous une matrice réelle 2×2 de déterminant 1 :

$$[M] = \begin{pmatrix} \gamma_1 & \gamma_2 \\ \gamma_3 & \gamma_4 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \gamma_1\gamma_4 - \gamma_2\gamma_3 = 1, \quad (55)$$

c'est-à-dire un élément de $SL_2(\mathbb{R})$, et considérons les transformations :

$$\boxed{\mathbf{r}' = g(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{r}}{\gamma_3 t + \gamma_4}, \quad t' = h(t) = \frac{\gamma_1 t + \gamma_2}{\gamma_3 t + \gamma_4}} \quad (56)$$

On peut vérifier (le calcul est fastidieux, mais sans difficulté de principe) que cette transformation, associée au changement de jauge

$$\boxed{f(\mathbf{r}, t) = (\gamma_3 t + \gamma_4)^{D/2} \exp\left(-i \frac{m\gamma_3 r^2/2}{\gamma_3 t + \gamma_4}\right)} \quad (57)$$

où D est la dimension de l'espace ($D = 3$ dans ce cours), remplit notre cahier des charges : la fonction $\psi'(\mathbf{r}', t')$ est également solution de (54) (Niederer 1972; Alfaro, Fubini et al. 1976).

Pour acquérir une intuition physique des transformations décrites par (56), remarquons que l'on dispose de 4 paramètres réels pour décrire la matrice 2×2 avec la contrainte portant sur son déterminant, de sorte qu'il

y a trois paramètres indépendants. On peut identifier trois types de transformations, correspondant à trois cas particuliers importants pour cette matrice :

— Les translations dans le temps :

$$[M] = \begin{pmatrix} 1 & t_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} : \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r}, \quad t' = t + t_0. \quad (58)$$

Cette invariance provient simplement du fait que l'hamiltonien est stationnaire.

— Les dilatations :

$$[M] = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & 1/\lambda \end{pmatrix} : \quad \mathbf{r}' = \lambda \mathbf{r}, \quad t' = \lambda^2 t \quad (59)$$

que nous avons déjà introduites plus haut. L'invariance de l'équation de Schrödinger est assurée par l'invariance d'échelle du potentiel en $1/r^2$.

— Les expansions :

$$[M] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \gamma_3 & 1 \end{pmatrix} : \quad \mathbf{r}' = \frac{\mathbf{r}}{\gamma_3 t + 1}, \quad t' = \frac{t}{\gamma_3 t + 1}. \quad (60)$$

qui peuvent être considérées comme des dilatations avec un facteur d'échelle dépendant du temps.

Notons que la transformation de jauge (57) est triviale dans les deux premiers cas puisque l'on a alors $\gamma_3 = 0$.

On forme ainsi un groupe continu de transformations, avec trois paramètres indépendants. L'opération associée à l'application successive de deux transformations successives $[M]$ et $[M']$ est caractérisée par la matrice $[M'']$ obtenue en faisant le produit matriciel $[M'] \times [M]$, ce qui donne toute sa pertinence à cette écriture matricielle. On notera par ailleurs que la matrice identité, $\gamma_1 = \gamma_4 = 1, \gamma_2 = \gamma_3 = 0$ est associée à une absence de modification pour les fonctions d'onde : $\mathbf{r}' = \mathbf{r}, t' = t, \psi' = \psi$. Les transformations au niveau des fonctions d'onde (52-53) et (56-57) constituent donc une représentation linéaire du groupe des matrices réelles 2×2 de déterminant 1, $SL_2(\mathbb{R})$.

Une fois identifiée cette structure, l'étape suivante est en principe de déterminer ses générateurs infinitésimaux. Toutefois, avant de procéder à

cette opération, il est utile de généraliser les résultats qui précèdent au cas d'une particule plongée dans un piège harmonique (Niederer 1973).

Nous considérons donc dans ce qui suit l'hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) \quad (61)$$

où $U(r)$ est le potentiel isotrope

$$U(r) = \frac{g}{r^2} + U_{\text{ho}}(r) \quad \text{avec} \quad U_{\text{ho}}(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2. \quad (62)$$

La partie en $m\omega^2 r^2/2$ vient briser l'invariance d'échelle trouvée pour g/r^2 , mais on peut modifier simplement les transformations (56)-(57) pour retrouver l'invariance conforme de l'équation de Schrödinger. Partant toujours d'une matrice 2×2 à coefficients réels et de déterminant 1, prenons

$$\mathbf{r}' = \frac{\mathbf{r}}{\lambda(t)}, \quad \tan(\omega t') = \frac{\gamma_1 \tan(\omega t) + \gamma_2}{\gamma_3 \tan(\omega t) + \gamma_4} \quad (63)$$

avec

$$\lambda(t) = [(\gamma_1 S + \gamma_2 C)^2 + (\gamma_3 S + \gamma_4 C)^2]^{1/2}, \quad S = \sin(\omega t), \quad C = \cos(\omega t). \quad (64)$$

Là encore, un calcul (également fastidieux) permet de montrer que la fonction ψ' , construite à partir de ψ et de la transformation de jauge

$$f(\mathbf{r}, t) = \lambda^{D/2}(t) \exp\left(-i\frac{m\dot{\lambda}r^2}{2\lambda}\right) \quad (65)$$

est également solution de l'équation de Schrödinger (D est la dimension d'espace). On pourra consulter Werner & Castin (2006) pour la version à N particules du même problème.

3-3 Les générateurs associés à l'invariance conforme

Disposant maintenant d'un groupe de transformations continues qui laissent invariante l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi + \left(\frac{g}{r^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right) \psi, \quad (66)$$

il est intéressant de trouver les générateurs associés à ces transformations.

Pour commencer, rappelons ce que sont ces générateurs pour les transformations géométriques habituelles, translations ou rotations. Pour la translation selon x par exemple,

$$\psi(x, y, z) \longrightarrow \psi'(x, y, z) = \psi(x - x_0, y, z) \quad (67)$$

on prend x_0 infiniment petit de sorte que

$$\psi'(x, y, z) \approx \psi(x, y, z) - x_0 \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (68)$$

que l'on écrit :

$$\psi' \approx \left(1 - i\frac{x_0 \hat{p}_x}{\hbar}\right) \psi \quad \text{avec} \quad \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (69)$$

L'opérateur $\hat{p}_x$ introduit ici coïncide avec l'expression habituelle de la composante selon x de l'opérateur impulsion. Les générateurs infinitésimaux des translations sont donc les trois composantes de l'opérateur impulsion $\hat{\mathbf{p}}$, dont on rappelle les relations de commutation :

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (70)$$

Pour une rotation d'angle φ_0 autour de l'axe z , on a en coordonnées sphériques :

$$\psi(r, \theta, \varphi) \longrightarrow \psi'(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \varphi_0), \quad (71)$$

soit pour φ_0 infiniment petit :

$$\psi' \approx \left(1 - i\frac{\varphi_0 \hat{L}_z}{\hbar}\right) \psi \quad \text{avec} \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (72)$$

Les générateurs infinitésimaux des rotations sont donc les trois composantes de l'opérateur moment cinétique $\hat{\mathbf{L}}$, dont on rappelle les relations de commutation :

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k. \quad (73)$$

On peut procéder de la même façon pour les transformations liées à l'invariance conforme que nous avons identifiées plus haut. Les calculs détaillés sont présentés par exemple en appendice de l'article de Saint-Jalm,

Castilho et al. (2019) et nous donnons ici simplement le résultat à l'instant $t = 0$ pour la transformation (63-65). Un choix possible pour les trois générateurs est (Pitaevskii & Rosch 1997)

$$\hat{\mathcal{L}}_1 = \frac{1}{2\hbar\omega} (\hat{H} - 2U_{\text{ho}}) \quad \hat{\mathcal{L}}_2 = \frac{1}{4\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \quad \hat{\mathcal{L}}_3 = \frac{1}{2\hbar\omega} \hat{H} \quad (74)$$

L'étude du groupe associé à cette symétrie conforme est conditionnée par les relations de commutation entre les générateurs

$$[\hat{\mathcal{L}}_1, \hat{\mathcal{L}}_2] = -i\hat{\mathcal{L}}_3 \quad [\hat{\mathcal{L}}_2, \hat{\mathcal{L}}_3] = i\hat{\mathcal{L}}_1 \quad [\hat{\mathcal{L}}_3, \hat{\mathcal{L}}_1] = i\hat{\mathcal{L}}_2 \quad (75)$$

Ces relations semblent voisines de celles du moment cinétique (73), mais la présence du signe $-$ dans la première vient changer significativement l'algèbre. Ces relations sont en fait caractéristiques de l'algèbre $\text{SO}(2,1)$, le groupe de Lorentz à deux dimensions d'espace et une dimension temporelle, alors que l'algèbre du moment cinétique correspond à $\text{SO}(3)$. Elles se généralisent directement au cas à N particules (Werner & Castin 2006).

Exemple : opérateur associé à une dilatation infinitésimale. Considérons la dilatation de paramètre λ très proche de 1 et posons $\gamma_4 = 1/\gamma_1 = 1 + \epsilon$, $\gamma_2 = \gamma_3 = 0$ dans (56,57,59) avec $\epsilon \ll 1$. Au premier ordre en ϵ , on trouve en dimension D :

$$\psi'(\mathbf{r}) = \gamma_4^{D/2} \psi(\gamma_4 \mathbf{r}) = (1 + \epsilon)^{D/2} \psi[(1 + \epsilon) \mathbf{r}] \quad (76)$$

$$\approx \psi(\mathbf{r}) + \epsilon \left(\frac{D}{2} + \mathbf{r} \cdot \nabla \right) \psi(\mathbf{r}) \quad (77)$$

$$= \psi(\mathbf{r}) + \frac{\epsilon}{2} [\nabla \cdot (\mathbf{r} \psi) + \mathbf{r} \cdot \nabla \psi] \quad (78)$$

qui peut également être écrit $(1 + 2i\epsilon\hat{\mathcal{L}}_2)\psi$. Cela montre que l'opérateur $\hat{\mathcal{L}}_2$ est le générateur associé à la transformation d'échelle spatiale introduite plus haut.

3-4 La tour d'états propres

Les relations de commutation entre les opérateurs $\hat{\mathcal{L}}_i$ permettent de dégager une série de propriétés importantes du système, aussi bien sur le plan statique que dynamique (Pitaevskii & Rosch 1997).

Nous allons nous concentrer ici sur la recherche des états stationnaires et nous introduisons pour cela les deux opérateurs

$$\hat{\mathcal{L}}_{\pm} = \hat{\mathcal{L}}_1 \pm i\hat{\mathcal{L}}_2. \quad (79)$$

En utilisant le fait que $\hat{\mathcal{L}}_3$ est proportionnel à $\hat{H}$, il est immédiat de vérifier que

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{L}}_{\pm}] = \pm 2\hbar\omega \hat{\mathcal{L}}_{\pm}. \quad (80)$$

Partant d'un état propre $|\psi\rangle$ de $\hat{H}$ d'énergie E , on déduit de cette relation que

$$\hat{H}(\hat{\mathcal{L}}_+|\psi\rangle) = (E + 2\hbar\omega)(\hat{\mathcal{L}}_+|\psi\rangle) \quad \hat{H}(\hat{\mathcal{L}}_-|\psi\rangle) = (E - 2\hbar\omega)(\hat{\mathcal{L}}_-|\psi\rangle) \quad (81)$$

Par application répétée de $\hat{\mathcal{L}}_{\pm}$, on génère ainsi une tour d'énergies propres $E + 2n\hbar\omega$, $n \in \mathbb{Z}$.

Si on se limite au cas d'un coefficient g suffisamment grand pour éviter la chute vers le centre ($\alpha > -1/4$), on sait qu'il existe un état fondamental bien défini et que les énergies sont bornées inférieurement. La tour ainsi construite est donc semi-infinie, le bas de la tour correspondant à un état tel que $\hat{\mathcal{L}}_-|\psi_{\text{bas}}\rangle = 0$. Là encore, le résultat se transpose tel quel au cas de N particules en interaction présentant une invariance d'échelle (Werner & Castin 2006).

On peut vérifier explicitement l'existence de cette tour d'états pour le cas de l'hamiltonien à une particule (61-62), en considérant par exemple les solutions isotropes. Introduisons la fonction d'onde radiale réduite $u(r) = r\psi(r)$, qui vérifie l'équation aux valeurs propres

$$-u''(r) + \left(\frac{\alpha}{r^2} + r^2 \right) u(r) = \frac{2E}{\hbar\omega} u(r), \quad (82)$$

où les distances sont exprimées en unités de $a_{\text{ho}} = (\hbar/m\omega)^{1/2}$.

Cherchons une solution de cette équation sous la forme

$$u_0(r) = r^{s+1} e^{-r^2/2} \quad (83)$$

où l'enveloppe gaussienne est caractéristique des états propres de l'oscillateur harmonique. On trouve u est solution de (82) si et seulement si

$$E_0 = \hbar\omega \left(s + \frac{3}{2} \right) \quad \text{et} \quad s^2 + s - \alpha = 0 \quad (84)$$

Nous avons déjà rencontré cette équation du second degré lors de notre recherche de la solution d'énergie nulle dans le potentiel en $1/r^2$. Nous allons nous concentrer ici sur le cas $\alpha > -1/4$, de sorte que les racines de cette équation sont réelles. Le cas $\alpha < -1/4$, conduisant à des racines complexes, nécessite une régularisation du potentiel en $1/r^2$ comme nous l'avons vu plus haut.

On doit choisir pour s la plus grande des deux racines possibles :

$$s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}}, \quad (85)$$

cette racine étant toujours supérieure à $-1/2$. L'autre racine est quant à elle toujours inférieure à $-1/2$ et elle conduirait à une intégrale divergente pour l'énergie potentielle moyenne. Notons que pour $g = 0$, on a $s = 0$ et on retrouve l'état fondamental de l'oscillateur harmonique $\psi(r) = e^{-r^2/2}$.

L'état $u(r)$ obtenu n'a pas de nœud en dehors de $r = 0$ et correspond donc à l'état fondamental du problème. Quand l'opérateur $\hat{\mathcal{L}}_+$ agit sur cet état, nous avons vu que cela génère une tour d'états d'énergie

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + s + \frac{3}{2} \right) \quad (86)$$

À chaque étape, l'opérateur $\hat{\mathcal{L}}_+$ fait intervenir $\frac{d^2}{dr^2}$, $r \frac{d}{dr}$, ainsi que la multiplication par r^2 et r^{-2} . On peut alors montrer assez simplement que la fonction d'onde u_n obtenue après n actions de $\hat{\mathcal{L}}_+$ a la structure suivante :

$$u_n(r) = r^{s+1} e^{-r^2/2} P_n(r^2) \quad (87)$$

où P_n est un polynôme de degré n [polynôme de Laguerre généralisé, Werner & Castin (2006)]. La fonction u_n possède n racines positives et il s'agit du n -ème état excité.

L'action de $\hat{\mathcal{L}}_+$ permet donc de générer tout le spectre de $\hat{H}$ pour les états isotropes et d'obtenir les états propres correspondants. On peut également vérifier directement qu'un état de la forme (87) peut être solution de (82) en établissant la relation de récurrence entre les différents coefficients du polynôme P_n .

3-5 Le mode de respiration

Pitaevskii & Rosch (1997) ont montré qu'une manifestation spectaculaire de la symétrie dynamique liée au groupe $SO(2,1)$ était l'existence d'un mode de respiration non amorti (voir également Kagan, Surkov et al. (1996)). Ils ont étudié le cas d'un gaz de Bose à deux dimensions décrit par une théorie de champ classique, mais ce résultat s'étend aux autres systèmes présentant l'invariance conforme comme le gaz de Fermi à 3D dans le régime unitaire (Castin 2004; Werner & Castin 2006), ou encore une assemblée de particules en interaction en $1/r_{ij}^2$, quelle que soit sa dimension d'espace (Benjamin, Quiroga et al. 1996).

Nous allons montrer que l'évolution temporelle du second moment de la position $\langle r^2 \rangle = \frac{2}{m\omega^2} \langle \hat{U}_{ho} \rangle$ est périodique, quelles que soient les conditions initiales. Nous utilisons pour cela les équations du mouvement des générateurs $\hat{\mathcal{L}}_j$ en point de vue de Heisenberg :

$$\frac{d\hat{U}_{ho}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{U}_{ho}] = -i 2\hbar\omega^2 [\hat{\mathcal{L}}_1, \hat{\mathcal{L}}_3] = 2\hbar\omega^2 \hat{\mathcal{L}}_2 \quad (88)$$

et

$$\frac{d\hat{\mathcal{L}}_2}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathcal{L}}_2] = i 2\omega [\hat{\mathcal{L}}_3, \hat{\mathcal{L}}_2] = 2\omega \hat{\mathcal{L}}_1 = \frac{1}{\hbar} (\hat{H} - 2\hat{U}_{ho}). \quad (89)$$

En combinant ces deux équations, on arrive à :

$$\frac{d^2\hat{U}_{ho}}{dt^2} + 4\omega^2 \hat{U}_{ho} = 2\omega^2 \hat{H}. \quad (90)$$

Prenons la moyenne de cette équation sur l'état initial. En utilisant le fait que $\langle \hat{H} \rangle \equiv E$ est une constante du mouvement, on en déduit que le second moment de la position $\langle r^2 \rangle$ obéit à l'équation différentielle :

$$\frac{d^2\langle r^2 \rangle}{dt^2} + 4\omega^2 \langle r^2 \rangle = \text{Constante} \quad (91)$$

Il évolue donc périodiquement en temps avec la période π/ω .

Ce mode a été observé dans le cadre de gaz 2D décrits par l'équation de champ classique de Gross-Pitaevskii, et de faibles déviations dues à la nature quantique du mouvement des atomes ont également été mesurées

(voir cours 2017, chapitre 6). En revanche, il n'a pas encore été mis en évidence expérimentalement pour des particules avec un potentiel d'interaction en $1/r^2$.

4 Le cas uni-dimensionnel

4-1 Le spectre du problème à N corps

Dans un article célèbre, Calogero (1971) s'est intéressé au spectre de N particules bosoniques ou fermioniques évoluant sur un axe et interagissant deux à deux par un potentiel binaire en $V(x_{ij}) \propto x_{ij}^2 + x_{ij}^{-2}$, avec $x_{ij} = x_i - x_j$. Moyennant une transformation des variables, on peut ramener ce problème à une assemblée 1D de N particules évoluant sous l'effet de l'hamiltonien

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 \right) + \sum_{i < j} \frac{g}{(x_i - x_j)^2} \quad (92)$$

Ce problème peut être étendu au cas de particules bougeant librement sur un cercle de périmètre L , avec une interaction en $\sin^{-2}(\pi(x_i - x_j)/L)$ (Sutherland 1972).

Il nous faut tout de suite préciser les conditions aux limites sur les fonctions d'onde $\Psi(x_1, \dots, x_N)$ éligibles. Considérons le cas $N = 2$ pour simplifier. Pour que la moyenne de l'énergie potentielle soit non divergente, il faut que l'intégrale

$$\int \frac{g}{x^2} |\Psi(x, X)|^2 dx dX \quad (93)$$

soit convergente en $x = 0$, avec $x = x_1 - x_2$ et $X = (x_1 + x_2)/2$ qui désignent respectivement la variable relative et la variable du centre de masse. Quelle que soit la valeur non nulle de g , il faut donc que $\Psi(x, X)$ s'annule plus vite que $\sqrt{x}$ quand $x \rightarrow 0$. Cette condition est évidemment absente quand g est strictement nul. Cela entraîne qu'on ne peut pas espérer retrouver le cas de particules sans interaction en prenant la limite $g \rightarrow 0$ dans ce qui suit, contrairement au cas 3D étudié plus haut (cf. §3-4).

Calogero a montré que ce problème est exactement soluble et que son spectre d'énergie est composé de valeurs équidistantes, séparées de $\hbar\omega$

quelle que soit la force du couplage g pourvu que $\alpha > -1/4$:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{N(N-1)}{2} s + \frac{N^2}{2} \right) \quad \text{avec} \quad s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \quad (94)$$

où $\alpha = mg/\hbar^2$ et où n est un entier positif ou nul ($n = 1$ est exclu). Il a également trouvé la forme explicite de l'état fondamental (avec $a_{\text{ho}} = (\hbar/m\omega)^{1/2}$) :

$$\Psi(x_1, \dots, x_N) = \prod_{i < j} (x_i - x_j)^{s+1} \exp \left(- \sum_i x_i^2 / 2a_{\text{ho}}^2 \right) \quad (95)$$

qui est (comme on s'y attend) une fonction d'onde sans nœud en dehors des points $x_i = x_j$. On pourra vérifier à titre d'exercice que cette fonction d'onde est effectivement état propre de (92) avec la valeur propre E_n correspondant à $n = 0$. La dégénérescence de chaque niveau d'énergie donné en (94) est discutée en détail dans Calogero (1971).

Cas de $N = 2$ particules. Dans ce cas, on peut séparer le mouvement du centre de masse, qui est purement harmonique avec un spectre en $(n_1 + 1/2)\hbar\omega$, $n_1 \in \mathbb{N}$, et le mouvement de la particule relative, que nous avons étudié en §3-4. L'équation de Schrödinger régissant le mouvement relatif est

$$-\psi'' + \left(\frac{\alpha}{x^2} + x^2 \right) \psi = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi \quad (96)$$

où $\alpha = 2m_r g/\hbar^2$ et où les distances sont exprimées en unité de $\sqrt{\hbar/m_r\omega}$ avec $m_r = m/2$ la masse relative. La transposition de (84-85) donne pour le mouvement relatif l'état fondamental $\psi(x) = x^{s+1} e^{-x^2/2}$ et l'énergie $\hbar\omega(s+3/2)$ avec s donné en (94), d'où l'énergie totale du fondamental pour l'ensemble des deux mouvements² $E_0 = \hbar\omega(s+2)$. On retrouve bien l'énergie donnée en (94) en y insérant $N = 2$, $n = 0$. L'état fondamental est

$$\begin{aligned} \Psi(x, X) &= x^{s+1} e^{-x^2 m\omega/4\hbar} e^{-X^2 m\omega/\hbar} \\ &= (x_1 - x_2)^{s+1} e^{-m\omega(x_1^2 + x_2^2)/2\hbar}. \end{aligned} \quad (97)$$

2. Quand $g \rightarrow 0$, $s \rightarrow 0$ et cette énergie tend vers $2\hbar\omega$, ce qui correspond au premier état excité de deux particules indépendantes placées dans un potentiel harmonique. On ne retrouve donc pas le fondamental du système à g strictement nul, ce qui est une conséquence de la condition imposée sur les fonctions d'onde, cf. discussion après (93).

Le premier état excité, d'énergie $\hbar\omega(s+3)$ est obtenu en plaçant le centre de masse dans son premier état excité, tout en laissant le mouvement relatif dans son état fondamental. Les états excités du mouvement relatif, d'énergie $\hbar\omega(2n + s + 3/2)$, sont obtenus en construisant la "tour d'états" décrite en § 3-4 (voir aussi Werner (2008), appendice B).

4-2 Dynamique du système

Comme le spectre à N corps est composé de niveaux équidistants séparés de l'énergie $\hbar\omega$, on en déduit que toute observable va avoir une évolution périodique. En effet, un état initial quelconque $|\Phi(0)\rangle$ va se décomposer sur la base des états propres $|\Psi_\nu\rangle$ du système à N corps

$$|\Phi(0)\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu} |\Psi_{\nu}\rangle \quad (98)$$

pour donner l'état à l'instant t (à une phase globale près, sans importance) :

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu} e^{-in_{\nu}\omega t} |\Psi_{\nu}\rangle \quad (99)$$

de sorte que toute valeur moyenne d'opérateur $\hat{O}$ s'écrit :

$$\langle \hat{O} \rangle(t) = \sum_{\nu, \nu'} c_{\nu}^* c_{\nu'} \langle \Psi_{\nu} | \hat{O} | \Psi_{\nu'} \rangle e^{i(n_{\nu} - n_{\nu'})\omega t}. \quad (100)$$

Cette quantité est périodique, de période $2\pi/\omega$. Ce résultat valable à 1D est bien sûr beaucoup plus fort que la périodicité de $\langle r^2 \rangle$ obtenue en § 3-5 (mais celle-ci était valable en dimension quelconque).

4-3 Le mouvement classique

La simplicité remarquable trouvée pour le spectre du mouvement quantique se transcrit au mouvement classique des N particules. Pour $g > 0$, on peut montrer notamment le résultat suivant, illustré sur la figure II.13. Partons d'un état asymptotique ($t \rightarrow -\infty$) où les particules sont loin les unes des autres (énergie d'interaction négligeable) avec une numérotation

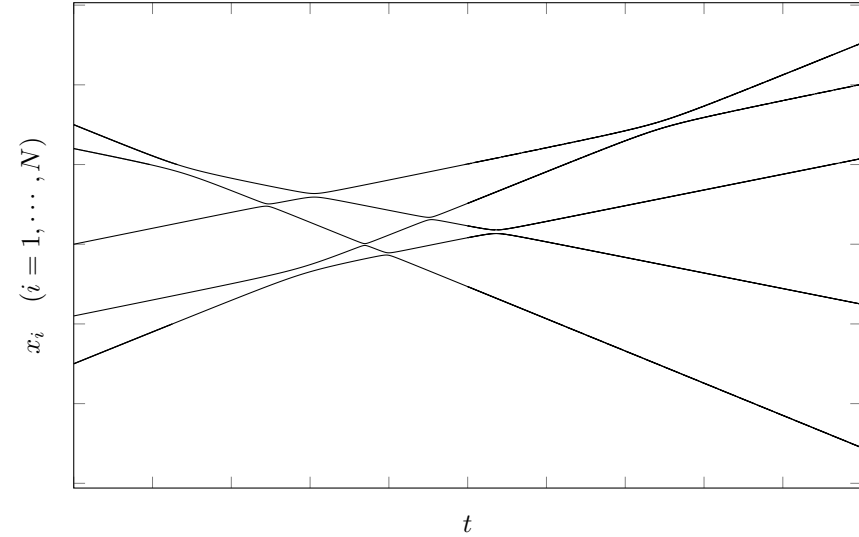


FIGURE II.13. Collision entre $N = 5$ particules interagissant avec le potentiel bilinéaire $g/(x_i - x_j)^2$, avec $g > 0$.

$x_1 < x_2 < \dots < x_N$ et des vitesses initiales $v_1 > v_2 > \dots > v_N$. Les particules se regroupent sous l'effet de leurs vitesses initiales, puis se séparent de nouveau. On trouve pour les vitesses finales v'_i :

$$v'_i = v_{N+1-i}, \quad i = 1, \dots, N \quad (101)$$

c'est-à-dire un simple échange deux-à-deux des vitesses des particules, comme si les particules s'étaient croisées sans interagir !

Ce résultat résulte de l'intégrabilité du système à N corps pour un potentiel en $1/r^2$, pour lequel on peut exhiber N constantes du mouvement (Calogero 2003).

Chapitre III

De l'interaction de contact au potentiel en $1/r^2$

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 introduits 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 débiterons 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.

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 sortante d'amplitude $f(k)$ (figure III.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.

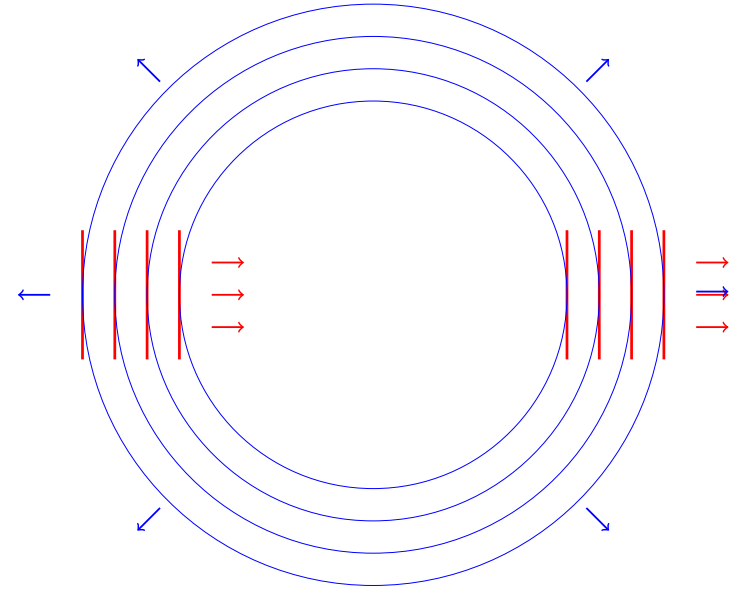


FIGURE III.1. Situation physique décrite par l'état stationnaire de diffusion (1), avec l'onde plane incidente de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et l'onde sphérique sortante e^{ikr}/r , d'amplitude $f(k)$.

L'interaction entre deux particules est donc décrite par l'amplitude de diffusion $f(k)$, qui se met sous la forme (cf. cours 2021, 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 écrirons 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 $n \geq 1$.

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 III.2, haut). On peut montrer que le seuil d'apparition du premier état lié s'écrit (cours 2021, chapitre 3, §3) :

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

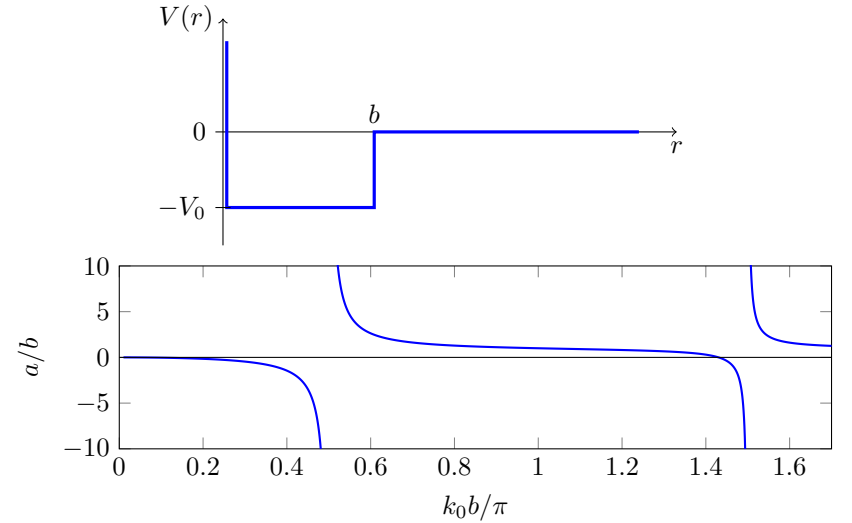


FIGURE III.2. Haut : Puits de potentiel carré de profondeur V_0 et de portée b . Bas : Variation de la longueur de diffusion d'un puits carré avec la profondeur V_0 .

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 III.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 III.3).

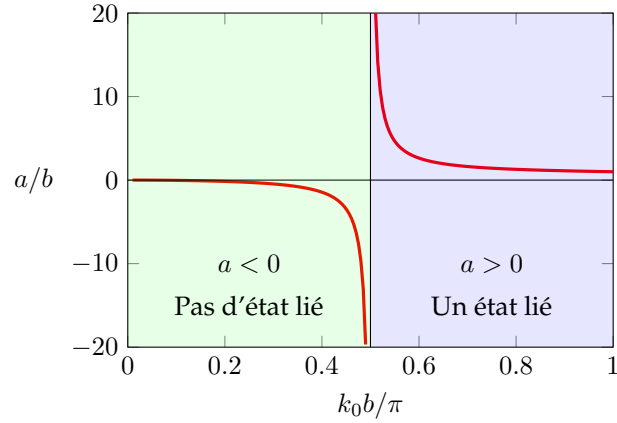


FIGURE III.3. Zoom de la figure III.2 autour du seuil d'apparition du premier état lié, en $k_0 b = \pi/2$.

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.

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)

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

pour former une base de l'espace de Hilbert.

Nous avons étudié en détail les propriétés de ce pseudo-potentiel dans le cours 2021 (chapitre 3, § 4). Nous nous contenterons 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-potentiel :

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

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-potentiel 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

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

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

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

avec le lien entre les coefficients α et β :

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

de sorte que les fonctions physiquement pertinentes s'écrivent :

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

On notera qu'on peut approcher ce pseudo-potentiel 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-potentiel 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

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

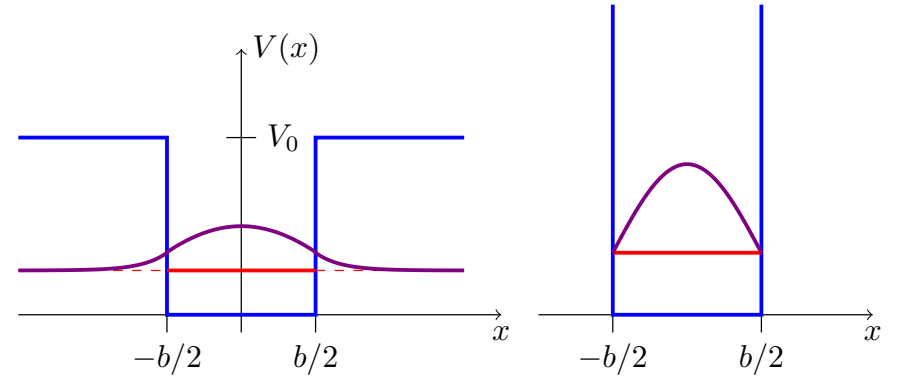


FIGURE III.4. Les deux approches pour traiter un puits carré. Gauche : on traite séparément les régions permises et interdites en utilisant la forme explicite de $V(x)$ dans ces régions, et on raccorde les solutions. Droite : on prend la limite $V_0 \rightarrow \infty$ et on prend en compte le potentiel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

La situation est très voisine de la démarche adoptée pour traiter le puits carré dans les cours de base de mécanique quantique (voir figure III.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 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 multi-

plicatif 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 sou-

haitons 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-potentiel 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-potentiel associé à la longueur de diffusion a .

Nous allons chercher la forme du ou des états liés en traitant l'action du pseudo-potentiel 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 :

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

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

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

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

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 $\mathbf{r} \rightarrow -R/2$

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

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 :

$$\left| \begin{array}{cc} \frac{1}{a} - \kappa & \frac{e^{-\kappa R}}{R} \\ \frac{e^{-\kappa R}}{R} & \frac{1}{a} - \kappa \end{array} \right| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{a} - \kappa = \pm \frac{e^{-\kappa R}}{R} \quad (34)$$

ce qui se ramène aux deux équations suivantes :

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

et

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

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 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, 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'attend pour tout 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, $|a| = +\infty$.

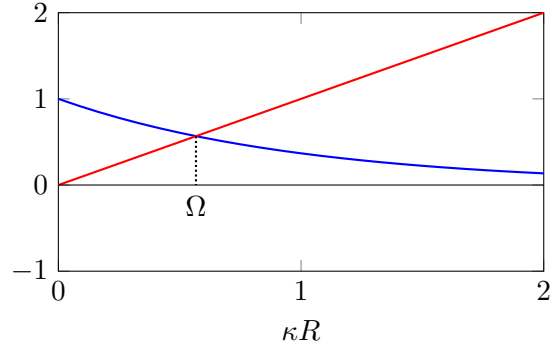


FIGURE III.5. Résolution graphique de l'équation (35) dans le cas $|a| = +\infty$, c'est-à-dire $\kappa R = \exp(-\kappa R)$. On trouve une et une seule solution $\kappa R = \Omega$ avec $\Omega \approx 0.567143$.

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 :

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

et

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

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.

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 :

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

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

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

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

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 III.6] définie comme l'unique solution $W(x)$ pour $x \geq -e^{-1}$ de l'équation

$$We^W = x. \quad (41)$$

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 :

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

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

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

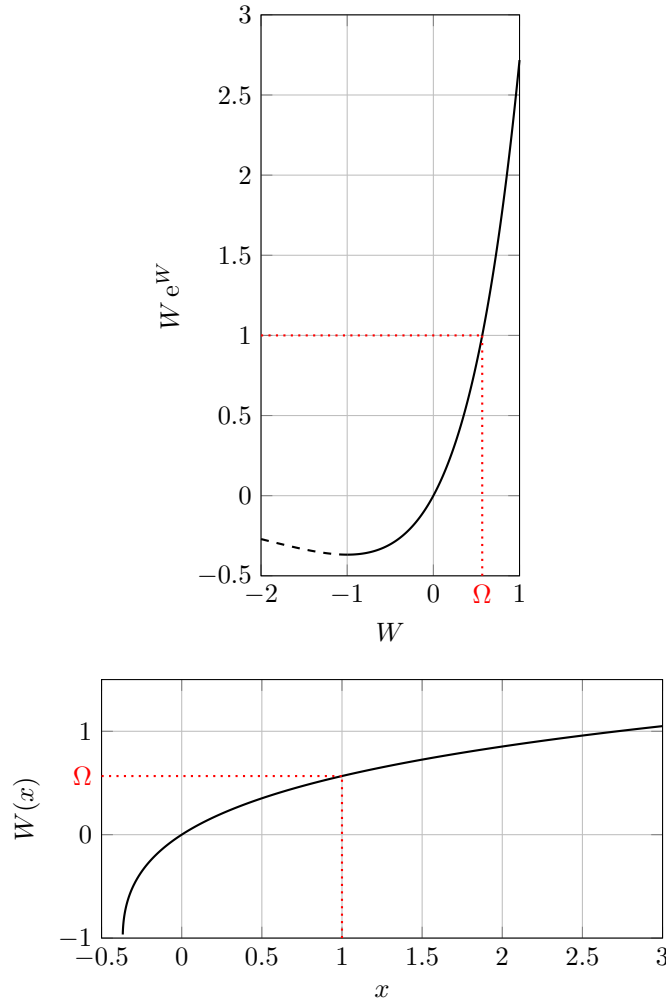


FIGURE III.6. Haut : fonction $W \rightarrow W e^W$. Bas : la fonction de Lambert $W(x)$ est l'inverse de la fonction tracée en haut, définie sur le domaine $x \geq -e^{-1}$.

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 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 III.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

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

ou encore

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

ce qui conduit à :

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

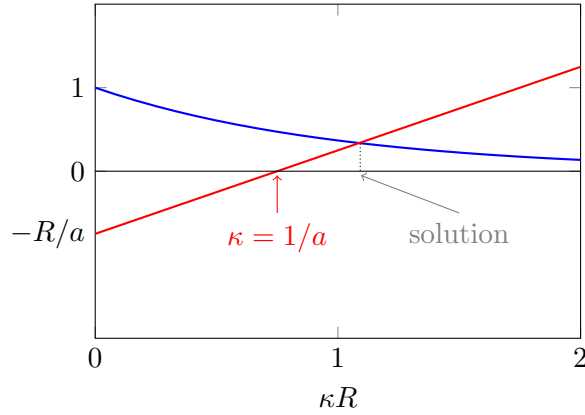


FIGURE III.7. Résolution graphique de l'équation (44) dans le cas $a > 0$ pour l'orbitale liante, c'est-à-dire $x - x_0 = e^{-x}$ avec $x = \kappa R$ et $x_0 = R/a$. On trouve une et une seule solution avec $\kappa > 1/a$ pour toute valeur de R .

L'énergie correspondante $E(R) = -\hbar^2 \kappa^2(R)/2m$ pour le système mMM est tracée en trait continu sur la figure III.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

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

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

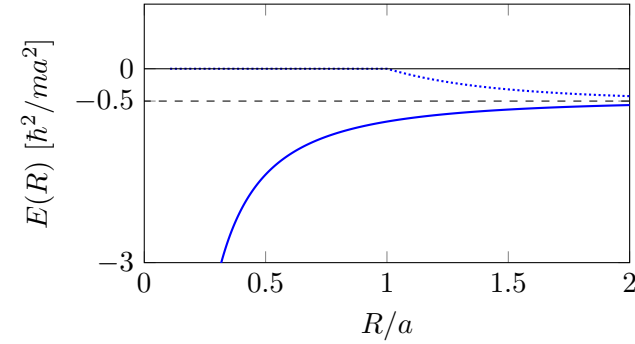


FIGURE III.8. Pour $a > 0$, variation de l'énergie $E(R)$ de la particule légère (en unités de $\hbar^2/ma^2$) en fonction de la distance R (en unités de a) entre les deux particules lourdes. Pour l'orbitale liante [$A = B$ dans (27) et solution de (44)], l'énergie représentée en trait continu est abaissée 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.

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

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

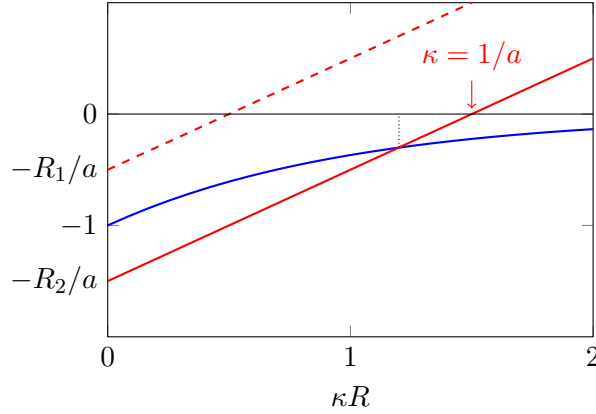


FIGURE III.9. Résolution graphique de l'équation (44) dans le cas $a > 0$ pour l'orbitale antiliante, c'est-à-dire $x - x_0 = -e^{-x}$ avec $x = \kappa R$ et $x_0 = R/a$. On a pris deux valeurs de R , $R_1 < a$ et $R_2 > a$. On trouve une solution pour R_2 (droite en trait continu), mais pas pour R_1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

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 III.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 III.8, courbe pointillée).

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 :

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

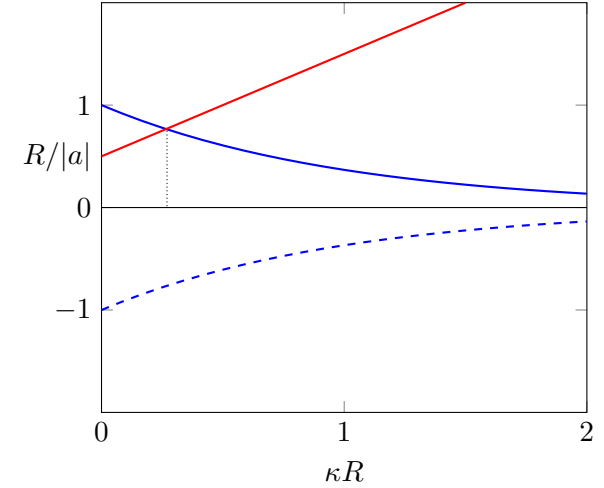


FIGURE III.10. Résolution graphique de l'équation (54) dans le cas $a < 0$, c'est-à-dire $x + x_0 = e^{-x}$ pour l'orbitale liante, et $x + x_0 = -e^{-x}$ pour l'orbitale antiliante ($x = \kappa R$, $x_0 = R/|a|$). La solution pour l'orbitale liante n'existe que si $R/|a| < 1$. Il n'y a jamais de solution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

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 III.10 montre qu'il y a une solution $\kappa > 0$ à 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 III.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 Lambert et on trouve :

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

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 $\pm R/2$. On se pose la question de la stabilité de cet édifice : son énergie s'abaisse-t-elle quand on approche les particules lourdes

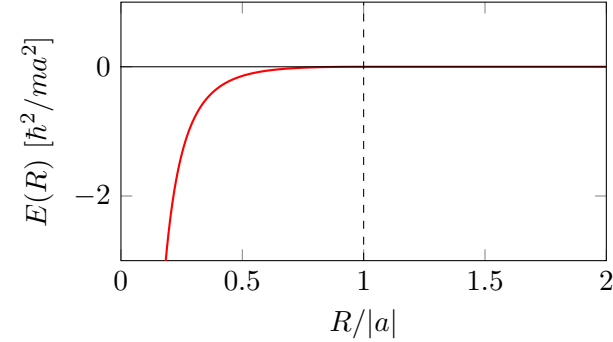


FIGURE III.11. Pour $a < 0$, variation de l'énergie $E(R)$ de la particule légère (en unités de $\hbar^2/ma^2$) en fonction de la distance R (en unités de a) entre les deux particules lourdes. On rappelle que dans ce cas $a < 0$, le dimère mM n'est pas lié et l'énergie du système mM est toujours positive.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

depuis $R = \infty$? Cette question est équivalente, pour une interaction en pseudo-potential, 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

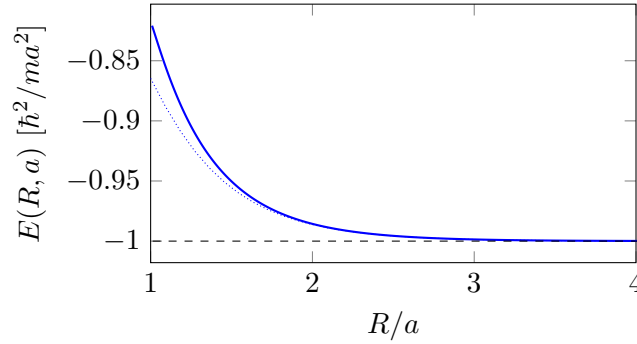


FIGURE III.12. Énergie du système $mmMM$ quand on place les deux particules légères sur les deux orbitales liante et antiliante. Les particules lourdes M sont supposées fixes et séparées par une distance R . Le calcul est fait pour $0 < a < R$, condition nécessaire pour que l'orbitale antiliante existe.

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 $a > 0$, 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 III.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 $R \gg a$ 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 effectivement une fonction décroissante de R et qui conduit bien à une dissociation en deux dimères. Cette énergie est tracée en pointillé sur la figure III.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 2022, 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 $\mathbf{r} = \pm \mathbf{R}/2$ 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 $\mathbf{r} = 0$. 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

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

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-potential localisés en $+\mathbf{R}/2$ et $-\mathbf{R}/2$ (c'est-à-dire les deux particules M supposées fixes), on peut 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 :

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

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 III.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 III.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 $r \approx a$.

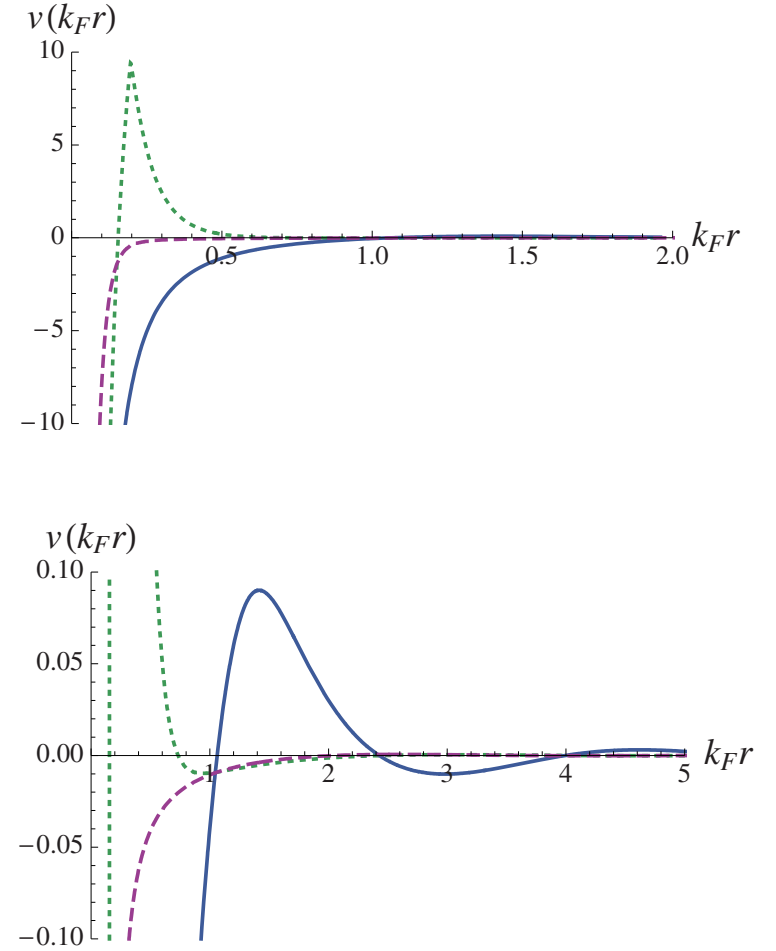


FIGURE III.13. Energie d'interaction effective $v(k_F R)$ entre deux particules lourdes plongées dans un bain de particules fermioniques polarisées. Trait tireté : $(ak_F)^{-1} = -5$, trait plein : régime unitaire $(ak_F)^{-1} = 0$, trait pointillé : $(ak_F)^{-1} = 5$. La figure du bas est un agrandissement 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 lui aussi 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 $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$. 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 la généralisation 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 s'assurer 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 positives possibles pour κ , et donc une série d'états liés 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 $m \cdots m M \cdots M$. 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 uns 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.

Chapitre IV

L'effet Efimov pour un système léger-lourd-lourd

Dans ce chapitre, nous continuons notre étude du problème à trois corps, composé de deux particules lourdes de masse M et d'une particule légère de masse m (figure IV.1). Comme au chapitre précédent, nous supposons que les particules lourdes n'interagissent pas entre elles, en dehors d'un potentiel de cœur dur qui les empêche de s'approcher à une distance inférieure à R_0 . L'interaction mM est décrite par les conditions aux limites de Bethe–Peierls pour une longueur de diffusion a , qui peut être positive, négative, ou encore infinie pour le cas résonant.

Au chapitre précédent, nous avons supposé que les particules lourdes étaient au repos en $\pm \mathbf{R}/2$ et nous avons déterminé les états d'énergie possibles de la particule légère, en particulier son état fondamental d'énergie $E(R) \leq 0$. Nous allons maintenant nous intéresser à la dynamique des particules lourdes en nous plaçant dans le cadre de l'approximation de Born–Oppenheimer (Efimov 1973; Fonseca, Redish et al. 1979); cela signifie que nous considérons que ces deux particules lourdes évoluent dans le potentiel effectif :

$$V(R) = E(R) \quad \text{si } R > R_0 \quad (1)$$

$$V(R) = +\infty \quad \text{si } R < R_0 \quad (2)$$

où le cœur dur en R_0 (avec $R_0 \ll |a|$) empêche la "chute sur le centre" qui peut se produire pour un potentiel en $1/R^2$ (cf. chapitres 1 et 2). Nous allons voir que les deux particules lourdes peuvent ainsi se lier l'une à l'autre grâce à l'échange de la particule légère : le fait que cette particule légère puisse sauter d'un atome lourd à l'autre crée en effet une interaction effec-

tive attractive entre ces deux atomes lourds.

L'approximation de Born–Oppenheimer repose sur l'inégalité $m \ll M$, qui entraîne que l'échelle de temps associée au mouvement de la particule légère est beaucoup plus courte que celle associée aux atomes lourds. Cela assure que la particule légère suit adiabatiquement le mouvement des particules lourdes. Par rapport à l'approximation adiabatique standard, on fait dans l'approximation de Born–Oppenheimer l'hypothèse supplémentaire que l'on peut négliger le rôle des potentiels géométriques scalaire et vectoriel (ce dernier étant notamment à l'origine de la phase de Berry). Nous reviendrons sur le rôle de ces potentiels au chapitre 6, quand nous analyserons l'origine du "paramètre à trois corps", qui généralise la notion de cœur dur quand les trois particules sont identiques.

Rappelons les principaux résultats du chapitre précédent concernant l'énergie $E(R)$ de l'état fondamental de la particule légère, selon la valeur de la longueur de diffusion a (figure IV.2) :

- Dans le cas $a = \pm\infty$, l'énergie $E(R)$ varie comme $1/R^2$, avec un coefficient qui fait intervenir la racine de l'équation transcendante $x = e^{-x}$. Cette racine est notée $\Omega \approx 0.567\,143$ et on a trouvé

$$a = \pm\infty : \quad E(R) = -\frac{\hbar^2 \Omega^2}{2mR^2}. \quad (3)$$

- Pour une longueur de diffusion $a < 0$, l'énergie $E(R)$ est strictement

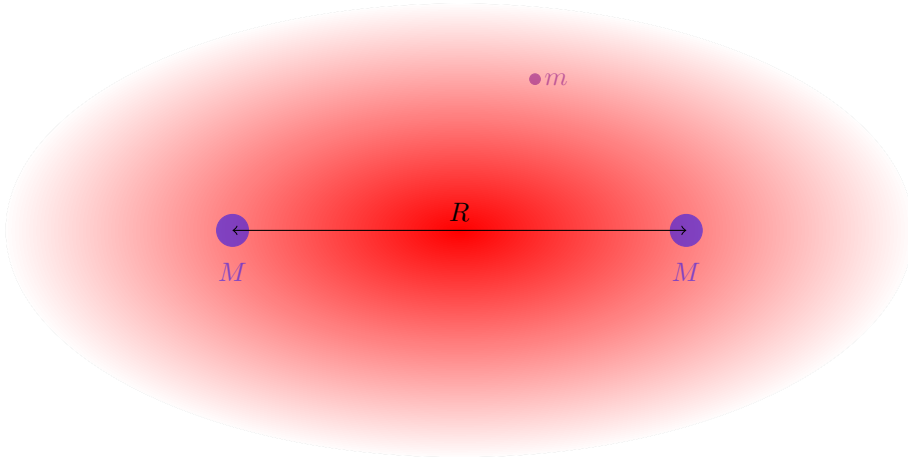


FIGURE IV.1. Le problème mMM étudié dans ce chapitre. L'interaction MM est supposée entièrement due à la présence de la particule légère, en dehors d'une interaction de cœur dur qui empêche les deux particules lourdes de s'approcher à moins de R_0 l'une de l'autre.

nulle pour $R \geq |a|$. En dessous de cette valeur, elle est donnée par

$$a < 0, \quad R < |a| : \quad E(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{|a|} - \frac{W(e^{R/|a|})}{R} \right]^2 \quad (4)$$

où $W(x)$ est la fonction de Lambert, solution de $We^W = x$. Rappelons qu'il n'y a pas de dimère lié mM dans ce cas pour une interaction mM décrite par le pseudo-potentiel (*i.e.* par les conditions aux limites de Bethe–Peierls).

- Pour une longueur de diffusion $a > 0$, nous avons montré pour l'orbitale liante que

$$a > 0 : \quad E(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{a} + \frac{W(e^{-R/a})}{R} \right]^2. \quad (5)$$

En particulier, pour $R \rightarrow +\infty$, on retrouve l'énergie du dimère lié mM :

$$E_{\text{dim}} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (6)$$

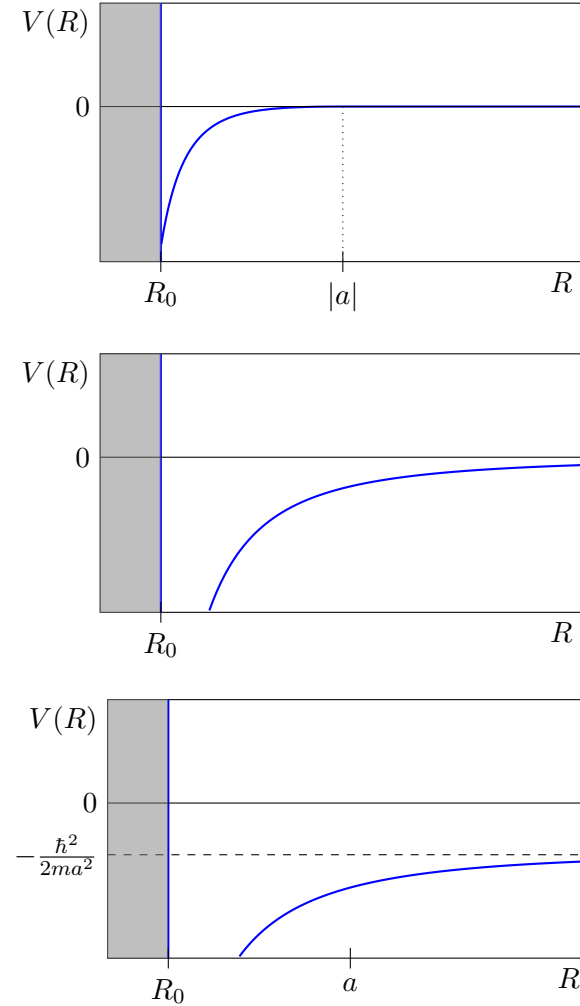


FIGURE IV.2. Les trois cas possibles pour le potentiel effectif $V(R)$ généré entre les deux particules lourdes par échange de la particule légère [Eqs. (1-2)]. Haut : cas $a < 0$, pour lequel $V(R)$ est strictement nul pour $R > |a|$ [Eq. (4)]. Milieu : cas résonant $a = \pm\infty$ conduisant à $V(R) \propto 1/R^2$ en dehors du cœur dur [Eq. (3)]. Bas : cas $a > 0$, pour lequel le dimère lié mM d'énergie $-\hbar^2/2ma^2$ existe [Eq. (5)].

Rappelons que la condition $m \ll M$ entraîne que la masse réduite du système mM est voisine de m .

Pour analyser le mouvement des deux corps de masse M , nous nous plaçons comme toujours dans le référentiel de leur centre de masse et nous nous intéressons à la dynamique de la particule relative de coordonnées $\mathbf{R}$, de masse réduite $M/2$, et soumise au potentiel $V(R)$ défini en (1-2). Ce potentiel étant invariant par rotation, on cherche une base propre commune à l'hamiltonien, à $\hat{L}^2$ et à $\hat{L}_z$. La partie angulaire est donnée par une harmonique sphérique et l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde radiale réduite $u(R) = R\psi(R)$ s'écrit, pour une longueur de diffusion a donnée :

$$-\frac{\hbar^2}{M}u''(R) + \left(V(R) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{MR^2}\right)u(R) = \mathcal{E}u(R). \quad (7)$$

Nous allons nous intéresser aux possibles états liés, d'énergie $\mathcal{E} < 0$. Rappelons que si les particules lourdes sont des bosons (resp. fermions) polarisés, seuls les canaux de ℓ pair (resp. impair) sont autorisés. Si ces particules sont discernables, par leur état de spin par exemple, il n'y a pas de contrainte sur ℓ .

En pratique, puisque nous nous intéressons principalement à l'état fondamental du système (à M/m et a fixés), nous allons nous concentrer sur les états $\ell = 0$ pour des bosons et $\ell = 1$ pour des fermions polarisés, les autres canaux de moment cinétique correspondant à une énergie minimale notablement plus élevée.

1 L'effet Efimov pour $a = \infty$

1-1 Le collapse de Thomas

L'article de Thomas (1935) constitue une des toutes premières applications de la physique quantique au problème à trois corps, en l'occurrence dans un contexte de physique nucléaire. Thomas s'intéressait à la stabilité du noyau de tritium (1 proton, 2 neutrons) et il a montré que l'énergie de l'état fondamental de ce système ne pouvait pas s'écrire uniquement en fonction de la longueur de diffusion $p - n$, mais qu'il devait faire intervenir nécessairement la portée finie des forces nucléaires.

Nous n'allons pas reproduire ici l'intégralité du raisonnement de Thomas, qui est relativement complexe. Nous allons nous limiter au cas de deux particules lourdes de masse M , supposées être des bosons sans spin et n'interagissant pas l'une avec l'autre. La particule légère de masse m interagit de manière résonante avec chaque particule lourde.

Comme nous avons déjà eu l'occasion de le mentionner, une manière simple de décrire l'interaction quasi-résonante entre deux particules (ici mM) consiste à prendre un puits de potentiel carré $V(r)$ de profondeur V_0 et de portée b , et à se placer au voisinage du seuil d'apparition du premier état lié :

$$k_0 b \approx \frac{\pi}{2} \quad \text{avec} \quad k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar. \quad (8)$$

La limite d'un potentiel de portée nulle et de longueur de diffusion fixée (conditions aux limites de Bethe–Peierls) est alors obtenue en prenant $b \rightarrow 0$ et $(V_0, k_0) \rightarrow \infty$ tout en maintenant

$$a = b - \frac{\tan(k_0 b)}{k_0} \quad (9)$$

constante (cours 2021, chap. III, § 3.1). Rappelons de nouveau qu'on prend ici $m \ll M$, ce qui entraîne que la masse réduite de la paire mM est à peu près égale à m (ce n'était pas le cas pour le problème considéré par Thomas).

Si on met les deux particules lourdes au même point de l'espace (c'est possible puisqu'on a supposé qu'elles n'interagissent pas, on oublie donc le cœur dur en R_0 pour un instant), le potentiel ressenti par la particule légère est doublé : $V(r) \rightarrow 2V(r)$, c'est-à-dire un potentiel de portée b et de profondeur $2V_0$. Ce potentiel admet alors un état lié d'énergie proportionnelle à $-V_0$ (en fait $\approx -0.36 V_0$, figure IV.3), de sorte que son énergie va tendre vers $-\infty$ quand on va prendre la limite d'un potentiel de portée nulle : c'est le résultat obtenu par Thomas.

Il faut donc prendre en compte la portée du potentiel (ou un autre "paramètre à trois corps") pour que le problème ne soit pas singulier. Dans ce qui va suivre, c'est le rayon R_0 du potentiel de cœur dur entre les deux particules lourdes qui va jouer ce rôle.

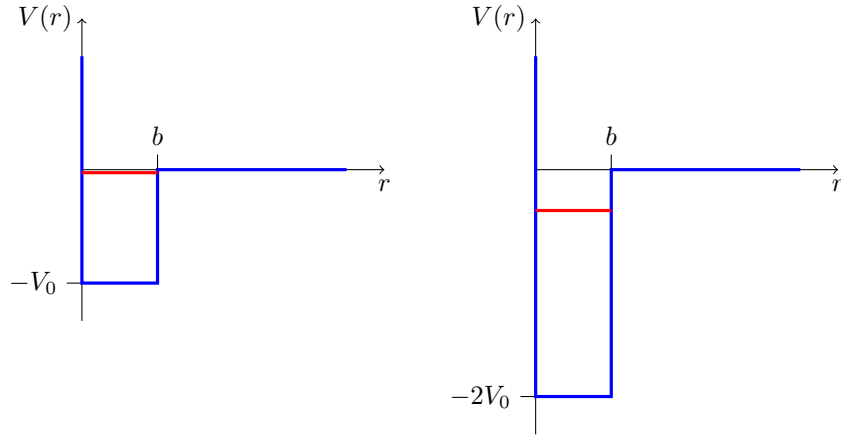


FIGURE IV.3. Gauche : puits de potentiel carré au seuil d’apparition du premier état lié, avec $k_0 b \approx \pi/2$, $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$. Droite : puits de potentiel de même portée b , mais de profondeur double. Ce puits admet un état lié d’énergie $\propto V_0$.

1-2 Le cas des bosons : onde s

Nous revenons maintenant au problème à trois corps décrit dans le cadre de l’approximation de Born–Oppenheimer, en nous concentrant ici sur le cas le plus “spectaculaire”, celui où la longueur de diffusion a est infinie, c’est-à-dire où l’état lié du dimère mM est sur le point d’apparaître.

Dans ce cas, le potentiel $V(R)$ à prendre en compte a été donné en (3). Il est attractif et varie comme $1/R^2$ à toutes les échelles de longueur. Pour un canal de moment cinétique non nul, il faut lui ajouter le potentiel centrifuge $V_{\text{centrif}}(R) = \hbar^2 \ell(\ell + 1)/MR^2$ [cf. (7)]. En reprenant les notations des chapitres 1 et 2 avec ici $g = -\hbar^2 \Omega^2/2m$, l’ensemble s’écrit

$$R > R_0 : \quad V_{\text{tot}}(R) = V(R) + V_{\text{centrif}}(R) = \alpha \frac{\hbar^2}{MR^2} \quad (10)$$

avec

$$\alpha = -\frac{M}{2m} \Omega^2 + \ell(\ell + 1) \quad (11)$$

Comme ce potentiel varie comme $1/R^2$ pour des distances arbitrairement grandes, nous pouvons donc reprendre telles quelles les conclusions du chapitre 2 :

- Il peut exister un état d’énergie négative dans le canal de moment cinétique ℓ si $\alpha < -1/4$, c’est-à-dire :

$$\text{état lié si :} \quad \frac{M}{2m} \Omega^2 > \ell(\ell + 1) + \frac{1}{4} = \left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2. \quad (12)$$

Intéressons-nous au canal $\ell = 0$ qui conduit aux états d’énergie la plus basse possible. En utilisant $\Omega^2 \approx 0.322$, cette condition se réécrit $M/m > 1.6$, condition qui est évidemment remplie ici puisqu’on a supposé $M \gg m$ pour utiliser l’approche de Born–Oppenheimer. Il y a donc toujours au moins un état lié à trois corps dans le cas de particules lourdes bosoniques.

- La régularisation de $V(R)$ à courte distance est assurée par l’hypothèse d’un potentiel de cœur dur au rayon R_0 entre les deux particules lourdes. Pour fixer les idées, nous pouvons prendre R_0 de l’ordre du rayon de van der Waals R_{vdW} . En réalité, les deux atomes lourds peuvent s’approcher l’un de l’autre à des distances plus courtes que cela, mais la physique en jeu dépasse alors celle de l’universalité que nous cherchons à décrire ici en modélisant les interactions mM par le pseudo-potentiel.
- Une fois cette régularisation effectuée, on peut trouver l’état fondamental du mouvement des deux particules lourdes. Au dessus de cet état fondamental, on va trouver une infinité d’états liés dont les énergies formeront en bonne approximation (d’autant meilleure que l’on s’approche de la limite de dissociation) une suite géométrique de raison $1/\lambda^2$ avec pour $\ell = 0$:

$$\lambda = e^{\pi/|s_0|} \quad \text{avec} \quad s_0 = \left(\alpha + \frac{1}{4}\right)^{1/2} \in i\mathbb{R} \quad (13)$$

ou encore

$$\lambda = e^{\pi/|s_0|} \quad \text{avec} \quad |s_0| = \left(\frac{M}{2m} \Omega^2 - \frac{1}{4}\right)^{1/2} \quad (14)$$

La variation du paramètre d’échelle λ avec M/m est tracé en figure IV.4.

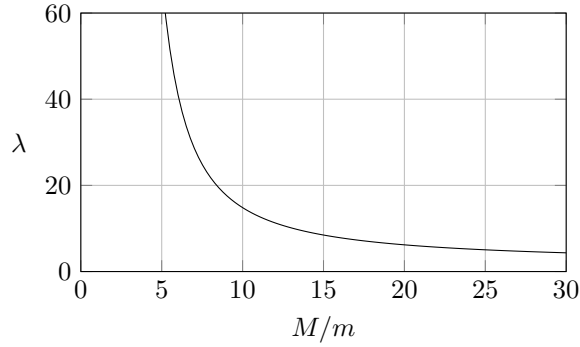


FIGURE IV.4. Variation du paramètre d’échelle avec le rapport de masse M/m , calculé dans le cadre de l’approximation de Born–Oppenheimer. Pour une comparaison avec le résultat exact, voir par exemple Petrov (2012).

On arrive ainsi à la conclusion trouvée initialement par Efimov : alors que le potentiel à deux corps n’admet pas d’états liés ($a = \infty$), on peut produire une infinité d’états liés à trois corps, ces états étant reliés les uns aux autres par une invariance d’échelle. Nous avons tracé sur la figure IV.5 la position des quatre premiers états liés dans le cas $M/m = 20, \ell = 0$, correspondant à peu près à la situation rencontrée expérimentalement pour un mélange de ${}^6\text{Li}$ et ${}^{133}\text{Cs}$. On vérifie bien la loi d’échelle $\mathcal{E}_n/\mathcal{E}_{n+1} \approx e^{2\pi/|s_0|} \approx 38$ avec $|s_0| \approx 1.7$ pour ce rapport M/m .

1-3 Le paramètre à trois corps R_0

Nous avons introduit ci-dessus la longueur R_0 , que nous avons assimilée à un cœur dur empêchant les deux particules lourdes de s’approcher arbitrairement près l’une de l’autre. L’introduction d’un tel paramètre est nécessaire dans le problème à trois corps pour assurer la régularité de la solution.

Ce paramètre additionnel par rapport à la longueur de diffusion à deux corps est appelé de manière générique *paramètre à trois corps*. Nous conser-

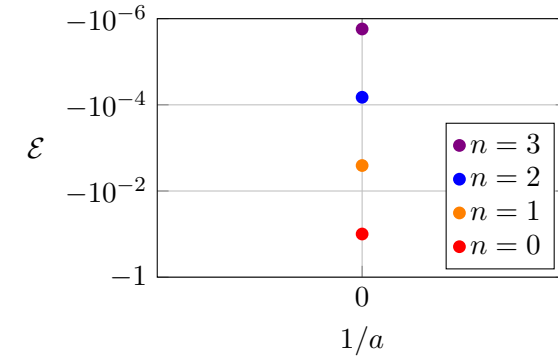


FIGURE IV.5. Cas résonnant : positions des énergies $\mathcal{E}$ des premiers états liés du trimère mMM obtenus à partir de (7). On a pris ici $a = \infty$ et $M/m = 20$, correspondant à peu près au rapport $M({}^{133}\text{Cs})/m({}^6\text{Li}) = 22.2$. Les énergies (exprimées en unité de $\hbar^2/MR_0^2$) forment en très bonne approximation une progression géométrique de raison $e^{-2\pi/|s_0|} \approx 1/38$ ($|s_0| \approx 1.7$).

verons ici cette dénomination, même si dans le cas qui nous intéresse, il s’agit plutôt d’une propriété du système binaire MM . La détermination précise de ce paramètre pour le cas mMM a été menée par Wang, Wang et al. (2012), en utilisant des potentiels de Lennard-Jones pour modéliser les interactions mM et MM . Ces auteurs ont dégagé une universalité pour ce paramètre en le reliant au rayon de van der Waals R_{vdW} pour l’interaction MM [voir également l’article de Zhao, Han et al. (2019), qui propose un résultat simple dans le cas d’une résonance pour a_{MM}]. Nous reviendrons sur l’origine physique de cette universalité au chapitre 6 en considérant le cas de trois particules identiques.

1-4 Le cas des fermions polarisés : onde p

Pour des fermions polarisés, le nombre quantique ℓ associé au moment cinétique ne peut prendre que des valeurs impaires. L’état d’énergie le plus bas est obtenu pour le canal $\ell = 1$ et la condition (12) s’écrit alors $\frac{M}{2m} \Omega^2 > \frac{9}{4}$

ou encore :

$$\text{Fermions polarisés en onde } p : \quad \frac{M}{m} > 14.0 \quad (15)$$

Il s'agit d'une contrainte forte qui réduit considérablement le choix des espèces atomiques utilisables. Un triplet candidat possible est ^{171}Yb – ^{171}Yb – ^6Li conduisant à $M/m = 28.5$ (Khramov, Hansen et al. 2014). Notons que nous avons obtenu le résultat (15) de manière analytique en utilisant l'approximation de Born–Oppenheimer. Un traitement numérique exact, du type de celui que nous aborderons au chapitre suivant, conduit à une limite très voisine : $M/m = 13.606\,966$ (Kartavtsev & Malykh 2007).

Les autres canaux de moment cinétique $\ell \geq 3$ ne sont pas utilisables en pratique, à moins de modifier artificiellement la masse d'une espèce atomique en la confinant dans un réseau optique par exemple.

2 Autour de la résonance : $a < 0$ ou $a > 0$

2-1 Le cas $a < 0$ et les états borroméens

Passons maintenant au cas où la longueur de diffusion caractérisant l'interaction mM est négative. Dans le modèle du pseudo-potentiel, cela signifie que bien qu'attractive, cette interaction est trop faible pour lier le dimère mM . Nous allons voir maintenant que si $|a|$ est assez grande, c'est-à-dire si $1/a$ n'est pas trop loin de 0, on peut malgré tout observer des états liés du trimère, c'est-à-dire des états à trois corps d'énergie $\mathcal{E}$ négative.

Cette situation est souvent qualifiée de borroméenne à l'image des anneaux représentés sur la figure IV.6. Les trois particules mises ensemble peuvent former un édifice stable, mais une paire quelconque de deux particules ne peut en revanche former un état lié.

Pour simplifier l'analyse, nous allons nous concentrer dans ce qui suit sur le cas des bosons, en nous limitant au canal de moment cinétique $\ell = 0$. Nous avons rappelé en introduction le potentiel $V(R)$ dans ce cas [cf. (4)] et ce potentiel est tracé sur la figure IV.2. Nous détaillons sur la figure IV.7 le résultat d'une recherche numérique des états propres u_n et des énergies

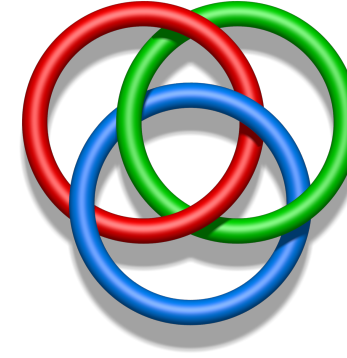


FIGURE IV.6. Anneaux borroméens : ces trois anneaux ne peuvent être détachés par une déformation continue, mais l'ouverture d'un des cercles libère également les deux autres (Figure : Wikipedia).

propres associées $\mathcal{E}_n$ de l'équation de Schrödinger radiale (7) pour un moment cinétique $\ell = 0$ et $M/m = 20$.

Plus précisément, nous traçons en coordonnées linéaires ou logarithmiques la variation avec $1/a$ de l'énergie du niveau fondamental $n = 0$ et des trois premiers états excités $n = 1, 2, 3$. Une conclusion immédiatement visible sur cette figure est que le trimère mMM n'est pas toujours stable. Pour $R_0/a < -0.093$, c'est-à-dire $|a| < 10.8 R_0$, il n'y a aucun état lié mMM . Le premier état lié $n = 0$ apparaît pour $a \approx -10.8 R_0$ et il reste l'unique solution jusqu'à $a \approx -72.5 R_0$, valeur pour laquelle un premier état lié excité ($n = 1$) apparaît également. Un deuxième état excité apparaît pour $a \approx -455 R_0$ et ainsi de suite. Plus on se rapproche de la limite résonante $|a| = +\infty$, plus le nombre d'états liés est important. Plutôt que l'énergie, on peut préférer tracer le module du nombre d'onde $\kappa = \sqrt{M|\mathcal{E}|}/\hbar$ en fonction de R_0/a , ce qui est fait en figure IV.8 (on trace en fait $\sqrt{\kappa} \propto |\mathcal{E}|^{1/4}$ en fonction de $\sqrt{1/a}$ pour "écraser" un peu plus les courbes et mieux distinguer plusieurs branches).

Un examen attentif de la figure IV.7 fait apparaître une symétrie d'échelle (homothétie) pour différentes quantités. On retrouve par exemple la loi d'échelle $\mathcal{E}_{n-1}/\mathcal{E}_n \approx 38$ quand $|a| \rightarrow \infty$, déjà obtenue au paragraphe précédent pour cette valeur de M/m . Mais on constate également une ho-

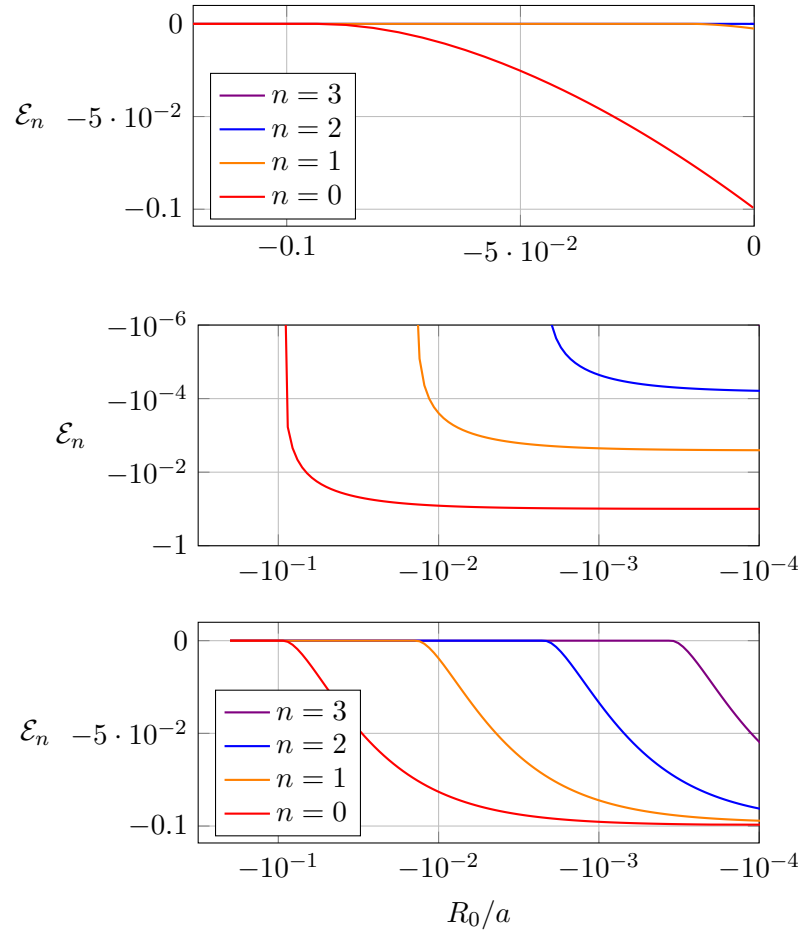


FIGURE IV.7. Cas borroméen ($a < 0$) : variation des énergies $\mathcal{E}_n(a)$ des premiers états liés du trimère mMM en fonction de la longueur de diffusion a , supposée ici négative, pour $M/m = 20$. Les mêmes données sont tracées en coordonnées lin-lin (haut), log-log (milieu) et semi-log (bas). Les énergies sont exprimées en unité de $\hbar^2/MR_0^2$. Pour améliorer la lisibilité du tracé du bas, l'énergie du niveau n a été multipliée par λ^{2n} avec $\lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 6.2$.

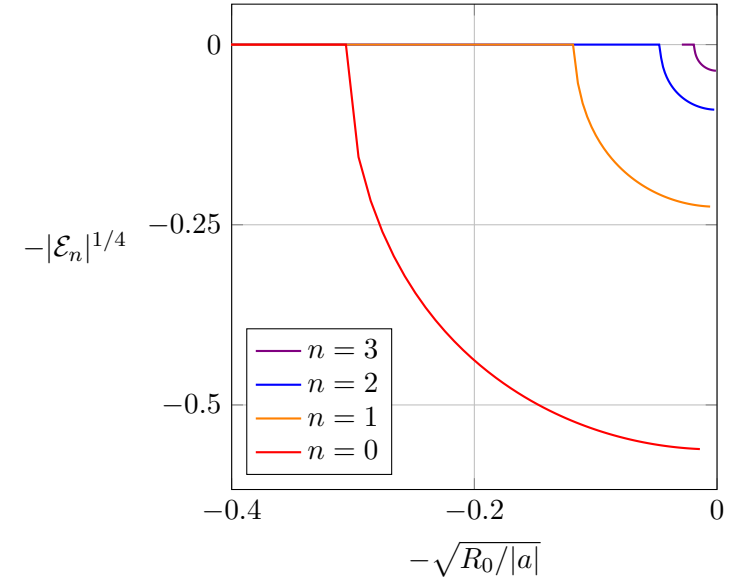


FIGURE IV.8. Cas borroméen ($a < 0$) : variation de $|\mathcal{E}_n|^{1/4}$ avec $\sqrt{R_0/|a|}$ pour $M/m = 20$. L'énergie est exprimée en unité de $\hbar^2/MR_0^2$.

mothétie sur les valeurs critiques $a_-^{(n)}$ auxquelles les différents états liés apparaissent, avec $a_-^{(n)}/a_-^{(n-1)} \approx 6.2$. Nous allons chercher à rendre compte de ces symétries d'échelle et montrer le résultat général :

$$\mathcal{E}_{n-1}(a) = \lambda^2 \mathcal{E}_n(\lambda a) \quad \text{avec} \quad \lambda = e^{\pi/|s_0|} \quad (16)$$

Les deux homothéties mentionnées ci-dessus s'en déduiront en prenant les cas particuliers $|a| = +\infty$ pour la première, et $\mathcal{E}_n = 0$ pour la seconde (rappelons que pour le rapport de masse M/m choisi pour la figure IV.7, on a $|s_0| \approx 1.72$ et $\lambda \approx 6.2$).

Nous allons maintenant expliquer l'origine de ces deux homothéties. Les arguments utilisés sont voisins de ceux développés au chapitre 2, mais ils nécessitent un léger aménagement du fait que le potentiel n'est pas proportionnel à $1/R^2$ jusqu'à $R = \infty$.

Pour progresser, nous remarquons tout d'abord que dans le domaine $x = R/|a| \ll 1$, la fonction de Lambert vaut $W(e^{R/|a|}) \approx W(1) = \Omega$ et l'expression¹ de $E(R; a)$ se simplifie en

$$R_0 < R \ll |a| : \quad E(R; a) \approx -\Omega^2 \frac{\hbar^2}{2mR^2}. \quad (17)$$

Dans ce domaine, on retrouve donc à peu près le même potentiel que pour $|a| = \infty$. Les états mMM fortement liés dans ce potentiel, c'est-à-dire ceux tels que $|\mathcal{E}| \gg \hbar^2/ma^2$, ne seront pas beaucoup affectés par la coupure du potentiel pour $R > a$. En revanche, on s'attend à ce que tous les états faiblement liés du cas résonnant, d'énergie $|\mathcal{E}| \lesssim \hbar^2/ma^2$, disparaissent du fait de cette coupure. On comprend donc qu'il reste un nombre fini d'états liés mMM (au lieu de l'infinité d'états trouvés pour $|a| = +\infty$).

Rappelons également que la fonction d'onde radiale réduite $u_n(R)$ de tous les états s'annule pour $R = R_0 \ll |a|$. D'après ce que nous avons vu au chapitre 2, nous savons que pour un état suffisamment excité (en pratique $n = 2$ ou 3 suffit), cette fonction d'onde s'annule également au point $R \approx \lambda R_0$ avec $\lambda = e^{\pi/|s_0|}$, pourvu que ce point reste lui-même bien inférieur à $|a|$.

Nous pouvons alors effectuer le raisonnement suivant. Partons du $n^{\text{ième}}$ état propre (avec $n > 0$) pour la longueur de diffusion a , dont la fonction d'onde radiale réduite u_n vérifie l'équation de Schrödinger pour $\ell = 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{M} \frac{d^2}{dR^2} + V(R; a) \right] u_n(R; a) = \mathcal{E}_n(a) u_n(R; a). \quad (18)$$

Considérons le problème aux valeurs propres pour la longueur de diffusion a/λ et intéressons-nous à la fonction

$$\begin{aligned} R > R_0 & : & v(R) &= u_n(\lambda R; a), \\ R < R_0 & : & v(R) &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Comme nous l'avons signalé, cette fonction s'annule en R_0 puisque u_n possède un nœud (approximativement) en λR_0 : elle est donc éligible comme fonction d'onde pour notre problème ; plus précisément, si $u_n(R; a)$ possède n nœuds dans l'intervalle $]R_0, +\infty[$, la fonction $v(R)$ possèdera $n - 1$

1. Nous écrivons explicitement la dépendance des quantités E , V , u_n vis-à-vis de la longueur de diffusion a car cette dépendance va jouer un rôle important dans ce qui suit.

nœuds sur ce même intervalle. Par ailleurs, en utilisant la propriété du potentiel $V(R; a)$ déduite de l'expression (4) faisant intervenir la fonction de Lambert $W(e^{R/|a|})$:

$$R > R_0 : \quad V(\lambda R; a) = \frac{1}{\lambda^2} V\left(R; \frac{a}{\lambda}\right), \quad (20)$$

on constate que $v(R)$ vérifie l'équation aux valeurs propres :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{M} \frac{d^2}{dR^2} + V\left(R; \frac{a}{\lambda}\right) \right] v(R) = \lambda^2 \mathcal{E}_n(a) v(R). \quad (21)$$

La fonction $v(R)$ est donc solution de l'équation de Schrödinger radiale pour la longueur de diffusion a/λ avec la valeur propre $\lambda^2 \mathcal{E}_n(a)$ et elle satisfait la condition aux limites $v(R_0) = 0$. Comme cette fonction possède $n - 1$ nœuds sur l'intervalle $]R_0, +\infty[$, on en déduit qu'elle est égale à $u_{n-1}(R; a/\lambda)$ (à une constante multiplicative près) et que l'on a la relation entre les énergies propres :

$$\mathcal{E}_{n-1}(a/\lambda) = \lambda^2 \mathcal{E}_n(a), \quad (22)$$

ce qui constitue le résultat annoncé en (16).

Pour vérifier cette loi d'échelle, nous avons repris les énergies $\mathcal{E}_n(a)$ déjà montrées en figure IV.7 et nous les avons retracées en figure IV.9 sous la forme $[x = \lambda^n R_0/a, y = \lambda^{2n} \mathcal{E}_n(a)]$. On constate que cette loi est remarquablement bien vérifiée : les tracés pour $n = 2$ et $n = 3$ sont quasiment indiscernables, et le tracé $n = 1$ en est très proche. Seul l'état fondamental $n = 0$ présente une différence notable mais comme nous l'avons signalé dans ce qui précède, on ne s'attendait pas à ce que la loi d'échelle fonctionne de manière précise pour lui.

Une conséquence immédiate de cette loi d'échelle est obtenue pour les points d'apparition $a_-^{(n)}$ des trimères, pour lesquels $\mathcal{E}_n$ s'annule. On trouve la loi d'échelle

$$a_-^{(n)} = \lambda a_-^{(n-1)}, \quad (23)$$

une relation que l'on avait pressentie sur la figure IV.7. Nous verrons que cette relation est testable expérimentalement et constitue une signature forte de l'universalité de la physique d'Efimov.

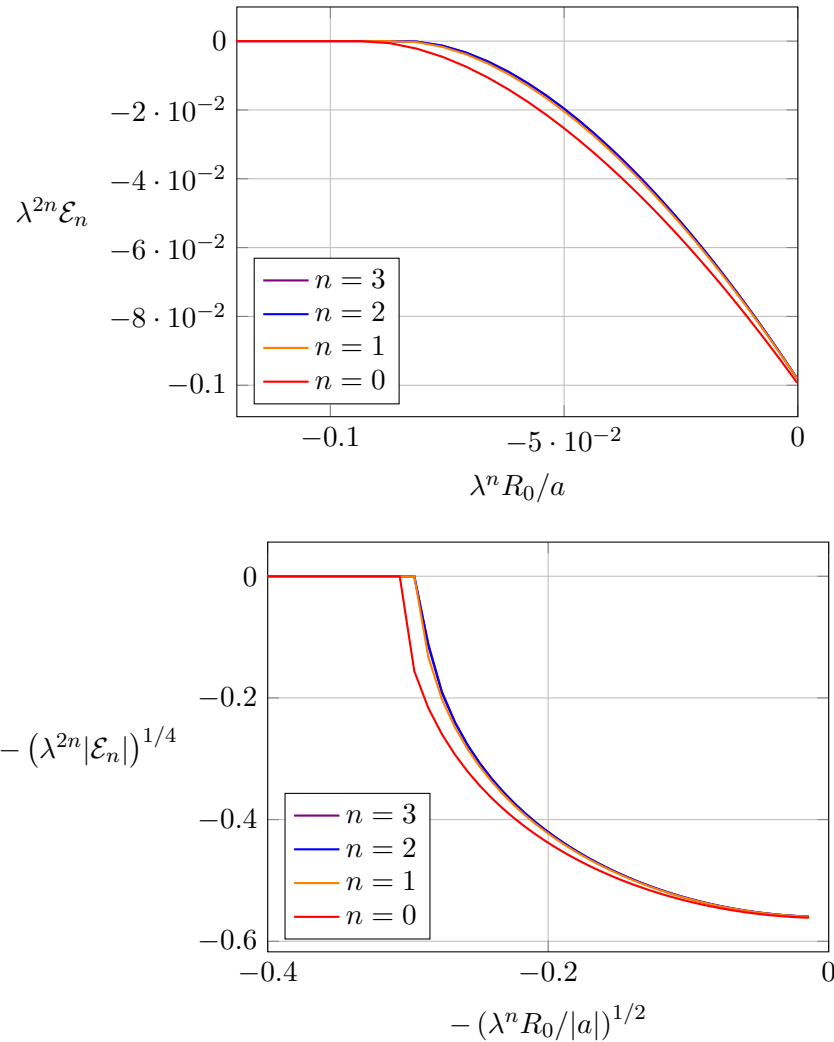


FIGURE IV.9. Vérification de la loi d'échelle (16) pour des longueurs de diffusion $a < 0$. Le calcul est fait pour $M/m = 20$ et les énergies sont exprimées en unité de $\hbar^2 / MR_0^2$.

2-2 Le cas $a > 0$ et la compétition dimère-trimère

Nous passons maintenant à la branche $a > 0$ pour laquelle nous savons qu'il existe un état lié du dimère mM , d'énergie $E_{\text{dim}} = -\hbar^2 / 2ma^2$. Pour qu'un état lié à trois corps soit stable, il ne suffit donc pas que son énergie soit négative, contrairement à ce que nous avons utilisé pour $a < 0$. Il faut que son énergie soit inférieure à E_{dim} , sinon il est préférable sur le plan énergétique de casser le trimère pour former un dimère mM d'un côté, et une particule M au repos loin du dimère.

Pour analyser le problème de la formation d'un état lié à trois corps mMM dans le cadre de l'approximation de Born–Oppenheimer, nous pouvons suivre une démarche très voisine de celle utilisée pour $a < 0$. Pour commencer, nous remarquons que le potentiel d'interaction mM donné en (5) peut toujours se mettre sous la forme :

$$R < R_0 \quad : \quad V(R) = +\infty \quad (24)$$

$$R_0 < R \quad : \quad V(R) = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \mathcal{F}(R/a) \quad (25)$$

avec :

$$\mathcal{F}(x) = [W(e^{-x}) + x]^2. \quad (26)$$

Quand $R \rightarrow +\infty$, le potentiel $V(R)$ (tracé sur la figure IV.2) tend vers E_{dim} . On retrouve donc bien que le trimère lié, pour être l'état fondamental du système à trois corps, doit avoir une énergie inférieure à E_{dim} . Par ailleurs, la différence $V(R) - E_{\text{dim}}$ varie comme $e^{-R/a}$ quand R augmente, de sorte que le potentiel susceptible de lier le dimère est de portée finie, de l'ordre de a : on sait d'emblée qu'il ne peut y avoir qu'un nombre fini d'états liés dans un tel potentiel.

Le résultat de la recherche numérique des états liés mMM dans le cadre de l'approximation de Born–Oppenheimer est montré en figure IV.10. Il confirme l'existence d'un nombre fini (ou nul) d'états pour toute valeur de $a > 0$. Pour $a = 100 R_0$ par exemple, on trouve quatre états liés ($n = 0, 1, 2, 3$), d'énergie $\mathcal{E}_n < E_{\text{dim}}$. Cela signifie que si on avait préparé un trimère dans un état d'énergie $\mathcal{E}_n$ avec $n > 3$ au point $|a| = +\infty$, puis ramené adiabatiquement a à la valeur $100 R_0$, ce trimère se serait dissocié pour donner un dimère mM et un atome M libre.

Pour interpréter les résultats montrés en figure IV.10, nous remarquons

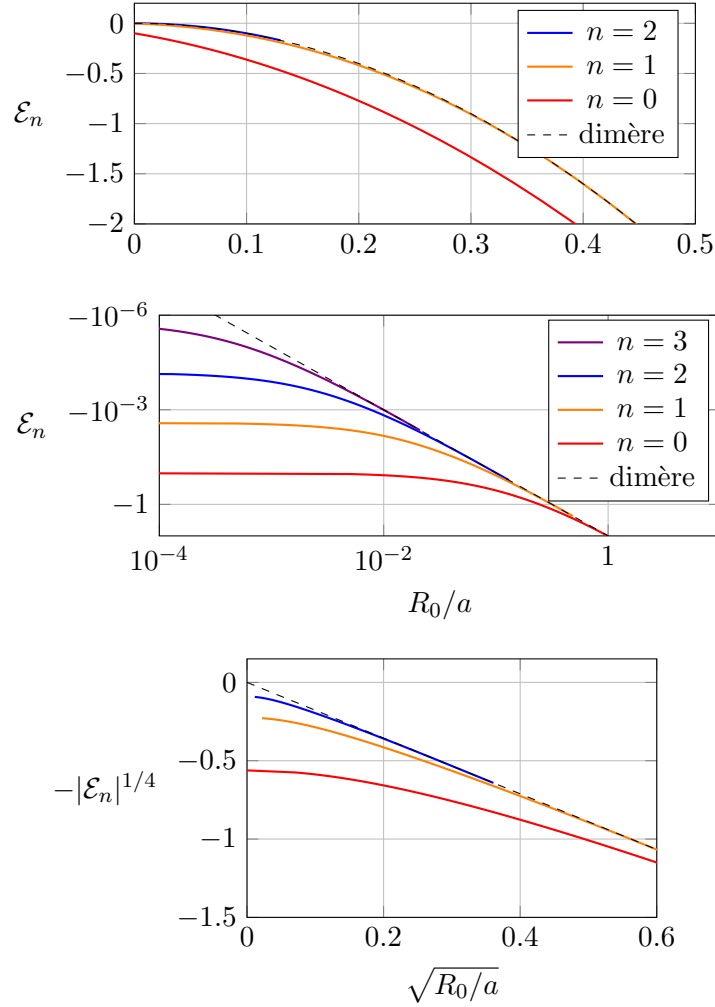


FIGURE IV.10. Compétition dimère—trimère pour $a > 0$: variation des énergies $\mathcal{E}_n(a)$ des premiers états liés du trimère mMM en fonction de la longueur de diffusion a , supposée ici positive, pour $M/m = 20$. Les mêmes données sont tracées avec différents systèmes de coordonnées. Les énergies sont exprimées en unité de $\hbar^2/MR_0^2$. L'énergie du dimère est $-\frac{\hbar^2}{2ma^2} = -\frac{M}{2m} \frac{R_0^2}{a^2} \frac{\hbar^2}{MR_0^2}$.

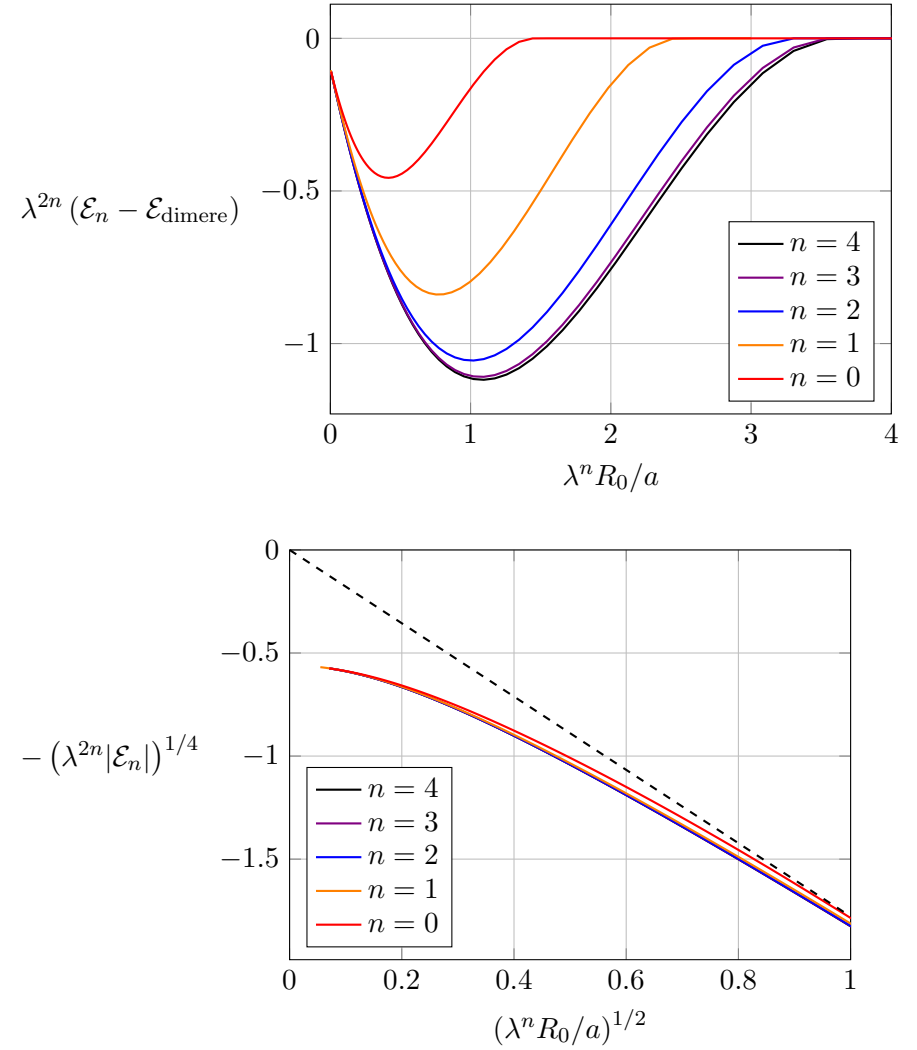


FIGURE IV.11. Vérification de la loi d'échelle (28) pour des longueurs de diffusion $a > 0$. Le calcul est fait pour $M/m = 20$ et les énergies sont exprimées en unité de $\hbar^2/MR_0^2$.

que la démonstration de la loi d'échelle (16),

$$\mathcal{E}_{n-1}(a) = \lambda^2 \mathcal{E}_n(\lambda a) \quad \text{pour } n \text{ assez grand,} \quad (27)$$

que nous avons faite dans le cas $a < 0$ en §2-1 reste valable dans le cas $a > 0$ puisque la forme générique (24,25) du potentiel est inchangée. En fait, puisque la grandeur pertinente est ici l'écart entre $\mathcal{E}_n$ et l'énergie du dimère, nous réécrivons cette loi sous la forme :

$$\mathcal{E}_{n-1}(a) - E_{\text{dim}}(a) = \lambda^2 [\mathcal{E}_n(\lambda a) - E_{\text{dim}}(\lambda a)] \quad \text{pour } n \text{ assez grand} \quad (28)$$

Cette réécriture est possible car $E_{\text{dim}}(a) \propto 1/a^2$ dans le modèle du pseudo-potentiel utilisé ici. Le test de cette loi d'échelle est représenté sur la figure IV.11. On constate que cette loi est effectivement bien vérifiée pour n assez grand, mais qu'elle ne fonctionne pas pour $n = 0, 1, 2$, contrairement au cas $a < 0$ (cf. figure IV.9). Or, nous verrons en §3 qu'il est difficile d'observer en pratique des états mMM pour un nombre quantique n au delà de 2. Cette loi d'échelle du côté $a > 0$ est donc moins pertinente sur le plan expérimental que son équivalent pour $a < 0$.

Notation. Dans ce qui suit, nous noterons (en suivant la tradition) $a_*^{(n)}$ la valeur (positive) de la longueur de diffusion a pour laquelle l'énergie du $n^{\text{ième}}$ trimère est égale à celle du dimère mM . Tout comme la valeur $a_-^{(n)}$, cette quantité $a_*^{(n)}$ est une fonction de R_0 . On pourrait se demander pourquoi la notation $a_+^{(n)}$ n'a pas été utilisée pour désigner ce point de rencontre entre l'énergie du trimère et celle du dimère. La raison en est que cette notation $a_+^{(n)}$ est plutôt utilisée pour désigner un minimum du taux de pertes à trois corps (également du côté $a > 0$ de la résonance), comme nous le verrons au chapitre 6.

2-3 Courbes complètes

Pour faire la synthèse de ce que nous avons trouvé des deux côtés $a < 0$ et $a > 0$ de la résonance $|a| = +\infty$, nous avons regroupé sur la figure IV.12 les résultats déjà montrés séparément. Ces courbes sont présentées en échelle logarithmique avec un axe x un peu particulier puisqu'il représente $-\ln(R_0/|a|)$ du côté $a < 0$, et $+\ln(R_0/a)$ du côté $a > 0$. Le gap entre

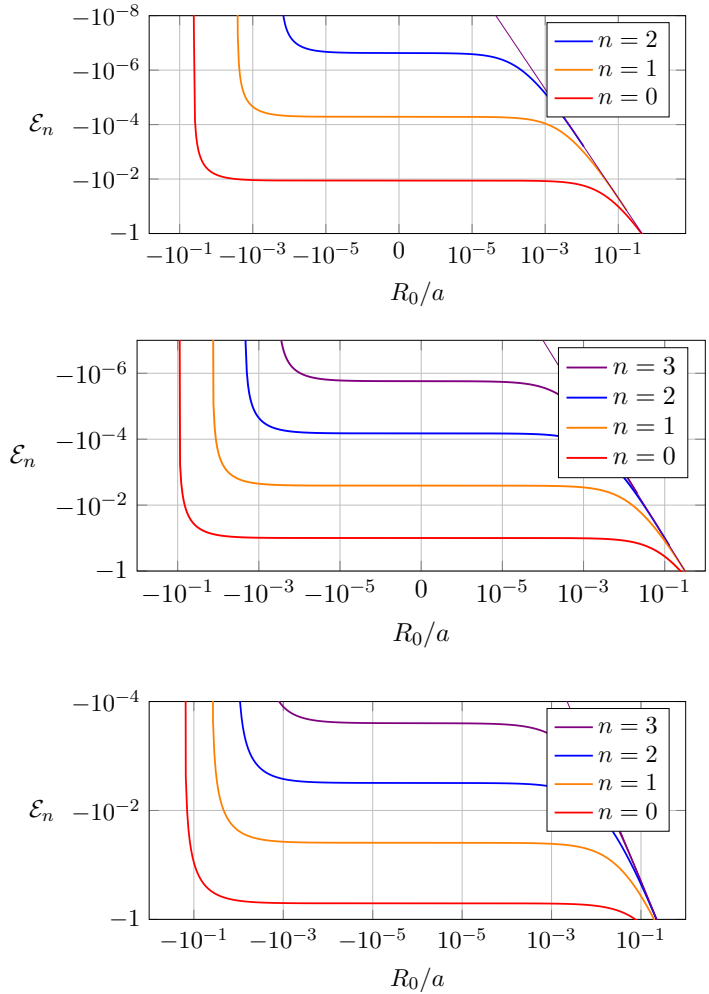


FIGURE IV.12. Variation des énergies $\mathcal{E}_n(a)$ des premiers états liés du trimère mMM en fonction de la longueur de diffusion a , pour $M/m = 10$ (haut), 20 (milieu) et 40 (bas). Les données sont tracées en coordonnées log-log (voir le texte pour la description précise de l'axe des abscisses). Les énergies sont exprimées en unité de $\hbar^2/MR_0^2$.

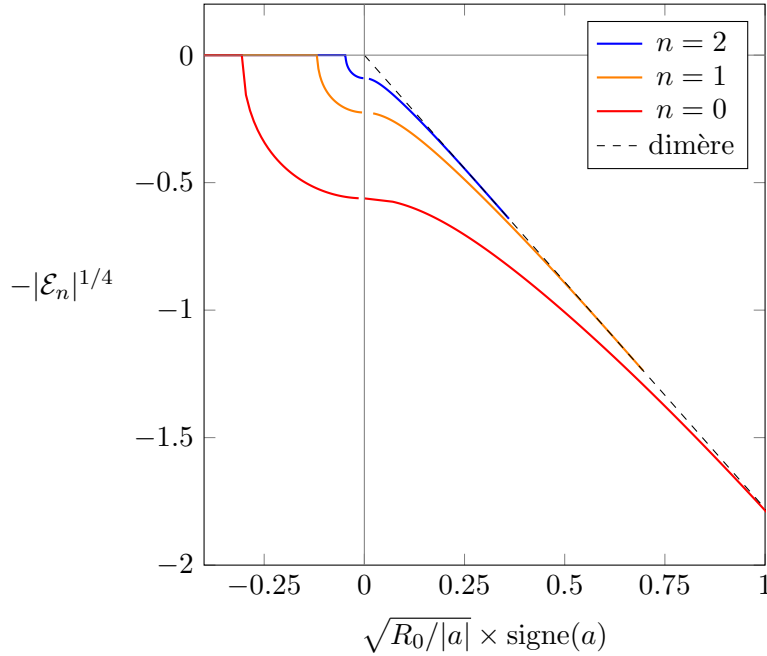


FIGURE IV.13. Variation de $-|\mathcal{E}_n|^{1/4}$ avec $\sqrt{R_0/|a|}$ pour les premiers états liés du trimère mMM ($M/m = 20$).

$R_0/a = -10^{-5}$ et $R_0/a = +10^{-5}$, qui devrait être en toute rigueur infini pour de "vraies" coordonnées logarithmiques, a été remplacé par un segment de longueur finie. Ces mêmes données sont tracées en coordonnées linéaires sur la figure IV.13.

On vérifiera sur la figure IV.12 le resserrement des niveaux quand le rapport M/m augmente. Ce resserrement est dû à la diminution du facteur d'échelle $\lambda = e^{\pi/|s_0|}$ avec $|s_0| \approx \Omega\sqrt{M/2m}$ [cf. eq. (14)].

On notera par ailleurs que les points remarquables signalés de part et d'autre de la résonance, $a_-^{(n)}$ et $a_*^{(n)}$, sont chacun proportionnels à R_0 et à λ^{-n} , où λ dépend du rapport M/m . On trouve par exemple (cf. figures IV.9

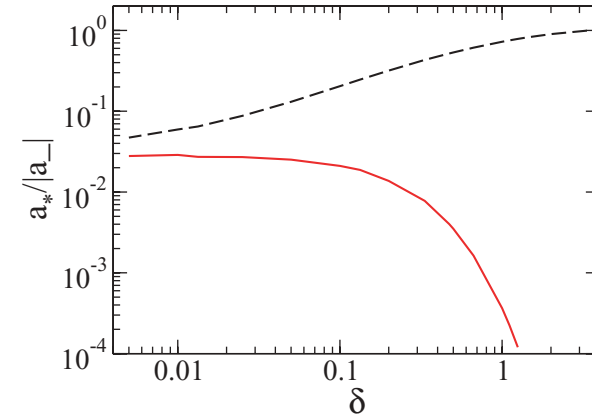


FIGURE IV.14. Courbe continue rouge : variation du rapport $a_*^{(n)}/|a_-^{(n)}|$ (pour n assez grand) avec le rapport de masse $\delta \equiv m/M$. Pour $m/M = 1/20$, on trouve $a_*^{(n)}/|a_-^{(n)}| \sim 1/40$ [cf. (30)]. Courbe tirée noire : rapport $a_*^{(n+1)}/|a_-^{(n)}|$. Figure extraite de Helfrich, Hammer & Petrov (2010).

et IV.11) :

$$\frac{M}{m} = 20 : \quad \lambda^n \frac{R_0}{a_-^{(n)}} \approx -0.0815 \quad \lambda^n \frac{R_0}{a_*^{(n)}} \approx 3.540 \quad (29)$$

dont on déduit :

$$\text{Pour } \frac{M}{m} = 20 : \quad \frac{a_-^{(n)}}{a_*^{(n)}} \approx -43 \quad \text{pour } n \geq 3. \quad (30)$$

La vérification du lien entre ces paramètres a_- et a_* correspondant aux deux côtés de la résonance $|a| = +\infty$ constitue un test très important de l'universalité de l'effet Efimov. Helfrich, Hammer & Petrov (2010) ont étudié la variation de ce rapport avec M/m et nous avons reporté leur résultat en figure IV.14.

3 Expériences sur le cas léger-lourd-lourd

3-1 Expériences sur les mélanges de gaz atomiques

Les premières manifestations de la physique d'Efimov dans les gaz d'atomes froids ont été observées par Kraemer, Mark et al. (2006) sur un gaz de césium. Il s'agissait d'un système homonucléaire, dont la description théorique est plus compliquée que celle du système mMM considéré jusqu'ici. Nous repoussons donc la description des résultats de Kraemer, Mark et al. (2006) au chapitre 6 et nous allons nous concentrer ici sur des expériences plus récentes, menées à Heidelberg (Pires, Ulmanis et al. 2014), puis à Chicago (Tung, Jiménez-García et al. 2014), dans lesquelles trois branches de trimères ont été observées, avec (approximativement) le rapport d'échelle attendu.

Notons qu'en plus des expériences de Heidelberg et Chicago que nous allons regarder en détail, d'autres mélanges ont été étudiés à la recherche d'une physique liée à l'universalité découverte par Efimov :

- Barontini, Weber et al. (2009) [voir aussi Barontini, Weber et al. (2010)] ont publié des résultats tendant à prouver la formation de trimères K-K-Rb et K-Rb-Rb liée à une physique "efimovienne" du côté $a < 0$ ($a_- \stackrel{?}{=} -246(14) a_0$). Ils ont étudié pour cela un mélange de ^{41}K et ^{87}Rb (résonance de Fano-Feshbach à 38.4 G). Ils ont également décrit une possible résonance à trois corps du côté $a > 0$ ($a_* \stackrel{?}{=} 667(1) a_0$).
- Bloom, Hu et al. (2013) ont étudié un mélange très voisin (^{40}K et ^{87}Rb), mais ils n'ont observé aucune résonance côté $a < 0$ qui aurait pu être attribué à un effet Efimov [voir aussi Hu, Bloom et al. (2014)]. Du côté $a > 0$, ils ont observé un processus efimovien dans la relaxation mM en collision avec M , correspondant à $a_* = 230(10) a_0$, mais ce pic n'était pas à la position de la résonance annoncée par Barontini, Weber et al. (2009) [voir également les travaux plus récents de Wacker, Jørgensen et al. (2016) et Kato, Wang et al. 2017].
- Williams, Hazlett et al. (2009) ont observé un pic dans le signal de recombinaison à trois corps dans un gaz de ^6Li avec trois composantes de spin également peuplées. Ce même système a été utilisé par Lompe, Ottenstein et al. (2010) pour mettre en évidence des trimères d'Efimov formés par photoassociation.

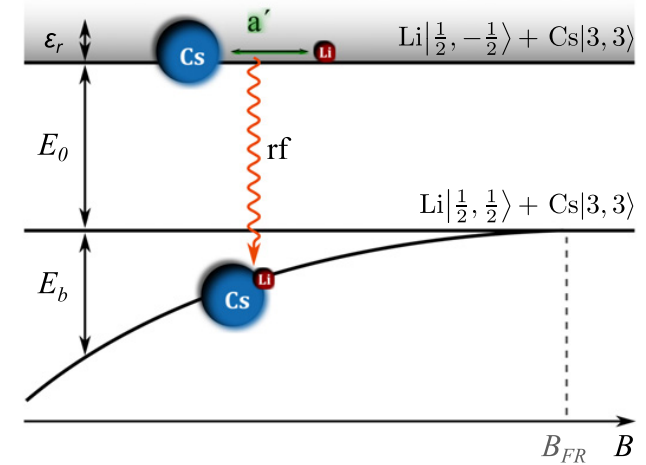


FIGURE IV.15. Photoassociation de dimères mM dans un mélange de ^6Li et ^{133}Cs . Figure extraite de Ulmanis, Häfner, Pires, Kuhnle, Weidemüller et al. (2015).

- Maier, Eisele et al. (2015) ont étudié un mélange ^7Li – ^{87}Rb et ont mis en évidence une résonance attribuable à un effet Efimov.

3-2 Résonance de Fano–Feshbach lithium-césium

Les expériences de Heidelberg et de Chicago ont été menées avec un mélange d'atomes de césium dans le rôle de la particule lourde ($M = 133$) et de lithium dans le rôle de la particule légère ($m = 6$), soit un rapport de masse $M/m = 22.2$. Ce système présente plusieurs résonances de Feshbach pour le problème à deux corps mM . Les deux groupes se sont placés à un champ magnétique voisin de 840 Gauss, pour lequel une résonance large se produit.

L'étude détaillée des paramètres de cette résonance est décrite par Ulmanis, Häfner, Pires, Kuhnle, Weidemüller et al. (2015). Elle est fondée sur une technique de photoassociation des dimères, comme représenté sur la figure IV.15. On mesure l'énergie de liaison de dimère en fonction du champ

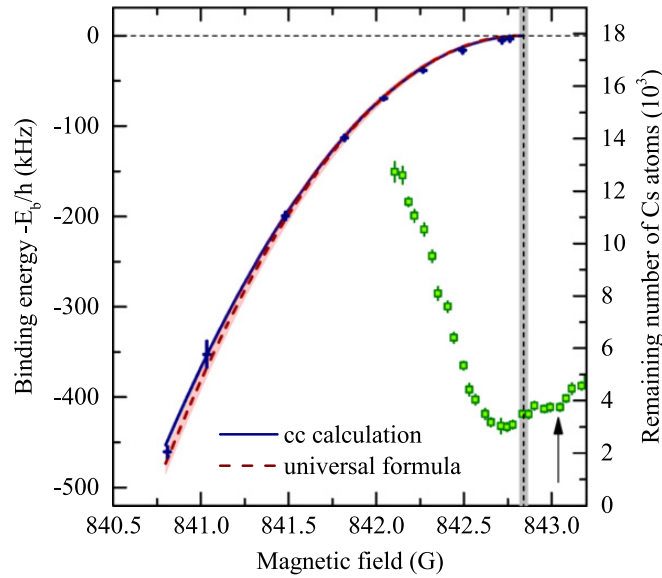


FIGURE IV.16. Croix bleues : Energie de liaison des dimères mM dans un mélange de ^6Li et de ^{133}Cs . Carrés verts : signal de pertes d'atomes de Cs. La bande verticale grisée donne la position de la résonance et son incertitude ($B_{\text{res}} = 842.829 \text{ G}$). Figure extraite de Ulmanis, Häfner, Pires, Kuhnle, Weidemüller et al. (2015).

magnétique, cette énergie devant s'annuler à la résonance. Au voisinage de la résonance, du côté $a > 0$, cette énergie est en bonne approximation donnée par $-\hbar^2/2m_r a^2$, où $m_r \approx 5.7$ est la masse réduite du système à deux corps. Le résultat expérimental pour la mesure de cette énergie de liaison est montré en figure IV.16, avec la prédiction simple $-\hbar^2/2m_r a^2$ ainsi que le résultat d'un modèle plus sophistiqué prenant en compte plusieurs canaux de collision couplés. Le résultat pour la longueur de diffusion mM se met sous la forme "traditionnelle" :

$$a = a_{\text{bg}} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_{\text{res}}} \right) \quad (31)$$

avec $a_{\text{bg}} = -29.4 a_0$, $\Delta = -58.21 \text{ G}$ et $B_{\text{res}} = 842.829 \text{ G}$.

Nous montrons en figure IV.16 le résultat de Ulmanis, Häfner, Pires,

Kuhnle, Weidemüller et al. (2015) pour la mesure de la perte d'atomes de Cs au voisinage de la résonance. Ces auteurs concluent que ces deux mesures sont en relativement bon accord l'une avec l'autre, la mesure basée sur la photoassociation donnant des résultats dix fois plus précis.

3-3 La formation de trimères du côté $a < 0$

Les deux expériences de 2014 menées à Heidelberg et à Chicago se sont concentrées sur le côté $a < 0$ de la résonance (c'est-à-dire $B > B_{\text{res}}$). Le principe en est simple : quand la longueur de diffusion est voisine d'un des seuils $a_-^{(n)}$ correspondant à l'apparition d'un trimère (figure IV.17), on observe une perte importante d'atomes liée à la recombinaison à trois corps : les trois atomes se couplent temporairement pour former un état d'Efimov, qui se désintègre ensuite pour former un dimère fortement lié et un atome isolé. L'énergie relâchée par la formation du dimère est convertie en énergie cinétique des deux partenaires, qui s'échappent du piège (D'Incao & Esry 2005b; D'Incao & Esry 2006b). Nous détaillerons la description théorique du processus de recombinaison plus tard dans ce cours; dans ce qui suit, nous nous contenterons d'admettre que ce processus est maximal quand a est voisin d'un des $a_-^{(n)}$.

Plusieurs signaux typiques de pertes sont représentés sur la figure IV.18. Cette figure, correspondant à des données du groupe de Chicago, montre la décroissance du nombre d'atomes de Lithium pour deux valeurs du champ magnétique : $B = 848.0 \text{ G}$ pour la figure du haut (donc relativement loin de résonance), $B = 842.7 \text{ G}$ pour la figure du bas (donc très proche de la résonance). Ces données ont été obtenues pour un gaz de lithium pur (symboles évidés) et pour un mélange lithium-césium (symboles pleins). Les données pour le lithium pur sont quasiment indépendantes de la valeur de B alors que celles pour le mélange montrent une augmentation spectaculaire du taux de décroissance aux temps courts pour les données acquises près de la résonance.

Notons que les pertes d'atomes de césium sont toujours très significatives dans ce domaine de champ magnétique, indépendamment de la présence d'atomes de lithium. Cela vient du fait que la longueur de diffusion Cs-Cs est négative et de grande valeur absolue : $|a_{\text{Cs Cs}}| > 1000 a_0$.

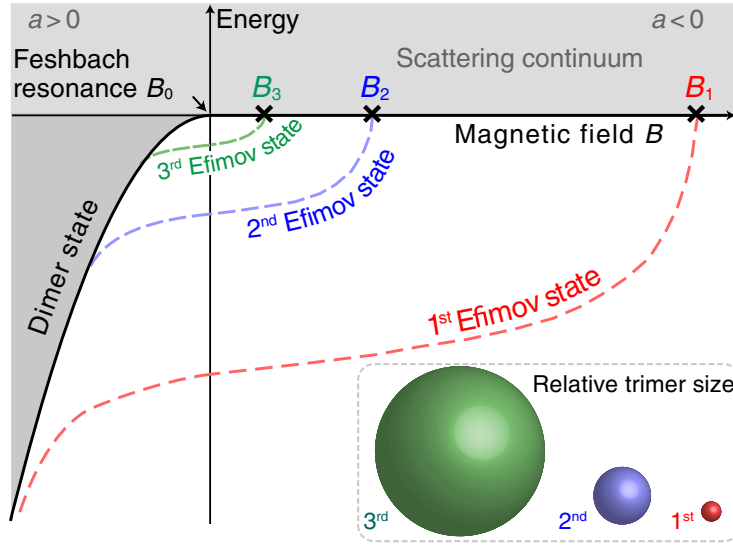


FIGURE IV.17. Principe de la détection de trimères d'Efimov : on cherche les champs magnétiques B_j pour lesquels la longueur de diffusion est négative et égale à une des valeurs seuils $a_-^{(n)}$ pour l'apparition d'un trimère. Noter que l'axe x est orienté dans le sens des champs magnétiques croissants, et donc des valeurs de $1/a$ décroissantes, ce qui est l'opposé de la convention utilisée dans les figures IV.7, IV.10 et IV.12. Figure extraite de Tung, Jiménez-García et al. (2014).

Quand on trace le nombre d'atomes de lithium restant dans le piège au bout d'un temps τ donné en fonction du champ magnétique (donc de la longueur de diffusion $a_{\text{Li-Cs}}$), on observe trois résonances successives correspondant aux trois valeurs de B_j montrées en figure IV.17. Nous montrons en figure IV.19 les données obtenues à Chicago.

L'analyse détaillée des données expérimentales de Heidelberg et de Chicago a été faite par Ulmanis, Häfner, Pires, Kuhnle, Weidemüller et al. (2015), grâce à la détermination précise de la position de la résonance de Fano-Feshbach pour $a_{\text{Li-Cs}}$ faite à partir de la figure IV.16. La table IV.1 résume le résultat de cette analyse. La valeur universelle attendue pour le rapport $a_-^{(n)}/a_-^{(n-1)}$ [cf. eq.(23)] est $\lambda = 4.9$ (Braaten & Hammer 2006; D'In-

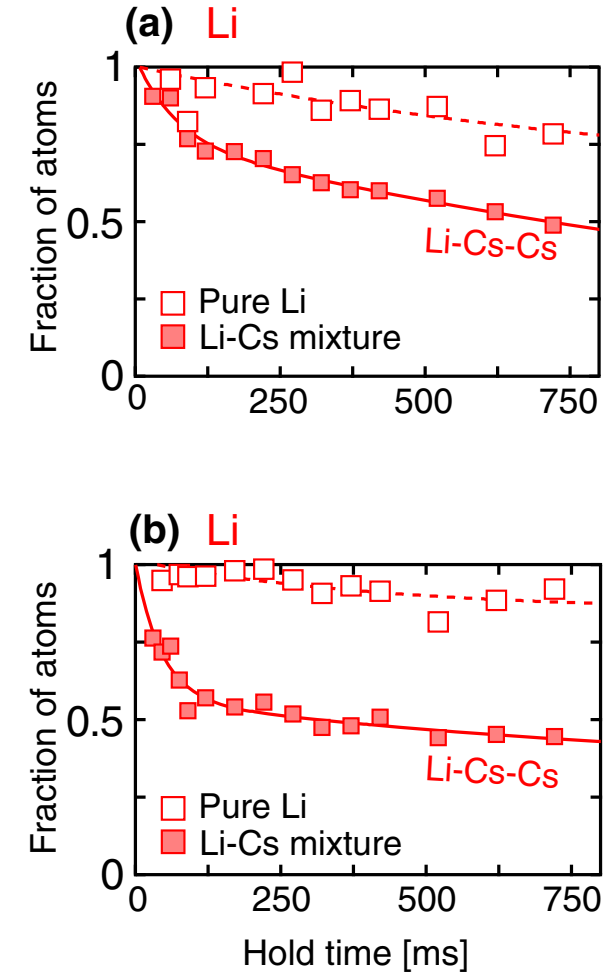


FIGURE IV.18. Décroissance du nombre d'atomes d'un piège optique contenant initialement 20 000 à 30 000 atomes de ^6Li et (pour les symboles pleins) 40 000 à 50 000 atomes de ^{133}Cs . La température du nuage est de l'ordre de 350 nK. Haut : $B = 848.0$ G, relativement loin de la résonance pour $a_{\text{Li-Cs}}$, Bas : $B = 842.7$ G, proche de résonance. Figure extraite de Tung, Jiménez-García et al. (2014).

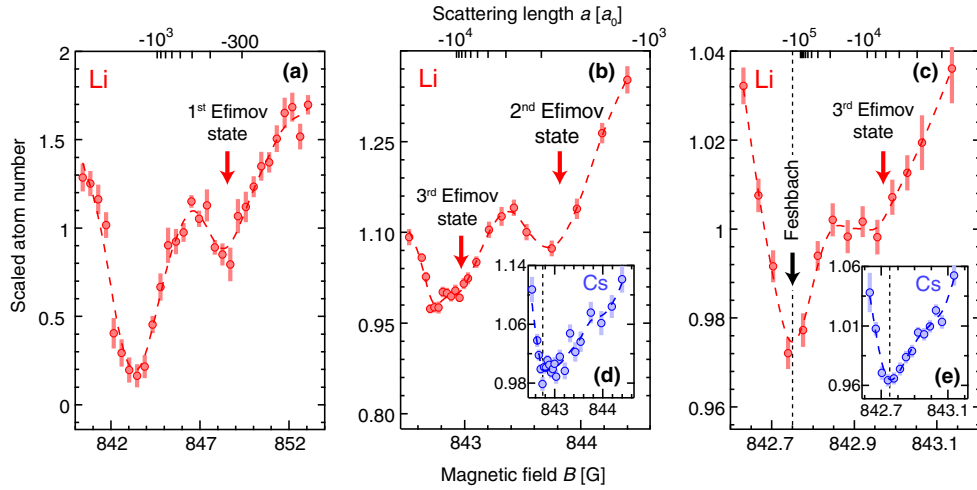


FIGURE IV.19. Variation du nombre d'atomes de lithium dans le piège optique après un temps d'attente τ , avec $\tau = 225$ ms pour la figure de gauche ($T = 800$ nK) et $\tau = 115$ ms pour les deux autres ($T = 360$ nK pour la figure du milieu et $T = 270$ nK pour la figure de droite). Figure extraite de Tung, Jiménez-García et al. (2014).

cao & Esry 2006a). Notons que cette valeur est obtenue grâce à un calcul numérique complet du problème à trois corps (tout en continuant à négliger l'interaction mM). La valeur approchée déduite du traitement Born-Oppenheimer décrit plus haut est de $\lambda_{BO} = 5.6$.

3-4 Discussions et prolongements

Dans le traitement qui précède, nous avons négligé complètement l'interaction entre les deux atomes lourds. Cette approximation est valable pour certains mélanges (Li-Rb par exemple), mais est très discutable pour le mélange Li-Cs étudié à Heidelberg et à Chicago. La longueur de diffusion Cs-Cs est en effet grande en valeur absolue ($> 1000 a_0$) sur toute la plage de champ magnétique explorée autour de la résonance à 843 G.

Ce problème a été abordé en détail par Petrov & Werner (2015) [voir

i	Magnetic field (G)	$a_-^{(i)} (10^3 a_0)$	$a_-^{(i)} / a_-^{(i-1)}$
0 (ground)	848.90 (6)(3) ^a	-0.311 (3)(1)(1)	—
1	843.85 (1)(3) ^a	-1.71 (2)(5)(4)	5.48 (7)(16)(10)
2	843.03 (5)(3) ^a	-8.54 (2.12)(1.27)(97)	5.00 (1.24)(76)(46)
0	848.55 (12)(3) ^b	-0.329 (6)(2)(1)	—
1	843.82 (4)(3) ^b	-1.76 (7)(5)(4)	5.35 (24)(16)(10)
2	842.97 (3)(3) ^b	-12.2 (2.6)(2.6)(1.9)	6.93 (1.50)(1.48)(97)

TABLE IV.1. Valeurs du champ magnétique mesurées à Heidelberg (a) et à Chicago (b) pour l'apparition des trimères d'Efimov dans un mélange $^6\text{Li}-^{133}\text{Cs}$, du côté $a < 0$ de la résonance. Les rapports de $a_-^{(i)} / a_-^{(i-1)}$ qu'on en déduit sont proches de la valeur "universelle" attendue. Table tirée de Ulmanis, Häfner, Pires, Kuhnle, Weidemüller et al. (2015).

aussi Wang, Wang et al. (2012) et Mikkelsen, Jensen et al. (2015)] qui ont comparé les deux cas limites $a_{MM} = 0$ et $a_{MM} = \infty$. Le résultat obtenu est remarquable : les paramètres à la base de la loi d'échelle de Efimov, $|s_0|$ et $\lambda = e^{\pi/|s_0|}$, ne varient que très peu entre les deux cas. Petrov & Werner (2015) trouvent :

$$a_{mM} = \infty, a_{MM} = 0 : \quad |s_0| = 1.98277, \lambda = 4.87661 \quad (32)$$

et [voir aussi Yamashita, Bellotti et al. (2013)]

$$a_{mM} = \infty, a_{MM} = \infty : \quad |s_0| = 2.00308, \lambda = 4.79887. \quad (33)$$

En revanche, Petrov & Werner (2015) montrent que le taux de pertes à trois corps est considérablement augmenté dans le cas du mélange Li-Cs par le fait que les interactions MM sont quasi-résonnantes (cf. figure IV.20).

Petrov & Werner (2015) ont également étudié théoriquement l'effet de la température sur le signal de pertes à trois corps. Un résultat typique, comparant les cas $T = 0$ et $T = 400$ nK est représenté en figure IV.20. On voit qu'une température non nulle tend à lisser les résonances du signal de pertes, et peut également les déplacer par rapport au cas $T = 0$. Des résultats similaires ont été obtenus indépendamment par Mikkelsen, Jensen

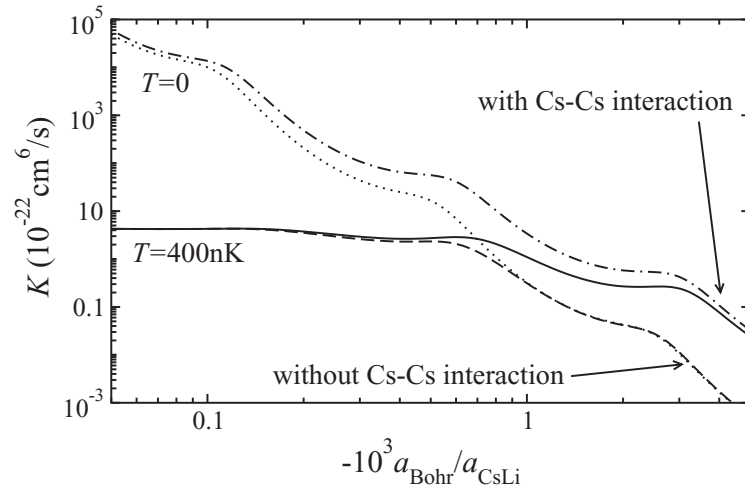


FIGURE IV.20. Variation du taux de pertes à trois corps dans un mélange $\text{Li} - \text{Cs}$, avec et sans interaction $\text{Cs} - \text{Cs}$, et pour deux températures différentes $T = 0$ et $T = 400 \text{ nK}$. Figure extraite de Petrov & Werner (2015) (voir cet article pour les paramètres du calcul).

et al. (2015). Dans l'article de Ulmanis, Häfner, Pires, Werner et al. (2016), le groupe de Heidelberg présente des données expérimentales prises à plus basse température (120 nK) que dans les expériences initiales de 2014, et qui confirment les tendances que nous venons de décrire.

Après les publications expérimentales des groupes de Heidelberg et de Chicago, l'étude de l'effet Efimov mMM a fait l'objet de nombreuses études théoriques, notamment pour aller au delà de la description des interactions en terme de potentiel de contact. Les effets de portée finie ont été étudiés notamment par Zinner & Nygaard (2015), Acharya, Ji et al. (2016) et Wu, Han et al. (2016).

Ulmanis, Häfner, Pires, Kuhnle, Wang et al. (2016) ont ajouté une mesure intéressante concernant le mélange $\text{Li}-\text{Cs}$ en reprenant les expériences initiales autour d'une autre résonance de Feshbach située autour de $B = 889 \text{ G}$. Dans ces conditions, la longueur de diffusion $a_{\text{CsCs}} = 190 a_0$ est positive, ce qui signifie que des dimères faiblement liés Cs_2 peuvent jouer un

rôle significatif. Cela conduit à la disparition de la résonance pour l'état d'Efimov fondamental et à une modification du facteur d'échelle qui devient $\lambda = 4.0(3)$ [voir également Häfner, Ulmanis et al. (2017)]. Un traitement théorique détaillé de la relaxation à trois corps dans cette configuration, en particulier de la forme de raie susceptible d'apparaître (profil de Fano), a été proposé par Giannakeas & Greene (2018), puis par Giannakeas & Greene (2021).

Les deux résonances de Feshbach mentionnées jusqu'ici pour le couple $\text{Li}-\text{Cs}$ (843 G et 889 G) sont des résonances larges, pour lesquelles la description de l'interaction en terme d'une longueur de diffusion (sans contribution significative de la portée effective) est appropriée. Johansen, DeSalvo et al. (2017) ont comparé les résultats obtenus pour la résonance à 889 G et une autre résonance, beaucoup plus étroite² à 893 G. Une des principales conclusions de cette étude est un déplacement très significatif de la position de la résonance par rapport à la prédiction "naïve". Une analyse théorique complémentaire d'une résonance étroite pour le problème $\text{Li}-\text{Cs}-\text{Cs}$ a été proposée récemment par Li, Yudkin et al. (2022).

4 Trimères universels de Kartavtsev & Malykh

4-1 Retour sur le cas des fermions

Nous revenons maintenant au cas où les particules lourdes sont des fermions polarisés, de sorte que leurs états accessibles doivent faire intervenir uniquement les moments cinétiques relatifs impairs.

Comme nous l'avons indiqué en § 1-4, quand on se place à résonance, c'est-à-dire $a = \pm\infty$, deux cas sont possibles pour une interaction mM de portée nulle :

- Pour M/m plus grand que la valeur critique $13.606\,966\dots$, une infinité d'états peuvent apparaître pour l'onde $\ell = 1$ dans le potentiel en α/R^2 ($\alpha < 0$) qui émerge du problème. Comme pour les bosons, on doit introduire un paramètre à trois corps, en l'occurrence le cœur dur en R_0 pour notre approche, pour empêcher la "chute vers le centre" et

2. Les paramètres caractérisant ces résonances sont $s_{\text{res}} = 0.66$ pour $B = 843 \text{ G}$ et 889 G et $s_{\text{res}} = 0.05$ pour $B = 893 \text{ G}$ (cf. cours 2021, chap. VI).

assurer que le système admet un état fondamental d’énergie négative finie. Au dessus de cet état fondamental, on trouve une infinité d’états liés, avec des énergies formant en très bonne approximation une suite géométrique $E_{n+1} = E_n/\lambda^2$.

- Pour M/m plus petit que la valeur critique $13.606\,966\dots$, aucun état lié à trois corps n’existe pour $a = \pm\infty$.

Après un travail précurseur de Petrov (2003) portant sur la recombinaison à trois corps dans ces systèmes, Kartavtsev & Malykh (2007) ont repris ce problème en se plaçant du côté $a > 0$ de la résonance et ils ont montré que l’interaction effective résultant de l’échange de la particule légère [décrite par le potentiel (5) dans le cadre de l’approximation de Born–Oppenheimer] pouvait donner naissance à des trimères liés pour un rapport de masse inférieur à la valeur critique 13.6. Ces trimères sont qualifiés d’universels car il n’est pas indispensable d’introduire un paramètre à trois corps pour définir leur énergie (nous reviendrons sur ce point en §4-3). Celle-ci est fonction uniquement de la longueur de diffusion a caractérisant l’interaction mM (pour rappel, toute interaction MM est négligée ici).

Rappelons par ailleurs que nous faisons ici l’hypothèse d’une interaction mM caractérisée seulement par la valeur de la longueur de diffusion a , qui correspond en pratique au cas d’une résonance de Fano–Feshbach large. Le cas d’une résonance étroite avec $1/a = 0$ est abordé par Castin & Tignone (2011a).

4-2 Approche Born–Oppenheimer

Sur le plan semi-quantitatif, le résultat de Kartavtsev & Malykh (2007) peut être retrouvé par l’approche Born–Oppenheimer que nous avons suivie jusqu’ici. Nous nous plaçons dans le cas d’un rapport de masse inférieur à la valeur critique du cas $a = \infty$ [i.e. $M/m < 14.0$ pour le traitement Born–Oppenheimer, cf. (15)] et nous posons la question suivante : peut-il y avoir un état lié dans le potentiel effectif créé par la particule légère auquel on doit ajouter la barrière centrifuge pour l’onde $\ell = 1$? Rappelons l’expression de

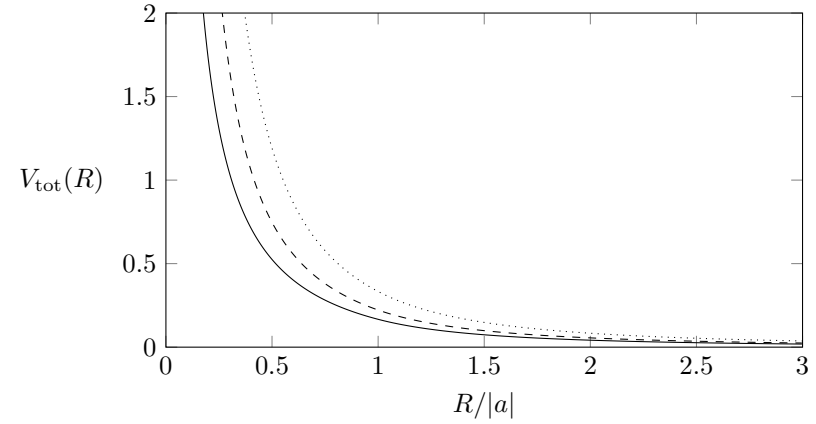


FIGURE IV.21. Potentiel total (en unités de $\hbar^2/ma^2$) pour le canal $\ell = 1$ dans le cas $a < 0$. Calcul effectué avec l’approximation de Born–Oppenheimer. De haut en bas, $M/m = 6, 9, 12$.

ce potentiel total pour $a < 0$

$$\begin{aligned} a < 0, R < |a| : \quad V_{\text{tot}}(R) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{|a|} - \frac{W(e^{R/|a|})}{R} \right]^2 + \frac{2\hbar^2}{MR^2} \\ a < 0, R > |a| : \quad V_{\text{tot}}(R) &= \frac{2\hbar^2}{MR^2} \end{aligned} \quad (34)$$

et pour $a > 0$:

$$a > 0 : \quad V_{\text{tot}}(R) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{a} + \frac{W(e^{-R/a})}{R} \right]^2 + \frac{2\hbar^2}{MR^2}. \quad (35)$$

Pour $a < 0$, ce potentiel est tracé en figure IV.21 pour différentes valeurs de M/m . C’est une fonction toujours décroissante de R , ce qui exclut l’existence d’un état lié dans ce potentiel. Remarquons que ce potentiel est de toute façon toujours supérieur au potentiel obtenu dans le cas $a = \pm\infty$ pour la même valeur du rapport M/m . Dans la mesure où l’on sait qu’il n’y a pas d’état lié dans le cas $a = \pm\infty$, il ne peut pas y en avoir non plus dans le cas $a < 0$.

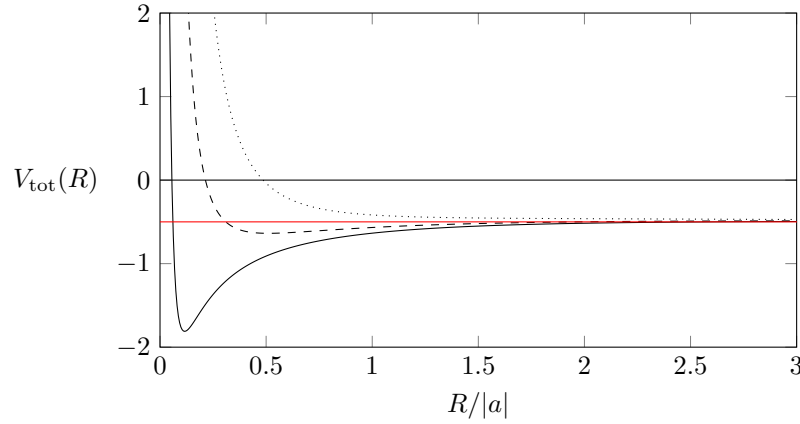


FIGURE IV.22. Potentiel total (en unités de $\hbar^2/ma^2$) pour le canal $\ell = 1$ dans le cas $a > 0$. Calcul effectué avec l'approximation de Born–Oppenheimer. De haut en bas, $M/m = 5, 8, 11$.

La situation intéressante est obtenue pour $a > 0$. Comme on le voit sur la figure IV.22, le potentiel $V_{\text{tot}}(R)$ n'est pas toujours une fonction monotone de R . Il peut admettre un minimum absolu quand le rapport M/m dépasse ~ 7 , tout en gardant une limite $V_{\text{tot}}(R) \rightarrow +\infty$ quand $R \rightarrow 0$. Quand $R \rightarrow \infty$, le potentiel $V_{\text{tot}}(R)$ tend vers $-\hbar^2/(2ma^2)$, qui correspond à l'énergie du dimère mM quand il est loin de l'autre particule de masse M .

Cette forme du potentiel pour $a > 0$ ouvre la possibilité d'obtenir des états liés, c'est-à-dire des états dont l'énergie sera strictement inférieure à l'énergie du dimère $-\hbar^2/(2ma^2)$. Il est possible d'utiliser l'approche de Born–Oppenheimer pour déterminer le seuil sur M/m au dessus duquel un tel état lié apparaît. Toutefois le résultat est très sensible à la forme du potentiel et il est plus sûr d'utiliser une méthode numérique précise, comme l'ont fait Kartavtsev & Malykh (2007).

Notons que même lorsque le seuil d'existence d'un état lié n'est pas atteint, la forme non monotone du potentiel, avec un minimum local susceptible d'abriter un état quasi-lié, peut donner naissance à une résonance de diffusion. Ce phénomène a été observé par Jag, Zaccanti et al. (2014) pour

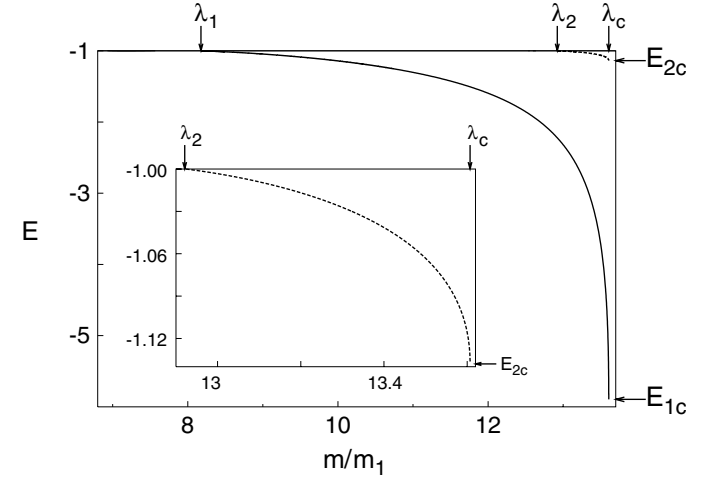


FIGURE IV.23. Énergies des états liés "universels" pour le problème mMM dans le cas où les particules M sont des fermions polarisés sans interaction et où la longueur de diffusion a caractérisant l'interaction mM est positive. Les énergies E sont mesurées en unité de $\hbar^2/(2m_r a^2)$ et l'abscisse est le rapport M/m (noté ici m/m_1). Figure extraite de Kartavtsev & Malykh (2007).

un mélange $^6\text{Li}-^{40}\text{K}$ (rapport de masse $M/m = 6.7$).

4-3 Résultats de Kartavtsev-Malykh et prolongements

Kartavtsev & Malykh (2007) ont utilisé un traitement du problème à trois corps voisin de ce que nous verrons dans le chapitre suivant, passant par la résolution des équations hyper-radiales [voir également Petrov (2003)]. Pour le cas $a > 0$, ils sont arrivés aux conclusions suivantes quand les particules M sont des fermions polarisés :

- Pour $M/m < \lambda_1 = 8.173$, il n'y a pas d'état lié pour le problème mMM .
- Pour $\lambda_1 = 8.173 < M/m < \lambda_2 = 12.917$, il y a (en absence de paramètre à trois corps complémentaire, voir § 4-3) un et un seul état lié dont l'énergie s'écrit $\alpha_1 \hbar^2/(2m_r a^2)$, avec le coefficient sans dimension α_1 tracé en figure IV.23 et $m_r = mM/(m + M)$.

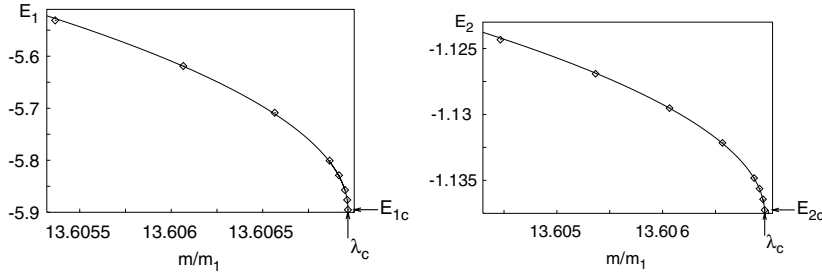


FIGURE IV.24. Légende similaire à la figure IV.23. Figure extraite de Kartavtsev & Malykh (2007).

- Pour $\lambda_2 = 12.917 < M/m < \lambda_c = 13.607$, il y a deux états liés dont les énergies s’écrivent $\alpha_j \hbar^2 / (2m_1 a^2)$, avec les coefficients α_j , $j = 1, 2$ tracés en figure IV.23.
- Pour $13.607 < M/m$, il peut y avoir un nombre arbitrairement élevé d’états liés quand $1/a \rightarrow 0_+$: c’est l’effet Efimov. La détermination de l’énergie de ces états liés nécessite l’introduction d’un coefficient à trois corps, par exemple le rayon de cœur dur R_0 .

Le ou les états trouvés dans la plage $8.173 < M/m < 13.607$ possèdent un moment cinétique total $L = 1$. Ils sont qualifiés d’universels puisque leur énergie ne dépend que du problème à deux corps mM et ne nécessite pas l’introduction d’un paramètre supplémentaire lié au problème à trois corps. Un agrandissement du comportement de l’énergie de ces états au voisinage du point critique λ_c est montré en figure IV.24.

A ce jour, les trimères de Kartavtsev-Malykh n’ont pas été observés expérimentalement. Comme indiqué par Endo, García-García et al. (2016), un système bien adapté pourrait être un mélange de ^6Li et de ^{53}Cr , tous deux fermioniques avec $M/m = 8.8$.

Remarque sur l’absence de paramètre à trois corps. Pour $M/m > 8.619$, Kartavtsev & Malykh (2016) ont montré que pour le modèle de portée nulle utilisé ici, il y a une ambiguïté dans la définition de la fonction d’onde à trois particules, car deux solutions indépendantes, chacune de carré sommable,

sont disponibles. Cette ambiguïté est déjà présente dans le problème à un corps dans le potentiel en $1/R^2$. Nous avons vu que l’équation $u''(R) - \frac{\alpha}{R^2}u(R) = 0$ admet deux solutions $u(R) = R^{s_{\pm}+1}$ avec $s_{\pm} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}}$. Pour $-1/4 < \alpha < 3/4$, ces deux solutions sont acceptables sur le simple critère d’intégrabilité en $R = 0$.

Kartavtsev & Malykh (2016) ont alors introduit un paramètre supplémentaire que nous noterons B_3 , pour fixer l’amplitude de la solution s_- , divergente en $R = 0$, par rapport à la solution s_+ , convergente en $R = 0$. L’article initial de Kartavtsev & Malykh (2007), dont nous avons décrit les résultats ci-dessus, correspondait au choix implicite $B_3 = 0$. Les spectres attendus quand on prend en compte des valeurs non nulles de B_3 sont donnés par Kartavtsev & Malykh (2016), un troisième trimère pouvant apparaître dans un petit domaine de paramètres.

Ce problème a été repris par Endo, Naidon et al. (2012), puis plus récemment par Naidon, Pricoupenko et al. (2022) avec un potentiel V_{mM} de portée b non nulle. Dans ce modèle, Naidon, Pricoupenko et al. (2022) ont montré que la limite de portée nulle pour V_{mM} conduit de manière naturelle au choix $B_3 = 0$, donc aux résultats de Kartavtsev & Malykh (2007).

Endo, Naidon et al. (2012) ont montré l’existence d’une transition continue (*crossover*) vers des trimères non-universels quand on varie le paramètre a/b . Cette approche fondée sur un potentiel mM de portée non nulle permet par ailleurs de préciser les conditions où les trimères de Kartavtsev-Malykh peuvent être observés et elle conduit à une plage très étroite pour les longueurs de diffusion appropriées : $a \gtrsim 100b$ (Naidon, Pricoupenko et al. 2022). Naidon, Pricoupenko et al. (2022) ont également pris en compte une éventuelle interaction directe³ MM en onde p et ils ont montré qu’elle pouvait conduire à la formation de trimères additionnels, potentiellement plus faciles à observer.

Signalons enfin que Endo, García-García et al. (2016) ont montré que l’interaction entre trimères de Kartavtsev-Malykh est répulsive à basse énergie : il est donc envisageable de former avec eux une phase stable de type liquide de Fermi si la particule m est elle-même un fermion, pourvu que $M/m \lesssim 9.5$. Blume (2012) a en effet trouvé qu’au delà de cette valeur, la

3. Le problème de trois fermions identiques et polarisés, interagissant uniquement en onde p , a été traité par Jona-Lasinio, Pricoupenko et al. (2008).

formation d'un tétramère $mMMM$ (lui aussi universel) peut devenir favorable d'un point de vue énergétique.

Chapitre V

Le problème d'Efimov pour trois bosons identiques

Nous abordons dans ce chapitre le "véritable" effet Efimov, tel qu'étudié dans la publication originale (Efimov 1970). Nous considérons trois particules identiques, que nous supposons être des bosons de spin nul ou polarisés, et nous nous intéressons à la situation où les particules interagissent deux à deux. Nous supposons que cette interaction est caractérisée par la longueur de diffusion a (positive ou négative) et nous nous concentrons sur le cas où $|a|$ est très grande devant la portée b du potentiel.

Dans le traitement qui va suivre, nous prendrons en fait un potentiel de portée nulle (le pseudo-potentiel), en traitant les interactions par l'intermédiaire des conditions aux limites de Bethe–Peierls que nous avons déjà rencontrées aux chapitres précédents. Le cas un peu plus général d'un potentiel binaire séparable est brièvement traité dans l'appendice §5.

Le résultat trouvé par Efimov est remarquable : pour $a = \pm\infty$, alors qu'il n'y a pas d'état lié à deux corps (au moins dans le modèle de pseudo-potentiel), on trouve une infinité d'états liés à trois corps, avec des énergies formant une suite géométrique. Comme nous avons déjà eu l'occasion de le dire, cette suite géométrique doit être tronquée du côté des énergies très négatives, puisqu'on requiert que ce système possède un état fondamental. Ceci nécessite l'introduction d'un paramètre à trois corps que nous noterons R_0 .

Une fois le paramètre à trois corps fixé, tout le spectre du problème s'en déduit (figure V.1). Du côté $a < 0$, quand on diminue la valeur de $|a|$, on voit les différents états trimères disparaître les uns après les autres car leur

énergie de liaison s'annule. Du côté $a > 0$, quand on diminue la valeur de a , les états trimères entrent en compétition avec un état à un dimère et une particule libre, et ils finissent eux aussi par disparaître. La physique efimovienne est donc véritablement une physique de résonance de diffusion, au voisinage du point $a = \pm\infty$.

Contrairement au cas mMM pour lequel l'approximation de Born–Oppenheimer permettait de mener pratiquement tous les calculs de manière analytique, le cas de trois particules identiques est nettement plus compliqué à traiter. Dans ce qui suit, nous allons d'abord détailler la solution dans le cas strictement résonant, ce qui nous permettra de retrouver l'interaction en $1/r^2$ qui a joué le rôle de fil directeur dans tout le cours de cette année. Nous donnerons ensuite les grandes lignes du traitement en dehors de la résonance, mais sans mener les calculs explicites qui nécessitent de toute façon une étape numérique conséquente si on veut obtenir une précision raisonnable.

Dans ses travaux des années 70, Efimov envisageait une application de son modèle à la physique nucléaire. Il mentionnait notamment un assemblage de trois particules α (deux protons, deux neutrons) pouvant former un état excité du noyau de carbone ^{12}C . Il s'est avéré que les conditions de résonance permettant d'atteindre $|a| \gg b$ (où b est la portée du potentiel à deux corps) n'étaient pas remplies dans ce cas. Il a fallu attendre 1994 pour voir apparaître le trimère d'atomes d'hélium (Schöllkopf & Toennies 1994), un état (presque) éligible au statut de trimère d'Efimov, puis les expériences sur les gaz d'atomes froids avec le travail pionnier du groupe de

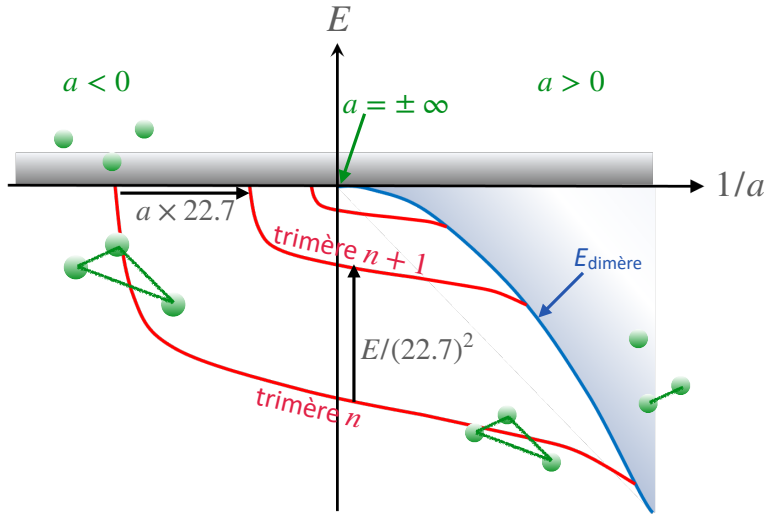


FIGURE V.1. Schéma de principe du spectre des dimères et des trimères, dans le cadre d’une interaction de portée nulle décrite par la longueur de diffusion a . L’introduction d’un paramètre à trois corps R_0 est nécessaire pour fixer la position des niveaux sur l’axe vertical ($1/a = 0$). Le reste du diagramme en découle de manière universelle.

R. Grimm à Innsbruck (Kraemer, Mark et al. 2006).

Comme nous l’avons écrit plus haut, nous ne mènerons pas ici tous les calculs pour arriver au diagramme énergétique final. Ces calculs peuvent se trouver dans plusieurs articles de revue écrits au cours des vingt dernières années, citons notamment ceux qui ont servi de base à la préparation de ce chapitre : Nielsen, Fedorov et al. (2001), Braaten & Hammer (2006), Naidon & Endo (2017), Greene, Giannakeas et al. (2017) et D’Incao (2018).

1 Paramétrisation de l’espace

Dans toute sa généralité, le problème à trois corps dans un espace tridimensionnel consiste à chercher les fonctions propres de l’hamiltonien, $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, dépendant de neuf variables d’espace. Il est bien sûr impossible d’aborder un tel problème de front et il est impératif de prendre en compte les différentes symétries du système pour le simplifier.

Pour commencer, nous pouvons nous laisser guider par la solution du problème à deux corps en interaction : partant des six variables d’espace $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$, la séparation "centre de masse – variable relative"

$$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} \longrightarrow \{\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_{12}\} \quad (1)$$

avec

$$\mathbf{R}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (2)$$

ramène le problème aux trois composantes de $\mathbf{r}_{12}$, puisque le mouvement du centre de masse $\mathbf{R}_{12}$ est celui d’une particule libre. Ensuite, la prise en compte de la symétrie de rotation de l’interaction à deux corps permet de se ramener à un problème uni-dimensionnel, ne portant que sur $r_{12} = |\mathbf{r}_{12}|$.

Pour le problème à trois corps, les choses ne sont pas si simples. La séparation du mouvement du centre de masse permet de passer simplement de 9 à 6 variables, mais il est ensuite difficile de simplifier davantage le problème général. Toutefois, nous allons voir dans cette partie que pour une interaction de portée nulle, décrite par la condition aux limites de Bethe–Peierls, on peut ramener le problème à 9 variables à un problème à 2 variables seulement.

1-1 Condition aux limites de Bethe–Peierls

On considère trois particules de masse m interagissant deux à deux par le pseudo-potentiel associé à la longueur de diffusion a . On prend en compte cette interaction en utilisant les conditions aux limites de Bethe–Peierls, qui imposent le comportement de la fonction d’onde totale $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ quand deux particules se rapprochent l’une de l’autre. Par exemple, quand la position de la particule 3 est fixée ainsi que le milieu

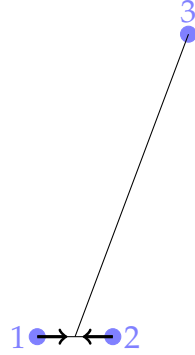


FIGURE V.2. Un exemple de situation où la condition aux limites de Bethe–Peierls (3) intervient.

R_{12} du segment (1-2), et quand la distance r_{12} tend vers 0 (figure V.2), on impose :

$$r_{12} \rightarrow 0 : \quad \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{a} \right) \Phi(\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_3) + \mathcal{O}(r_{12}). \quad (3)$$

Dans un développement en puissances de r_{12} , la condition de Bethe–Peierls impose donc une relation entre les deux premiers coefficients du développement, celui de $(r_{12})^{-1}$ et celui de $(r_{12})^0$, sans contraindre les coefficients suivants [termes en $(r_{12})^n$ avec $n \geq 1$].

Une fois la condition aux limites de Bethe–Peierls imposée, l’hamiltonien régissant l’évolution des trois particules est purement cinétique. La recherche d’états propres du système à trois corps passe donc par la résolution de l’équation aux valeurs propres :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\sum_{j=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_j}^2 \right) \Psi = E \Psi. \quad (4)$$

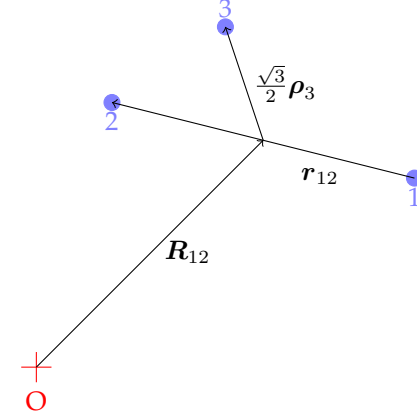


FIGURE V.3. Un des systèmes de coordonnées de Jacobi pour le problème à trois corps. Nous avons choisi ici celui qui particularise la paire (1, 2).

1-2 Coordonnées de Jacobi

Comme pour le problème à deux corps, le système total est invariant par translation. On peut donc séparer le mouvement du centre de masse

$$\mathbf{R}_{123} = \frac{1}{3} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3), \quad (5)$$

qui est celui d’une particule libre de masse $3m$, du mouvement relatif des trois particules. Il n’existe pas de choix simple des coordonnées relatives qui respectent pleinement la symétrie entre les trois particules. Nous utiliserons ici le système de Jacobi (voir figure V.3). En particulierisant la particule 3 vis-à-vis de la paire (1, 2), ce système revient à faire le changement de variables :

$$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\} \longrightarrow \{\mathbf{R}_{123}, \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3\} \quad (6)$$

où $\mathbf{R}_{123}$ et $\mathbf{r}_{12}$ ont déjà été définis ci-dessus et où

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \boldsymbol{\rho}_3 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{R}_{12}. \quad (7)$$

La raison d’être du coefficient $\sqrt{3}/2$ apparaîtra dans un instant¹.

Une fois ce choix de coordonnées effectué, il faut réécrire l’équation aux valeurs propres (4). Un calcul simple donne pour la somme des laplaciens

$$\sum_{j=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_j}^2 = \frac{1}{3} \nabla_{\mathbf{R}_{123}}^2 + 2 \left(\nabla_{\mathbf{r}_{12}}^2 + \nabla_{\mathbf{\rho}_3}^2 \right). \quad (10)$$

Le terme en $\frac{1}{3} \nabla_{\mathbf{R}_{123}}^2$ correspond à l’énergie cinétique du centre de masse. Le mouvement du centre de masse n’est pas affecté par la condition aux limites de Bethe–Peierls et ses fonctions propres sont les ondes planes $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_{123}}$ d’énergie $\hbar^2 K^2 / 6m$. Dans tout ce qui suit, nous supposons que nous sommes placés dans le référentiel du centre de masse du système à 3 corps, ce qui revient à choisir $\mathbf{K} = 0$, et nous omettons cette contribution $\frac{1}{3} \nabla_{\mathbf{R}_{123}}^2$. Nous travaillons donc maintenant avec la fonction inconnue $\Psi(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{\rho}_3)$ qui est solution de

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{m} \left(\nabla_{\mathbf{r}_{12}}^2 + \nabla_{\mathbf{\rho}_3}^2 \right) \Psi = E \Psi} \quad (11)$$

qu’il s’agit de résoudre en prenant en compte les conditions aux limites de Bethe–Peierls. Notons l’intérêt du coefficient $\sqrt{3}/2$ dans la définition (7) de $\mathbf{\rho}_3$ qui permet d’obtenir une écriture symétrique du laplacien vis-à-vis des deux variables $\mathbf{r}_{12}$ et $\mathbf{\rho}_3$.

Les trois systèmes de coordonnées de Jacobi. Comme nous l’avons dit, il n’y a pas de choix simple pour le système de coordonnées qui respecte la symétrie entre les trois particules. Le choix $\{\mathbf{r}_{12}, \mathbf{\rho}_3\}$ fait ci-dessus singularise

1. Nous avons adopté ici le même système de coordonnées que Naidon & Endo (2017). On trouve également dans la littérature [voir par exemple Greene, Giannakeas et al. (2017)] un choix correspondant à une répartition différente de ce coefficient $\sqrt{3}/2$, qui consiste à poser :

$$\tilde{\mathbf{r}}_{12} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^{1/2} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad \tilde{\mathbf{\rho}}_3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^{-1/2} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{R}_{12}), \quad (8)$$

de sorte que les angles de Delves et de Jacobi ne sont pas modifiés, et l’hyperrayon correspondant s’écrit $\tilde{R}^2 = \tilde{r}_{12}^2 + \tilde{\rho}_3^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} R^2$ où R est défini en (29). Pour le terme associé à l’hyperrayon dans l’hamiltonien [voir par exemple (32)], on doit alors faire la substitution :

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{R}^2} \quad \text{avec} \quad \mu = m/\sqrt{3}. \quad (9)$$

la particule 3. On peut bien sûr faire des choix équivalents en singularisant la particule 1 : $\{\mathbf{r}_{23}, \mathbf{\rho}_1\}$, ou la particule 2 : $\{\mathbf{r}_{31}, \mathbf{\rho}_2\}$. Nous aurons besoin dans la suite des formules de passage entre ces différents systèmes de coordonnées (rotation d’angle $\pm 2\pi/3$) :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{23} \\ \mathbf{\rho}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ +\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \mathbf{\rho}_3 \end{pmatrix} \quad (12)$$

et

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{31} \\ \mathbf{\rho}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & +\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \mathbf{\rho}_3 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Quand il s’agira d’imposer les conditions aux limites de Bethe–Peierls, il faudra prendre par exemple la limite $r_{12} \rightarrow 0$ en gardant $\mathbf{R}_{12}$ et $\mathbf{r}_3$ fixes, ce qui conduira pour les deux autres systèmes de coordonnées à :

$$\mathbf{r}_{23} \rightarrow -\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{\rho}_3, \quad \mathbf{\rho}_1 \rightarrow -\frac{\mathbf{\rho}_3}{2} \quad (14)$$

et

$$\mathbf{r}_{31} \rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{\rho}_3, \quad \mathbf{\rho}_2 \rightarrow -\frac{\mathbf{\rho}_3}{2}. \quad (15)$$

1-3 Composantes de Faddeev

La procédure générale consistant à fixer une paramétrisation de l’espace par un des trois jeux de coordonnées de Jacobi, $(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{\rho}_3)$ par exemple, puis à chercher directement les fonctions propres $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \equiv \Psi(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{\rho}_3)$ conduit à des calculs difficiles, même pour le cas d’un potentiel de portée nulle que nous envisageons ici. Une raison en est que ce choix de coordonnées qui singularise la particule 3 n’est pas "démocratique", pour reprendre l’expression de Nielsen, Fedorov et al. (2001). Plus prosaïquement, il ne facilite pas la prise en compte des conditions aux limites de Bethe–Peierls pour chacune des trois paires possibles. Pour la paire (1, 2), cette condition aux limites dans le système de coordonnées $(\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_{12}, \mathbf{\rho}_3)$ est bien sûr très simple puisqu’il s’agit de prendre la limite (figure V.2) :

$$\text{Paire (1, 2) :} \quad \mathbf{r}_{12} \rightarrow 0 \quad \text{à} \quad \mathbf{R}_{12}, \mathbf{\rho}_3 \text{ constants.} \quad (16)$$

Mais la prise en compte de la condition aux limites pour les paires (2, 3) et (3, 1) est moins immédiate.

Pour faciliter la prise en compte simultanée des trois conditions aux limites, nous allons chercher la fonction Ψ sous la forme :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1) + \chi(\mathbf{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2), \quad (17)$$

où nous avons introduit les deux systèmes de coordonnées de Jacobi singularisant respectivement la particule 1 et la particule 2. La fonction $\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ est appelée composante de Faddeev et sa construction précise est détaillée dans l’appendice de ce chapitre (§ 5). La structure de l’équation (17) a le mérite d’être par construction symétrique par un cycle d’échange des trois particules, ce qui est nécessaire puisque nous nous intéressons ici au problème de trois bosons identiques².

Sous cette forme, chacune des trois fonctions $\chi(\mathbf{r}_{ij}, \boldsymbol{\rho}_k)$ intervenant dans (17) va "prendre en charge" le comportement divergeant à courte distance de la fonction d’onde pour la paire (i, j) en question. Plus précisément, nous allons imposer

$$\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) \text{ diverge comme } \frac{1}{r} \text{ quand } r \rightarrow 0. \quad (18)$$

On utilisera donc le développement de Taylor :

$$r \rightarrow 0 : \quad \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \frac{A(\boldsymbol{\rho})}{r} + B(\boldsymbol{\rho}) + \mathcal{O}(r) \quad (19)$$

avec les coefficients de r^{-1} et r^0 qui se calculent à partir de :

$$A(\boldsymbol{\rho}) = \lim_{r \rightarrow 0} [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})] \quad B(\boldsymbol{\rho}) = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial (r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}))}{\partial r} \right]. \quad (20)$$

Comme nous l’avons indiqué plus haut, la condition aux limites de Bethe–Peierls vient relier l’ordre dominant en $1/r_{ij}$ et l’ordre suivant du développement, le terme constant en $-1/a$. Plus précisément, on a dans la limite $r_{12} \rightarrow 0$:

$$\text{Terme en } (r_{12})^{-1} : \quad \lim_{r \rightarrow 0} [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}_3)] \quad (21)$$

2. Il peut exister des situations telles que chacune des composantes de Faddeev est bien définie, mais $\chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1) + \chi(\mathbf{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2) = 0$. On parle alors de *spurious solutions* (Nielsen, Fedorov et al. 2001). Nous n’en rencontrerons pas ici.

et pour le terme en $(r_{12})^0$:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial (r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}_3))}{\partial r} \right] + \chi(-\frac{\sqrt{3}}{2} \boldsymbol{\rho}_3, -\frac{1}{2} \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(+\frac{\sqrt{3}}{2} \boldsymbol{\rho}_3, -\frac{1}{2} \boldsymbol{\rho}_3) \quad (22)$$

où nous avons utilisé le passage à la limite sur les différentes coordonnées de Jacobi donné en (14-15).

Pour notre problème, la condition aux limites de Bethe–Peierls s’écrit donc pour toute valeur de $\boldsymbol{\rho}$:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})]}{\partial r} \right] + \chi(-\frac{\sqrt{3}}{2} \boldsymbol{\rho}, -\frac{1}{2} \boldsymbol{\rho}) + \chi(+\frac{\sqrt{3}}{2} \boldsymbol{\rho}, -\frac{1}{2} \boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{a} \lim_{r \rightarrow 0} [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})] \quad (23)$$

Par ailleurs, la fonction $\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ satisfait l’équation aux valeurs propres identique à (11) :

$$-\frac{\hbar^2}{m} (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}}^2) \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = E \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) \quad (24)$$

qui correspond, rappelons-le, à une énergie purement cinétique puisque les interactions sont prises en compte ici par l’intermédiaire de la condition aux limites (23).

1-4 Hyperrayon et angle de Delves

À ce stade, l’équation (11), ou ses équivalents pour les deux autres systèmes de coordonnées de Jacobi, est une équation à six variables d’espace, qui peut être paramétrisée de multiples façons, une fois qu’on a adopté un système de coordonnées de Jacobi. Nous utiliserons le choix suivant³ qui précise la taille et la forme du triangle formé par les trois particules et qui définit ensuite l’orientation de ce triangle dans l’espace à trois dimensions :

— L’hyper-rayon R , défini par

$$R^2 = r_{12}^2 + \rho_3^2 = \frac{2}{3} (r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2), \quad (29)$$

3. Un autre choix communément utilisé dans la littérature pour traiter des potentiels de portée non nulle consiste à utiliser R , les trois angles d’Euler, et les deux angles θ et φ définissant les coordonnées r_{ij} [voir par exemple Greene, Giannakeas et al. (2017)] :

$$r_{ij} = \frac{R}{\sqrt{2}} [1 + \sin \theta \sin(\varphi + \nu_{ij})]^{-1/2} \quad (25)$$

renseigne sur la nature du groupement des trois particules : R devient grand dès qu’une particule s’éloigne des deux autres ; une petite valeur de l’hyper-rayon est donc obtenue si et seulement si les trois particules sont proches l’une de l’autre. Notons que l’hyper-rayon (29) est identique pour les trois systèmes de coordonnées de Jacobi, puisqu’il fait jouer des rôles identiques aux trois variables r_1, r_2, r_3 .

— l’angle de Delves α est défini par :

$$r_{12} = R \sin \alpha, \quad \rho_3 = R \cos \alpha, \quad 0 \leq \alpha \leq \pi/2. \quad (30)$$

En toute rigueur, nous devrions noter cet angle de Delves α_3 , puisqu’il renseigne sur la position de la particule 3 par rapport à la paire 1-2. On peut bien sûr définir également α_1 et α_2 , mais nous n’aurons pas à les utiliser dans ce qui suit⁴. L’angle de Delves indique si on a affaire à un triangle plutôt allongé (petites valeurs de α) ou plutôt aplati (α proche de $\pi/2$). Plus précisément, si $\alpha \equiv \alpha_3$ est proche de 0, la particule 3 est loin de la paire 1-2 ; si α est proche de $\pi/2$, la particule 3 est proche du milieu de 1 – 2 (voir figure V.4). En revanche quand $\alpha \sim \pi/4$, la forme du triangle n’est pas bien définie : il peut être allongé si la particule 3 est proche de 1 ou 2, ou quasi-équilatéral.

— L’angle de Jacobi $\beta = (\hat{r}_{12}, \hat{\rho}_3)$ (qui devrait lui aussi porter l’indice 3 pour lever toute ambiguïté). La connaissance de l’hyper-rayon et des deux angles α et β permet de préciser complètement la taille et la forme du triangle formé par les trois particules (figure V.5).

— Les trois paramètres angulaires restants correspondent aux trois angles

avec $\nu_{ij} = -\pi/6, -5\pi/6, +\pi/2$ pour $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$. L’opérateur énergie cinétique s’écrit alors $\hat{H}_{\text{cin}} = \hat{T}_R + \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3$ avec $\hat{T}_R$ inchangé par rapport à (32) et

$$\hat{T}_1 = -\frac{4\hbar^2}{mR^2} \frac{1}{\sin(2\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(2\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (26)$$

$$\hat{T}_2 = -\frac{2\hbar^2}{mR^2} \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2\hbar} \cos \theta \hat{J}_z \right)^2 \quad (27)$$

$$\hat{T}_3 = \frac{2\hat{J}_x^2}{mR^2(1 - \sin \theta)} + \frac{2\hat{J}_y^2}{mR^2(1 + \sin \theta)} + \frac{\hat{J}_z^2}{mR^2}. \quad (28)$$

où $\hat{J}$ représente le moment cinétique total du système. Dans le sous-espace de moment cinétique $J = 0$, la dépendance vis à vis des angles d’Euler disparaît et les états propres de l’hamiltonien sont des fonctions des trois variables R, θ, φ (D’Incao & Esry 2005a).

4. On notera la relation remarquable : $\sin^2 \alpha_1 + \sin^2 \alpha_2 + \sin^2 \alpha_3 = 3/2$.

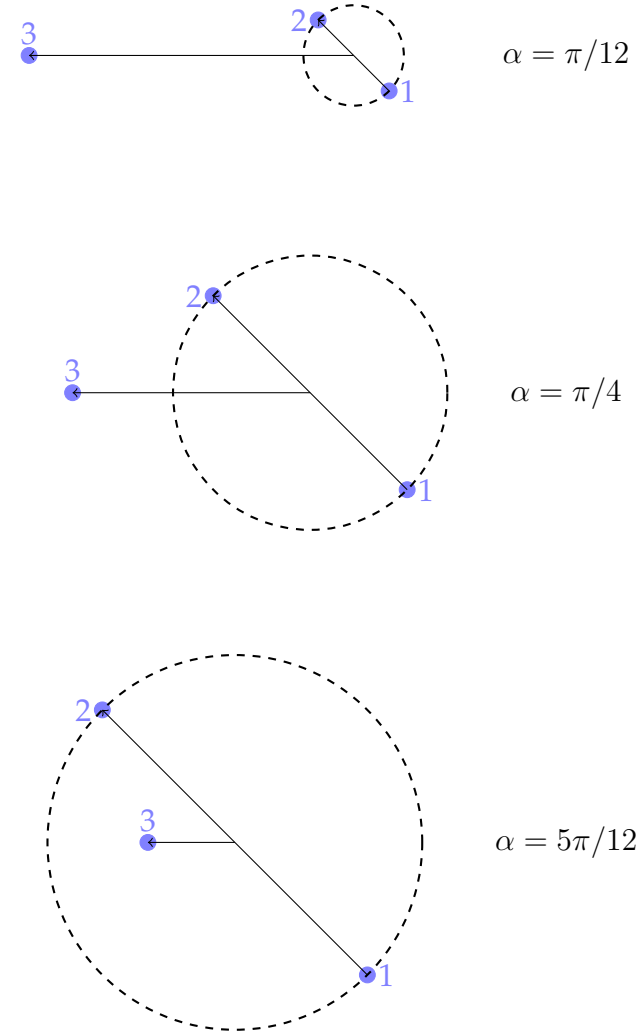


FIGURE V.4. Trois configurations possibles pour un même hyper-rayon R et différents angles de Delves α . Les positions des particules 1 et 2 ne sont pas complètement définies par la connaissance de R et α . On sait uniquement qu’elles sont situées sur le cercle pointillé et diamétralement opposées.

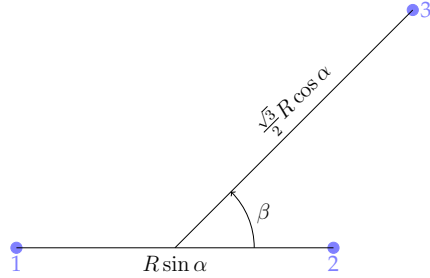


FIGURE V.5. Détermination de la forme du triangle formé par les trois particules à partir des paramètres R, α, β .

d’Euler nécessaires pour préciser l’orientation de ce triangle dans l’espace.

Une fois défini le système de coordonnées (R, α, Ω) où Ω désigne de manière collective l’angle de Jacobi β et les trois angles d’Euler, on peut écrire l’hamiltonien cinétique $-(\hbar^2/m)(\nabla_r^2 + \nabla_\rho^2)$ qui intervient dans (24) sous une forme relativement compacte (Pack & Parker 1987; Yuen 2020) :

$$\hat{H}_{\text{cin}} = \hat{T}_R + \hat{T}_\alpha + \hat{T}_\Omega \quad (31)$$

avec pour la partie hyperradiale :

$$\hat{T}_R = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} R^5 \frac{\partial}{\partial R}, \quad (32)$$

et pour la partie angle de Delves :

$$\hat{T}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{mR^2} \frac{1}{\sin^2(2\alpha)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sin^2(2\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha}. \quad (33)$$

Nous n’écrivons pas ici la forme explicite de $\hat{T}_\Omega$ en fonction de l’angle β et des angles d’Euler, mais nous donnons simplement sa structure en termes des deux opérateurs $\hat{L}$ et $\hat{J}$, où $\hat{L}$ désigne le moment cinétique du dimère aligné selon r et $\hat{J}$ le moment cinétique total des trois corps :

$$\hat{T}_\Omega = \frac{1}{mR^2} \left[\frac{(\hat{J} - \hat{L})^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{\hat{L}^2}{\sin^2 \alpha} \right]. \quad (34)$$

Quand les interactions entre les particules sont décrites par un potentiel binaire $V(r_{ij})$ quelconque, les distances r_{ij} font intervenir R, α et β . Il en va de même pour les états propres de l’hamiltonien total (cinétique+interactions), de sorte que les trois termes $\hat{T}_R, \hat{T}_\alpha$ et $\hat{T}_\Omega$ ont une contribution non triviale. Dans le cas d’une interaction décrite par le pseudo-potential, puisque l’hamiltonien est purement cinétique, on peut d’emblée se placer dans le sous-espace propre correspondant à $J = L = 0$, dont on peut montrer qu’il est le seul à donner naissance à l’effet Efimov.

Nous restreignons donc la recherche des fonctions $\chi(r, \rho)$ à des fonctions de R et de α uniquement (ou de manière équivalente de $r = R \sin \alpha$ et $\rho = R \cos \alpha$ uniquement). Par ailleurs, compte tenu de la structure de $\hat{T}_R$ et $\hat{T}_\alpha$, on a intérêt à faire le changement de fonction

$$\chi(r, \rho) = \frac{\Phi(R, \alpha)}{R^{5/2} \sin(2\alpha)} \quad (35)$$

et on arrive à l’équation aux valeurs propres :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m} \left[\partial_R^2 + \frac{1}{R^2} \left(\partial_\alpha^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right] \Phi(R, \alpha) = E \Phi(R, \alpha) \quad (36)$$

Il nous reste à préciser les conditions aux limites à imposer à $\Phi(R, \alpha)$.

Remarquons tout d’abord que le changement de fonction (35) requiert de bien définir le comportement de $\Phi(R, \alpha)$ aux points d’annulation du $\sin(2\alpha)$ figurant au dénominateur, c’est-à-dire $\alpha = 0$ ou $\alpha = \pi/2$:

- Quand $\alpha \rightarrow 0$ à R constant, la variable $r = R \sin \alpha$ tend vers 0 et on sait que $\chi(r, \rho)$ doit diverger comme $1/r$. Il suffit donc d’imposer que $\Phi(R, \alpha)$ soit régulière en $\alpha = 0$, mais elle n’a pas à s’annuler en ce point.
- Quand $\alpha \rightarrow \pi/2$ à R constant, la variable $\rho = R \cos \alpha$ tend vers 0, ce qui signifie que la particule 3 vient se positionner au milieu du segment 1 – 2 (figure V.4). La fonction $\chi(r, \rho)$ est régulière en ce point⁵ et il faut donc imposer que le numérateur de (35) s’annule au moins linéairement comme $\alpha - \pi/2$ en ce point :

$$\Phi(R, \frac{\pi}{2}) = 0 \quad (37)$$

5. sauf si $R \rightarrow 0$, mais ce cas où les trois particules sont superposées est "de mesure nulle".

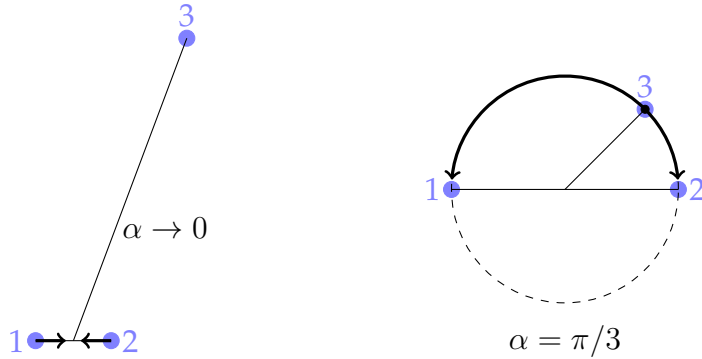


FIGURE V.6. Les deux valeurs de l’angle de Delves α pouvant amener une particule sur une autre, et intervenant donc dans la condition aux limites de Bethe–Peierls (38).

Par ailleurs, la condition aux limites (23) se transpose en :

$$\left[\frac{\partial \Phi(R, \alpha)}{\partial \alpha} \right]_{\alpha \rightarrow 0} + \frac{8}{\sqrt{3}} \Phi \left(R, \frac{\pi}{3} \right) = -\frac{R}{a} \Phi(R, 0) \quad (38)$$

La contribution de $\alpha = 0$ correspond au cas où les particules 1 et 2 se rapprochent l’une de l’autre (figure V.6, gauche), et la contribution $\alpha = \pi/3$ correspond au cas où la particule 3 peut venir au contact de la particule 1 ou de la particule 2 (figure V.6, droite).

2 La solution dans le cas résonnant

2-1 Séparation des variables pour $a = \pm\infty$

La structure de l’équation aux valeurs propres (36) se prête bien à la recherche des fonctions propres sous la forme factorisée du type $g_1(R) \times g_2(\alpha)$. Mais la condition aux limites (38) n’est généralement pas compatible avec cette factorisation. Il existe néanmoins deux cas où cette factorisation est possible, le cas résonnant $a = \pm\infty$ et le cas sans interaction $a = 0$. Nous

allons nous concentrer ici sur le cas résonnant et nous vérifierons ensuite que le cas sans interaction redonne bien le résultat (trivial) attendu.

Plaçons-nous dans le cas résonnant et cherchons une solution de (36-37-38) sous la forme

$$\Phi(R, \alpha) = \phi(R) F(\alpha). \quad (39)$$

Grâce au choix $a = \infty$, les conditions aux limites (37-38) ne font pas intervenir la fonction inconnue $\phi(R)$, mais seulement $F(\alpha)$:

$$F(\pi/2) = 0 \quad (40)$$

et

$$\left[\frac{dF}{d\alpha} \right]_{\alpha \rightarrow 0} + \frac{8}{\sqrt{3}} F(\pi/3) = 0. \quad (41)$$

L’équation aux valeurs propres (36) s’écrit quant à elle :

$$-\left[\frac{d^2 \phi}{dR^2} + \frac{\phi(R)}{4R^2} \right] F(\alpha) - \frac{\phi(R)}{R^2} \frac{d^2 F}{d\alpha^2} = \frac{mE}{\hbar^2} \phi(R) F(\alpha). \quad (42)$$

La procédure est alors standard. On commence par résoudre l’équation aux valeurs propres pour une des fonctions inconnues, ici $F(\alpha)$:

$$-\frac{d^2 F}{d\alpha^2} = s^2 F(\alpha) \quad (43)$$

où la valeur propre s^2 (réelle) doit être choisie pour respecter les conditions aux limites (40-41) et on reporte le résultat obtenu dans (42) pour déterminer la solution pour l’hyperrayon :

$$-\frac{d^2 \phi}{dR^2} + \frac{s^2 - 1/4}{R^2} \phi(R) = \epsilon \phi(R) \quad \text{avec} \quad \epsilon = \frac{mE}{\hbar^2} \quad (44)$$

On retrouve ici encore une équation de Schrödinger à une dimension dans le potentiel en $1/r^2$! La question que nous abordons dans le paragraphe suivant est de savoir si le coefficient s^2 peut être négatif pour que l’attraction due à ce potentiel puisse donner naissance à des états liés.

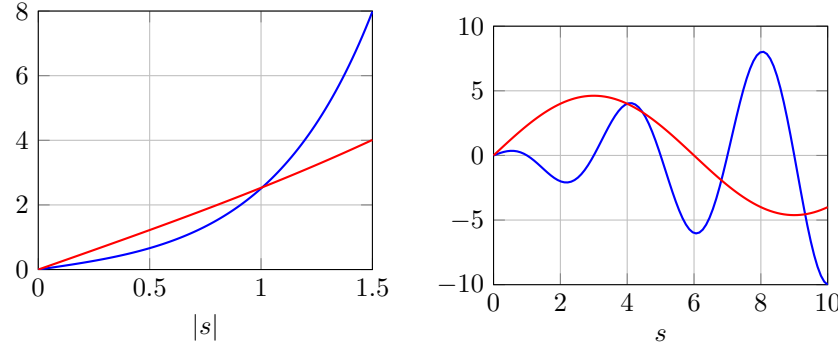


FIGURE V.7. Gauche : recherche des solutions de (46) avec $s^2 < 0$, cette équation se réécrivant sous la forme (48) pour la variable $|s|$; elle admet une solution unique donnée en (47). Droite : recherche des solutions de (46) avec $s^2 > 0$. Sur chaque graphe, les courbes bleue et rouge correspondent respectivement aux membres de gauche et de droite des équations (46) et (48).

2-2 Équation angulaire et effet Efimov

La solution de l’équation aux valeurs propres pour la variable angulaire, $F'' + s^2 F = 0$ avec s^2 réel positif, négatif ou nul, compatible avec la première condition aux limites $F(\pi/2) = 0$ s’écrit, à une constante multiplicative près sans importance :

$$F(\alpha) = \sin \left[s \left(\frac{\pi}{2} - \alpha \right) \right]. \quad (45)$$

Injectons cette forme dans la seconde condition aux limites (41) :

$$s \cos(s\pi/2) = \frac{8}{\sqrt{3}} \sin(s\pi/6) \quad (46)$$

où s est réel ou imaginaire pur.

Les nombres s satisfaisant (46) viennent par paires $(s, -s)$, la solution $s = 0$ étant à écarter car elle conduit à une fonction $F(\alpha)$ identiquement nulle. Une étude numérique simple montre que l’équation (46) admet deux types de solutions (voir aussi la résolution graphique en figure V.7) :

— Une double solution imaginaire pure

$$s_0 = \pm i |s_0| \quad \text{avec} \quad |s_0| = 1.00624 \dots \quad (47)$$

l’équation (46) se réécrivant dans ce cas

$$|s_0| \cosh(|s_0|\pi/2) = \frac{8}{\sqrt{3}} \sinh(|s_0|\pi/6) \quad (48)$$

où toutes les quantités sont réelles. L’équation portant sur l’hyperrayon s’écrit alors

$$-\frac{d^2\phi}{dR^2} - \frac{|s_0|^2 + 1/4}{R^2} \phi(R) = \epsilon \phi(R) \quad (49)$$

— Une famille infinie de solutions $\pm s_j$ avec s_j réel positif, $j \geq 1$.

Comme nous avons eu l’occasion de le voir à plusieurs reprises dans les chapitres précédents, la condition pour que l’équation aux valeurs propres (44) sur la variable R admette un état lié, c’est-à-dire une valeur propre $\epsilon < 0$, est que le coefficient du terme en $1/R^2$, ici $s^2 - 1/4$, soit strictement inférieur à $-1/4$. Il faut donc que s^2 soit négatif, ce qui vient sélectionner un et un seul type de solution, $s_0 = \pm i |s_0|$, conduisant à l’équation aux valeurs propres (49).

Une fois cette solution identifiée, toute la procédure que nous avons développée dans les chapitres précédents s’applique sans modification. Partant de l’équation (49), on sait que :

- Il faut introduire une condition aux limites aux petites valeurs de R , par exemple un cœur dur en R_0 , pour empêcher la "chute sur le centre". On obtient ainsi un état fondamental d’énergie $E_0 < 0$ avec une fonction d’onde $\phi(R)$ sans nœud en dehors du point R_0 .
- Une fois imposée cette condition, on obtient une infinité d’états liés dont les énergies forment en très bonne approximation une suite géométrique

$$\frac{E_n}{E_{n+1}} \approx \lambda^2 \quad \text{avec} \quad \lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 22.7, \quad \lambda^2 \approx 515 \quad (50)$$

— La fonction d’onde à énergie nulle est log-périodique :

$$\phi(R) = \sin [|s_0| \ln(R/R_0)] \quad (51)$$

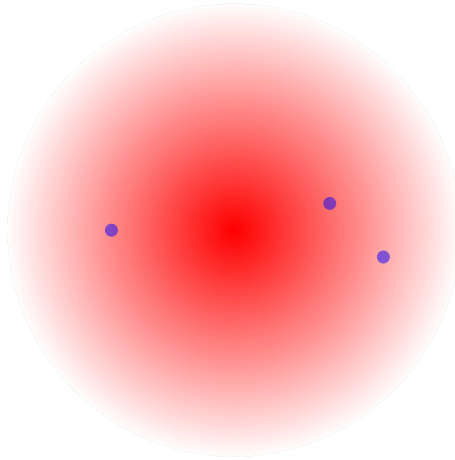


FIGURE V.8. Une configuration typique d’un trimère d’Efimov, correspondant à une petite valeur de l’angle de Delves α , et donc un triangle allongé. L’état des trois particules est invariant par rotation, ce qui est représenté par le halo rouge. Les trois points bleus représentent un résultat possible (et relativement probable, à une rotation globale près) d’une mesure des positions.

et on retrouve cette structure pour les états liés tant qu’on se limite à des valeurs de R petites devant leur point de rebroussement extérieur.

On notera que la fonction d’onde angulaire $F(\alpha)$ trouvée en (45), qui se réécrit $\sinh[|s_0|(\frac{\pi}{2} - \alpha)]$ dans le cas efimovien, est relativement piquée autour de $\alpha = 0$, ce qui indique que les trimères obtenus dans ce cas ont une forme de triangle allongé, comme représenté sur la figure V.8 (Naidon & Endo 2017).

2-3 Vérification : le cas sans interaction

Nous avons pu résoudre le problème aux valeurs propres (36-37-38) dans le cas $a = \infty$ car la recherche des solutions sous une forme factorisée était alors possible. Il existe une autre situation où c’est également le cas : $a = 0$. Nous allons vérifier qu’on retrouve alors bien les résultats attendus en absence d’interaction.

Quand la longueur de diffusion s’annule (ou plus précisément tend vers 0 par valeurs négatives), c’est-à-dire quand les particules n’interagissent pas entre elles, la condition aux limites (38) impose

$$a = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(R, 0) = 0. \quad (52)$$

Nous cherchons là aussi les fonctions solutions de (36) sous la forme factorisée

$$\Phi(R, \alpha) = \phi(R) F(\alpha) \quad (53)$$

avec les conditions aux limites (37-53) :

$$F(0) = 0, \quad F(\pi/2) = 0. \quad (54)$$

La fonction $F(\alpha)$ doit ici aussi être solution de l’équation aux valeurs propres $F'' + s^2 F = 0$ et les conditions aux limites (54) entraînent immédiatement :

$$F(\alpha) = \sin(s\alpha) \quad \text{avec} \quad s = 2j, \quad j \in \mathbb{N}^*. \quad (55)$$

On injecte cette forme dans (36) pour en déduire l’équation vérifiée par $\phi(R)$:

$$-\frac{d^2\phi}{dR^2} + \frac{4j^2 - 1/4}{R^2}\phi(R) = \epsilon\phi(R). \quad (56)$$

Cela correspond à une équation de Schrödinger pour le potentiel répulsif (de type centrifuge) $(4j^2 - 1/4)/R^2$. Toutes les valeurs propres ϵ sont donc positives ou nulles et il n’y a pas d’état lié dans ce cas. C’est bien sûr le résultat attendu en absence d’interaction.

3 La solution dans le cas général

3-1 Séparation des variables angulaires et radiales

Quand la longueur de diffusion a n’est pas nulle ni infinie, la prise en compte de la condition aux limites (38) nécessite de manipuler des fonctions à deux variables, ce qui est numériquement compliqué.

En pratique, une approche puissante consiste à supposer dans une première étape que R est un paramètre fixé pour résoudre le problème angulaire décrit par la variable α , puis dans une deuxième étape injecter le résultat dans l’équation pour R . L’idée physique sous-jacente est que l’angle de Delves α est une variable rapide et l’hyperrayon une variable lente, ce qui permet de faire les approximations correspondantes lors de la deuxième étape.

Sur le plan mathématique, cette approche est rendue possible par le fait que la condition aux limites (38) est locale en R , c’est-à-dire qu’elle ne fait intervenir que les valeurs de la fonction recherchée $\Phi(R, \alpha)$ en un point R donné, mais pas ses dérivées partielles par rapport à R .

On cherche donc à résoudre (36) avec les conditions aux limites (37-38) en écrivant la solution sous la forme

$$\Phi(R, \alpha) = \sum_i \phi_i(R) F_i(\alpha; R) \quad (57)$$

où les F_i sont des fonctions de α à R fixé, solutions de l’équation aux valeurs propres

$$-\frac{d^2 F_i(\alpha; R)}{d\alpha^2} = s_i^2(R) F_i(\alpha; R) \quad (58)$$

et satisfaisant les conditions aux limites (37-38), toujours à R fixé.

Une fois l’ensemble des fonctions propres F_i et des valeurs propres s_i^2 connues, on injecte la forme (57) dans l’équation aux valeurs propres (36) et on obtient un ensemble *a priori* infini d’équations couplées pour les $\phi_i(R)$:

$$-\frac{d^2 \phi_i}{dR^2} + \frac{s_i^2(R) - 1/4}{R^2} \phi_i(R) + \sum_j \hat{O}_{ij}(R) \phi_j(R) = \epsilon \phi_i(R). \quad (59)$$

Les opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ ont une structure qui est usuelle dans le formalisme de l’approximation adiabatique ; ils font intervenir les produits scalaires des fonctions $F_i(\alpha; R)$ et $F_j(\alpha; R)$ et de leurs dérivées par rapport à R . Ils décrivent la "rotation" des vecteurs de base sur lesquels on effectue le développement, en l’occurrence la dépendance en R des fonctions angulaires F_i . Le terme $i = j$ correspond à un *potentiel géométrique* (scalaire et vecteur) qui vient s’ajouter au *potentiel hypersphérique* $[s_i^2(R) - 1/4]/R^2$ entrant

dans l’évolution (59) de la fonction d’onde $\phi_i(R)$. Les termes non diagonaux $i \neq j$ décrivent des couplages entre les différents canaux.

Nous n’explicitons pas dans ce chapitre la forme des opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ [voir par exemple Braaten & Hammer (2006), eqs. (114)-(116) pour une expression détaillée], mais nous y reviendrons dans le chapitre suivant lors de la discussion de la valeur du paramètre à trois corps pour une interaction de van der Waals.

Quand on se place à résonance ou à interaction nulle (cf. section précédente), les fonctions $F_i(\alpha; R)$ sont en fait indépendantes de R ; tous les $\hat{O}_{ij}(R)$ sont alors nuls. En dehors de ces valeurs particulières de la longueur de diffusion a , les opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ sont non nuls et on peut, suivant la précision recherchée pour le calcul numérique, en prendre un certain nombre en compte. À l’ordre le plus bas, l’approximation adiabatique hypersphérique consiste à négliger tous les opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ pour ne garder que

$$-\frac{d^2 \phi_i}{dR^2} + \frac{s_i^2(R) - 1/4}{R^2} \phi_i(R) \approx \epsilon \phi_i(R) \quad (60)$$

Toute la physique du problème – au moins pour les états de moment cinétique nul auxquels nous nous sommes restreints – est alors contenue dans les valeurs propres $s_i^2(R)$ du problème angulaire qui définissent les potentiels hypersphériques.

3-2 Les potentiels hypersphériques

La recherche des valeurs propres $s_i^2(R)$ et des fonctions propres $F_i(\alpha; R)$ pour l’équation aux valeurs propres (58) avec les conditions aux limites (37-38) se fait de manière similaire au cas résonant de la partie 2. On cherche la fonction propre à R fixé sous la forme

$$F(\alpha; R) = \sin \left[s(R) \left(\frac{\pi}{2} - \alpha \right) \right] \quad (61)$$

qui assure automatiquement que F est solution de $F'' + s^2 F = 0$ avec la condition aux limites $F(\pi/2; R) = 0$. La prise en compte de la condition aux limites (38) impose :

$$-s \cos(s\pi/2) + \frac{8}{\sqrt{3}} \sin(s\pi/6) = -\frac{R}{a} \sin(s\pi/2) \quad (62)$$

qui se résout numériquement pour chaque valeur de R/a .

Intéressons-nous ici à la plus petite valeur propre $s_{\min}^2(R)$ de (58) :

- Pour $a > 0$, cette valeur propre est négative pour toutes les valeurs de R , i.e. $s_{\min}(R)$ est imaginaire pur.
- Pour $a < 0$, on trouve $s_{\min}^2(R)$ négatif aux petites valeurs de R ($R \lesssim |a|$) et $s_{\min}^2(R)$ positif au delà.

La variation de $s_{\min}^2(R)$ dans ces deux cas est représentée sur la figure V.9 (haut) [voir aussi les figures 4 et 5 de Nielsen, Fedorov et al. (2001)]. On notera que les deux solutions pour $a > 0$ et $a < 0$ tendent vers $-|s_0|^2$ quand $R \ll |a|$ avec $|s_0| = 1.00624 \dots$, ce qui permet de retrouver le cas $a = \pm\infty$ discuté à la section précédente et qui donne lieu à l’effet Efimov. Quand on prend la limite inverse $R \gg |a|$ pour $a < 0$, on retrouve le résultat $s = 2$ correspondant à la valeur la plus basse du cas sans interaction [cf. (55)]. Quand $R \gg a$ avec $a > 0$, la valeur $s_{\min}^2(R)$ tend vers $-\infty$, ce qui correspond à la formation de l’état lié du dimère.

On montre également sur la figure V.9 (en bas) les potentiels hypersphériques associés :

$$V_{\text{hyp}}(R) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{s_{\min}^2(R) - 1/4}{R^2} \quad (63)$$

Pour $R \ll |a|$, le fait que $s_{\min}^2(R)$ tende vers $-(1.00624)^2$ entraîne qu’on retrouve le potentiel en $1/R^2$ du cas résonnant. Aux grandes valeurs de R , $V(R)$ tend vers 0 pour $a < 0$ et vers l’énergie de l’état lié du dimère, $-\hbar^2/ma^2$, pour $a > 0$.

Nous nous sommes concentrés ici sur la plus petite valeur propre $s_{\min}^2(R)$ de (58). Toutes les autres valeurs propres sont strictement positives (quel que soit le signe de a) et elles conduisent pour $R \ll a$ à un potentiel hypersphérique en $1/R^2$ répulsif (Braaten & Hammer 2006). Par conséquent, seul le potentiel associé à cette valeur propre minimale peut donner naissance à des états liés à trois corps "universels".

3-3 Universalité pour le problème à trois bosons

Une fois fixé le paramètre à trois corps qui régularise le problème pour $a = \pm\infty$, on peut utiliser le formalisme hypersphérique pour déterminer la

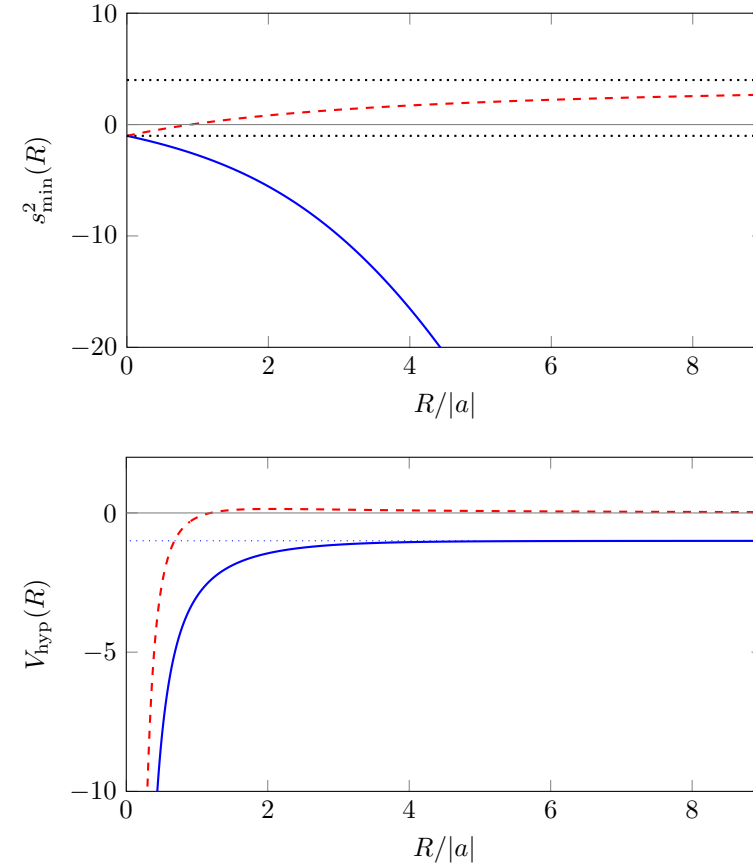


FIGURE V.9. Haut : La première valeur propre $s_{\min}^2(R)$ pour $a > 0$ (courbe bleue continue) et pour $a < 0$ (courbe rouge tirée). Les deux lignes pointillées indiquent la limite d’interaction nulle ($s = 2$, voir (55)) et le cas résonnant $s_0 = i \times 1.00624$. Bas : Potentiel hypersphérique associés $V_{\text{hyp}}(R) = [s_{\min}^2(R) - 1/4]/R^2$ en unités de $\hbar^2/ma^2$. Dans le cas $a > 0$, on retrouve la limite de l’énergie du dimère, $-\hbar^2/ma^2$, quand $R \rightarrow \infty$ (trait pointillé).

variation des états propres du système avec a .

La forme générale de cette variation est très similaire à celle trouvée au chapitre précédent dans le cadre de l’approximation de Born–Oppenheimer pour le problème mMM . On trouve une série de branches énergétiques correspondantes aux différents états liés du trimère. Comme dans le cas mMM , le diagramme possède une invariance d’échelle remarquable : la connaissance d’une branche dans le plan $(1/a, E)$ permet d’en déduire toutes les autres par une simple homothétie de centre $(0, 0)$. La seule différence avec le cas mMM réside dans le fait que le rapport d’homothétie est maintenant fixé et déterminé par $\lambda = e^{\pi/|s_0|}$ avec $|s_0| = 1.00624$, alors que c’était une fonction de M/m dans le cas précédent.

Nous avons tracé en figure V.10 cette branche énergétique pour un des états du trimère avec le système de coordonnées $(\sqrt{1/|a|}, |E|^{1/4})$ déjà utilisé au chapitre 4 pour le problème mMM . La courbe continue est le résultat d’un calcul numérique précis (Braaten, Hammer & Kusunoki 2003; Naidon & Endo 2017). La courbe pointillée représente la solution de l’équation de Schrödinger à un canal (60), ne prenant en compte que le potentiel hypersphérique $V_{\text{hyp}}(R)$ du canal le plus bas donné en (63) et tracé en figure V.9. On constate que cette approximation à un canal, qui revient à négliger les contributions de tous les opérateurs $\mathcal{O}_{ij}$, est excellente pour notre modèle d’une interaction binaire de portée nulle.

Nous montrons également en figure V.11 une représentation de l’empilement des différentes branches. Résumons les principales caractéristiques de ces deux diagrammes :

- Du côté $a < 0$ de la résonance, on retrouve les seuils d’apparition des trimères $a_-^{(n)}$, $n = 0, 1, \dots$ qui forment une progression géométrique, de raison $\lambda \approx 22.7$. Pour chaque seuil, on prédit un pic dans le taux de recombinaison à trois corps L_3 dans un gaz atomique, sur lequel nous reviendrons au prochain chapitre.
- À résonance, les énergies des trimères forment une suite géométrique de raison $\lambda^2 \approx 515$ [cf. (50)].
- Du côté $a > 0$ de la résonance, l’énergie du trimère n rejoint celle du dimère (+ un atome libre au repos) pour une valeur $a_*^{(n)}$. On s’attend en ces points $a_*^{(n)}$ à une résonance du taux de relaxation inélastique atome-dimère β_{AD} . Les valeurs des $a_*^{(n)}$ forment également une suite

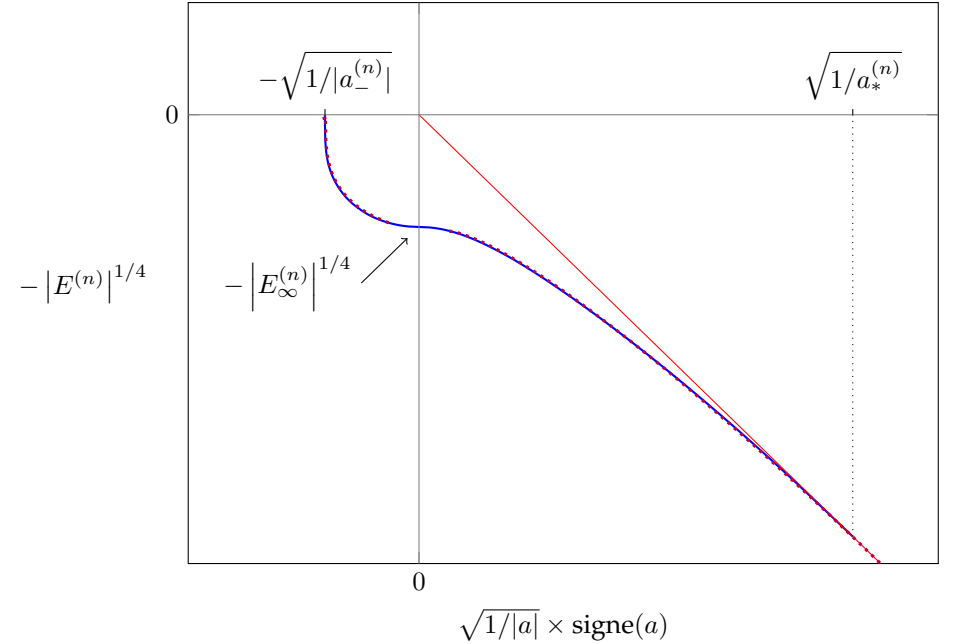


FIGURE V.10. Courbe continue : calcul numérique précis de la branche énergétique $\mathcal{E}^{(n)}$ du $n^{\text{ième}}$ trimère d’Efimov en fonction de $1/a$. Courbe pointillée : résolution de l’équation de Schrödinger à un canal (60), pour le potentiel hypersphérique (63). La longueur de diffusion a et l’énergie $\mathcal{E}^{(n)}$ sont définies ici à une constante multiplicative près, qui dépend du paramètre à trois corps R_0 . La droite rouge côté $a > 0$ représente le dimère d’énergie $E = -\hbar^2/ma^2$. La branche énergétique du trimère $n + 1$ se déduit de cette courbe par une homothétie de centre O et de rapport $1/\lambda$. Le tracé de la courbe continue a été effectué en utilisant la paramétrisation fournie par Naidon & Endo (2017) [leur équation (2.40)].

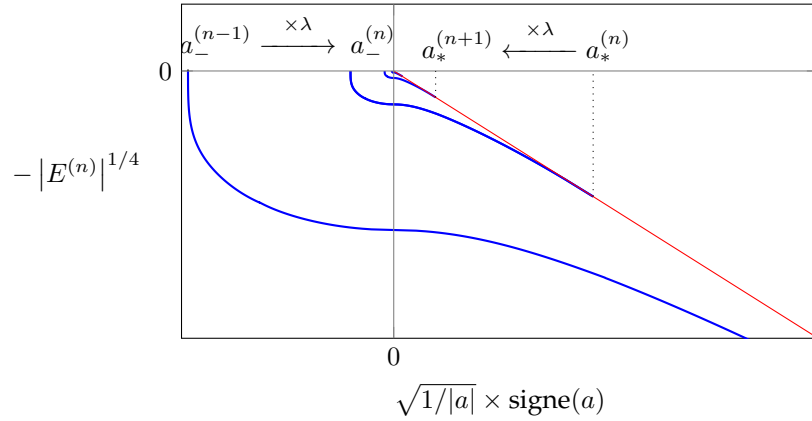


FIGURE V.11. Les énergies des trimères d’Efimov au voisinage d’une résonance en fonction de $1/a$. La droite rouge côté $a > 0$ représente le dimère d’énergie $E = -\hbar^2/ma^2$.

géométrique de raison λ .

- Les valeurs des $a_-^{(n)}$ et des $a_*^{(n)}$ (de part et d’autre de la résonance) sont reliées par [voir par exemple Braaten & Hammer (2006) et Xie, Van de Graaff et al. (2020) et figure V.10] :

$$\frac{a_-^{(n)}}{a_*^{(n)}} \approx 21.3 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{a_-^{(n-1)}}{a_*^{(n)}} \approx 0.94 \quad (64)$$

La valeur de $a_-^{(n)}$ et le nombre d’onde à résonance $\kappa_\infty^{(n)}$ défini par $E_\infty^{(n)} = -\hbar^2 (\kappa_\infty^{(n)})^2 / m$ sont reliés par (Naidon & Endo 2017) :

$$a_-^{(n)} \kappa_\infty^{(n)} \approx 1.51 \quad (65)$$

Comme dans le cas mMM , ces lois d’échelle sont d’autant mieux vérifiées que n est grand.

4 Un premier exemple : le trimère d’hélium

Après les prédictions d’Efimov, les physiciens ont recherché des systèmes dans lesquels les conditions requises pouvaient être réalisées, aussi bien avec des atomes que des noyaux (Efimov 2011). Il fallait que les interactions soient essentiellement à basse énergie, descriptibles par une diffusion en onde s , et que la longueur de diffusion associée a soit grande devant la portée b des potentiels en jeu, ce qui est *a priori* une situation exceptionnelle : on a d’ordinaire $a \sim b$.

Les gaz quantiques avec leurs résonances de diffusion à la Fano-Feshbach sont bien sûr des candidats idéaux pour tester cette physique puisqu’ils permettent d’atteindre des longueurs de diffusion arbitrairement élevée avec des températures plus basses par plusieurs ordres de grandeur que l’échelle d’énergie $\hbar^2/mb^2$. Nous décrirons en détail au chapitre suivant un certain nombre d’expériences menées avec ces gaz depuis 2005. Dans cette partie, nous allons présenter les résultats sur un atome qui est apparu rapidement très prometteur, l’hélium (Lim, Duffy et al. 1977).

4-1 Un bon candidat : l’atome d’hélium

Le potentiel d’interaction entre deux atomes d’hélium est bien connu. Nous l’avons décrit dans le cours 2021. Sa portée, caractérisée par la longueur de van der Waals R_{vdW} , est de 0.27 nm et la longueur de diffusion $a = 9.04$ nm est ≈ 30 fois plus grande. Ce puits de potentiel, tracé sur la figure V.12, admet un et un seul état lié, qui a été observé pour la première fois par Schöllkopf & Toennies (1994) dans une expérience d’interférométrie atomique que nous rappelons brièvement ci-dessous. L’énergie de liaison de ce dimère ($\sim 10^{-7}$ eV) est beaucoup plus faible que la profondeur du puits de potentiel entre les deux atomes ($\sim 10^{-3}$ eV), ce qui indique qu’il n’est que très marginalement lié (Grisenti, Schöllkopf et al. 2000). La distance moyenne entre les deux atomes est ~ 5 nm, comparable à la longueur de diffusion et beaucoup plus grande que R_{vdW} .

Dans l’expérience de Schöllkopf & Toennies (1994), un jet supersonique d’hélium est formé à partir d’un container à haute pression (15 bar) percé d’un trou de diamètre 5 microns. Le jet sortant par cet orifice se propage dans le vide, il se refroidit du fait de la détente supersonique et devient

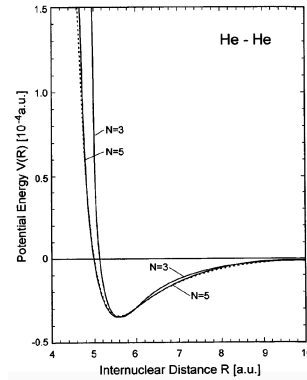


FIGURE V.12. Potentiel d’interaction entre deux atomes d’hélium dans leur état fondamental. Le nombre N indique l’ordre du calcul dans un développement multipolaire de l’interaction [voir le cours 2021, chap. 1, pour plus de détails]. Figure extraite de Tang & Toennies (2003).

donc quasi-monocinétique ($\Delta v/v \lesssim 5\%$). La longueur d’onde associée à chaque type de particule (atome, dimère, trimère), $\lambda_{dB} = h/mv$, est alors bien définie. Ainsi, pour une température de 30 K, on a $\lambda_{dB} = 0.18$ nm pour les atomes He.

Ce jet est collimaté par deux fentes de largeur 10 microns, situées à 47 cm l’une de l’autre, puis il traverse un réseau périodique sur lequel les particules peuvent être diffractées (figure V.13). La période du réseau est $d = 200$ nm et on s’attend à observer des pics de diffraction à des angles $\theta_n \approx n\lambda_{dB}/d$.

Un exemple de signal est montré sur la figure V.14. On y voit un pic principal à gauche, correspondant aux particules non diffractées. À droite, pour un angle θ_1 , le grand pic correspond au premier ordre ($n = 1$) de diffraction des atomes. Entre ces deux grands pics se trouve le signal intéressant. On voit deux pics à $\theta_2 = \theta_1/2$ et $\theta_3 = \theta_1/3$, qui correspondent à des particules dont la longueur d’onde est respectivement 2 et 3 fois plus faible que celles des atomes. Il s’agit respectivement du dimère et du trimère, qui vont à la même vitesse que les atomes du fait des collisions en sortie de la source, mais qui ont une masse 2 et 3 fois plus grande.

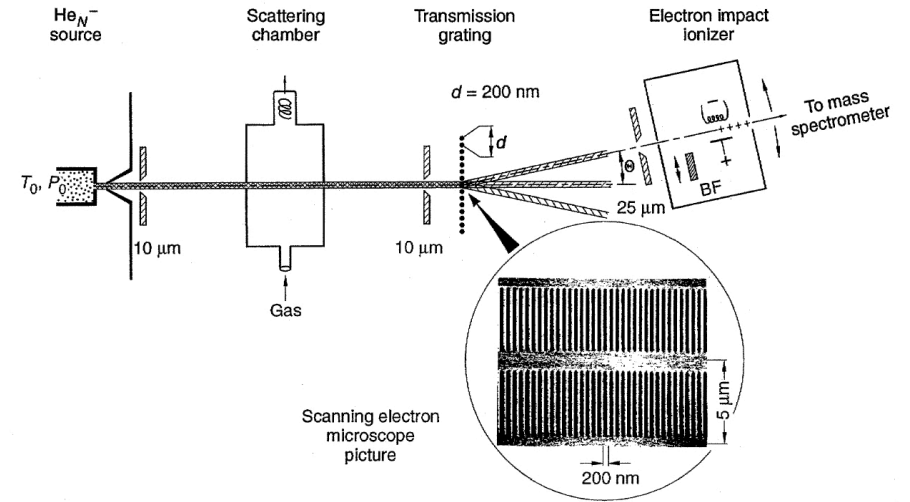


FIGURE V.13. Schéma expérimental utilisant la diffraction d’ondes de matière par un réseau pour détecter la présence de dimères et de trimères d’hélium dans un jet supersonique d’hélium atomique. Figure extraite de Schöllkopf & Toennies (1994).

4-2 Le trimère He₃ fondamental

L’expérience de Schöllkopf & Toennies (1994) révèle donc l’existence d’un trimère lié He₃. La très bonne connaissance du potentiel d’interaction entre deux atomes d’hélium permet de bien comprendre la structure de ce trimère. Sa taille est de l’ordre du nanomètre – donc nettement plus petite que le dimère – et sa structure est proche d’un triangle équilatéral.

Nous avons représenté sur la figure V.15 la courbe habituelle donnant l’énergie de liaison du trimère dans le plan ($1/a$, E). Cette courbe a été obtenue en prenant le potentiel réel (conduisant à la longueur de diffusion $a = 9.04$ nm) et en le multipliant par un facteur sans dimension ζ . On observe les éléments suivants (Braaten & Hammer 2006) :

- Pour $\zeta = 1$ (le "vrai" potentiel), on s’attend à ce qu’il y ait deux trimères liés, d’énergie -131.84 mK et de taille ~ 1 nm [celui observé par

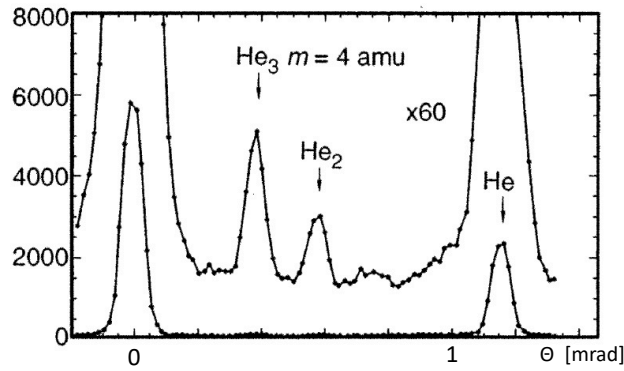


FIGURE V.14. Distribution angulaire des particules diffractées par le réseau. Comme le jet est monocinétique, la comparaison des angles de diffraction permet de remonter directement à la masse des particules diffractées. Le grand pic de gauche correspond au jet non diffracté, et le grand pic de droite à l'ordre 1 de la diffraction pour les atomes d'hélium. Les deux petits pics intermédiaires révèlent l'existence des dimères He_2 et des trimères He_3 . Figure extraite de Schöllkopf & Toennies (1994).

Schöllkopf & Toennies (1994)] et un autre beaucoup plus faiblement lié d'énergie $E = -2.65 \text{ mK}$, de taille $\sim 8 \text{ nm}$.

- Quand on diminue ζ , on trouve que la longueur de diffusion devient infinie pour $\zeta = 0.97$. L'état dimère disparaît alors et on a une infinité d'états trimères. L'écart entre le trimère fondamental et le premier trimère excité est un facteur 570 (à comparer au facteur 515 attendu pour le modèle de potentiel de portée nulle).
- La branche du trimère fondamental disparaît pour $\zeta \approx 0.9$.
- Quand on augmente ζ au dessus de 1, on constate que contrairement au cas du potentiel de portée nulle, la branche du trimère fondamental ne rejoint pas la branche du dimère, alors que la branche du trimère excité le fait.

On peut donc s'interroger sur la nature Efimovienne du trimère fondamental. Comme le soulignent Braaten & Hammer (2006), le fait que le

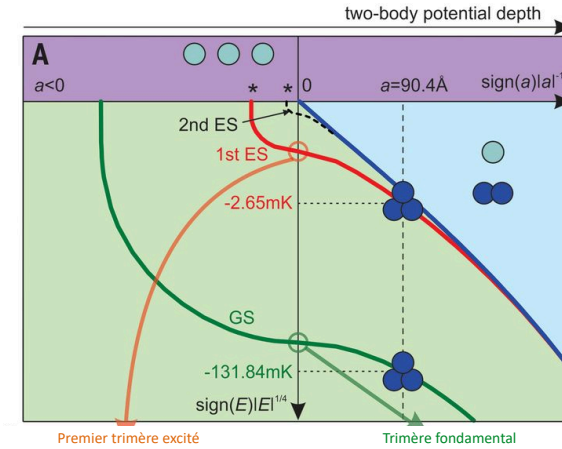


FIGURE V.15. Dimère et trimère d'hélium : diagramme énergétique calculé pour le potentiel d'interaction à deux corps $\zeta V(r)$. Pour $\zeta = 1$, on obtient le "vrai" potentiel d'interaction He-He . La résonance de diffusion $a = \pm\infty$ est obtenue pour $\zeta = 0.97$. Figure adaptée de Kunitski, Zeller et al. (2015).

passage de $a = 9 \text{ nm}$ à $a = \infty$ donne "presque" le bon rapport entre les énergies du trimère fondamental et le premier trimère excité plaide en la faveur d'une réponse positive. En revanche, le comportement à $\zeta > 1$ est différent de celui attendu : la longueur de diffusion a_* n'existe pas.

De façon peut-être plus problématique, la géométrie de ce trimère n'est pas celle attendue pour un trimère d'Efimov, à savoir un triangle isocèle allongé. Ce "défaut" est illustré sur la figure V.16 gauche. Pour réaliser cette figure, on positionne dans les deux coins inférieurs gauche et droit les deux atomes les plus éloignés l'un de l'autre à l'intérieur du trimère. On représente en fausses couleurs la densité de probabilité pour trouver le troisième atome. Pour un trimère allongé de type Efimov, on s'attend à trouver ce troisième atome proche d'un des deux coins inférieurs. Pour le trimère fondamental, on observe une distribution très différente. Pour le trimère excité en revanche, la distribution prédite correspond bien à celle attendue pour un trimère d'Efimov (figure V.16, droite). Ce point a bien sûr conduit les expérimentateurs à chercher à mettre en évidence ce trimère excité.

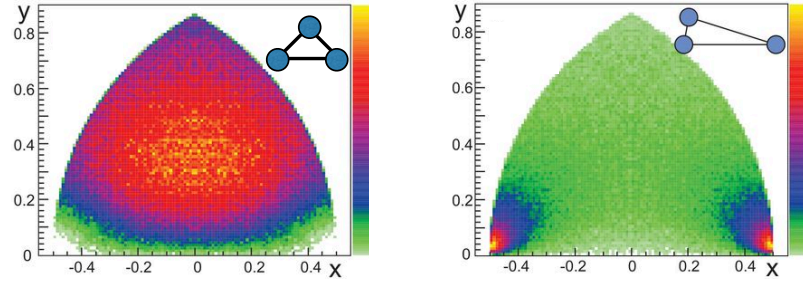


FIGURE V.16. Répartition des atomes dans un trimère d’hélium. On place par convention les deux atomes les plus éloignés dans les coins inférieurs gauche et droit. La couleur encode la densité de probabilité pour trouver le troisième atome. Gauche : prévision théorique pour le trimère fondamental. Droite : prévision théorique pour le trimère excité. Figure adaptée de Kunitski, Zeller et al. (2015).

4-3 Le trimère He_3 excité

Dans la recherche du trimère He_3 excité, une première série d’expériences a été menée dans le groupe de Göttingen. Une stratégie explorée est représentée en figure V.17. Elle consiste à mener l’expérience de diffraction en inclinant le réseau pour tirer parti d’un effet "passoire". Si l’objet à diffracter est trop gros, il devient peu probable qu’il soit transmis par le réseau de diffraction et on doit observer une chute du signal.

Brühl, Kalinin et al. (2005) ont conclu de leur expérience que la taille du trimère qu’ils observaient était toujours compatible avec la taille du trimère fondamental, notablement inférieure à la taille du dimère. Ils ont ainsi pu mettre une borne supérieure de l’ordre de 6 % sur la proportion de trimères excités, alors qu’ils s’attendaient à une proportion d’au moins 10 %. Leur conclusion était alors la suivante : *"We feel that the difference between the expectation of 10% and the experimental upper limit of 6% is sufficient to entertain the possibility that the $^4\text{He}_3$ Efimov state does, in fact, not exist despite the over 40 theory publications which have appeared since 1977."*

La recherche du trimère excité a été reprise de manière différente par Kunitski, Zeller et al. (2015). Après avoir sélectionné les trimères par une expérience de diffraction d’ondes de matière comme Schöllkopf & Toennies

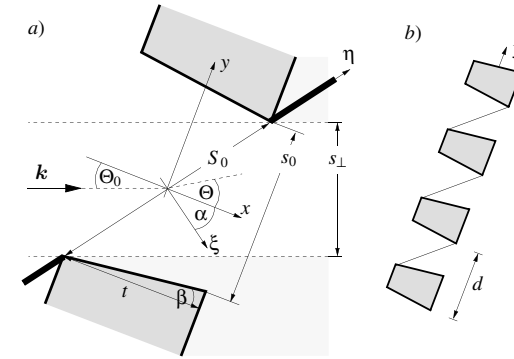


FIGURE V.17. Expérience de diffraction menée avec un réseau incliné, pour filtrer en taille les objets diffractés. Figure extraite de Brühl, Kalinin et al. (2005).

(1994), ils ont ionisé les trois atomes par une impulsion laser très brève (30 fs) et caractérisé l’explosion coulombienne qui suit cette ionisation. Une fois les trois ions observés de manière résolue en position, la résolution des équations du mouvement classiques permet de remonter à la distribution spatiale initiale des atomes (figure V.18).

Kunitski, Zeller et al. (2015) ont observé une distribution bimodale, correspondant à la somme de deux distributions radicalement différentes. Le poids des deux composantes varie fortement avec la pression du jet supersonique (figure V.19). À relativement haute pression, c’est uniquement le trimère fondamental qui est formé. Comme il correspond à des atomes proches, une grande énergie (~ 5 eV) est libérée quand les atomes sont soudainement ionisés. En revanche, à basse pression, on trouve une contribution significative du trimère excité, qui donne lieu à une énergie coulombienne beaucoup plus faible (~ 0.57 eV). Cette variation inattendue de la fraction de trimères excités avec la pression du jet explique le résultat négatif de l’expérience de Brühl, Kalinin et al. (2005). Quarante ans après la prédiction de son existence par Lim, Duffy et al. (1977), le trimère excité d’hélium était enfin observé !

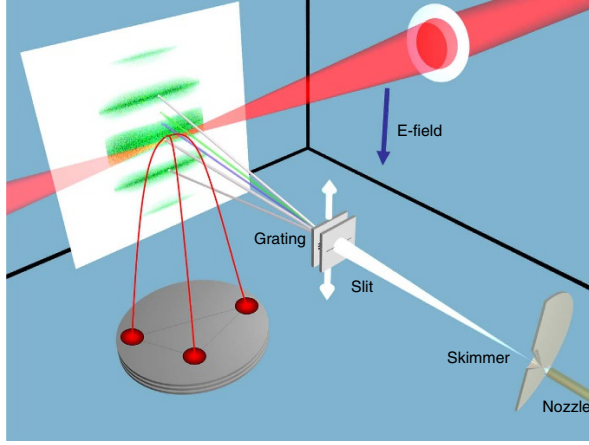


FIGURE V.18. Explosion coulombienne d'un trimère d'hélium. Figure extraite de Voigtsberger, Zeller et al. (2014).

5 Appendice : eq. de Skorniakov Ter-Martirosian

5-1 Définition des composantes de Faddeev

Considérons une fonction d'onde à trois corps $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ solution de l'équation de Schrödinger

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (66)$$

où $\hat{H}_0$ est l'opérateur énergie cinétique pour les trois particules et $\hat{V}$ la somme des trois potentiels binaires

$$\hat{V} = \hat{V}_{12} + \hat{V}_{23} + \hat{V}_{31}. \quad (67)$$

À ce stade, nous considérons des potentiels réguliers et nous pourrions prendre la limite d'un potentiel de portée nulle plus tard. La fonction Ψ solution de (66) vérifie

$$|\Psi\rangle = \hat{G}_0 \sum_{(ij)} \hat{V}_{ij} |\Psi\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{G}_0 = \frac{1}{E - \hat{H}_0}. \quad (68)$$

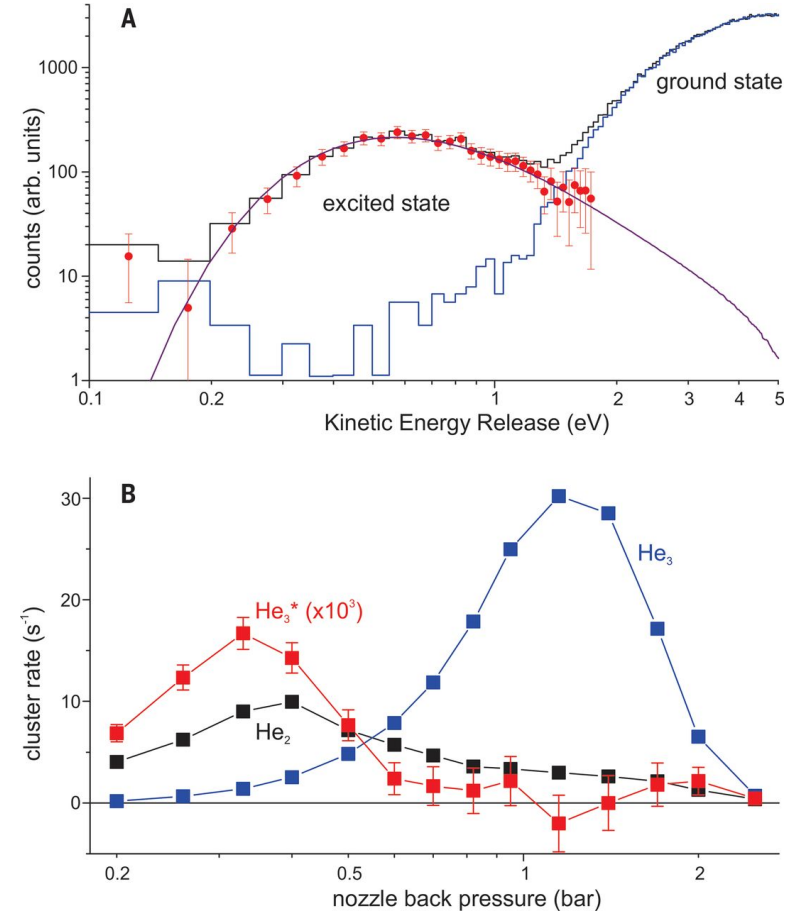


FIGURE V.19. Haut : distribution bimodale de l'énergie relâchée lors de l'explosion coulombienne des trimères d'Efimov. La courbe noire a été obtenue dans le régime de basse pression, $P = 0.33$ Bar, pour lequel les deux trimères sont présents. La courbe bleue a été obtenue dans le régime de haute pression, pour lequel seul le trimère fondamental est formé. Les points rouges représentent la différence entre les deux courbes noire et bleue. Bas : Contributions des trimères fondamentaux et excités en fonction de la pression du jet d'hélium. Figure extraite de Kunitski, Zeller et al. (2015).

On se restreint ici à des solutions d’énergie négative (états liés) de sorte qu’il n’y a pas de problème lié à d’éventuels pôles de $\hat{H}_0$.

Les composantes de Faddeev introduites en §1-3 sont définies comme

$$|\chi_1\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{23} |\Psi\rangle \quad |\chi_2\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{31} |\Psi\rangle \quad |\chi_3\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{12} |\Psi\rangle \quad (69)$$

D’après (68), on a donc

$$|\Psi\rangle = |\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle + |\chi_3\rangle \quad (70)$$

et les trois composantes de Faddeev vérifient

$$\hat{H}_0 |\chi_3\rangle + \hat{V}_{12} (|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle + |\chi_3\rangle) = E |\chi_3\rangle \quad (71)$$

et les deux équations déduites par permutation circulaire. (71) s’écrit aussi :

$$|\chi_3\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{12} |\chi_3\rangle + \hat{G}_0 \hat{V}_{12} (|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) \quad (72)$$

et nous utiliserons cette expression au paragraphe §5-3 pour traiter le cas d’un potentiel séparable.

5-2 Potentiel à un corps séparable

Un potentiel à un corps est dit séparable quand son action sur un état $|\psi\rangle$ est celle d’un projecteur, à un facteur multiplicatif près [cf. Cours 2021, chap. 5, §3] :

$$\hat{V} = V_0 |\phi_0\rangle \langle \phi_0|, \quad (73)$$

c’est-à-dire en point de vue position⁶ :

$$\hat{V} \psi(\mathbf{r}) = \alpha V_0 \phi_0(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \alpha = \int \phi_0^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r \quad (76)$$

6. Nous utilisons ici la convention :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \langle \mathbf{q} | \mathbf{q}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (74)$$

de sorte que les relations de fermeture en impulsion et en position s’écrivent :

$$\hat{1} = \int |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}| \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = \int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d^3r. \quad (75)$$

et en point de vue impulsion (ou plutôt vecteur d’onde pour éviter $\hbar$) :

$$\hat{V} \tilde{\psi}(\mathbf{q}) = \alpha V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}) \quad \text{avec} \quad \alpha = \int \tilde{\phi}_0^*(\mathbf{q}) \tilde{\psi}(\mathbf{q}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3}. \quad (77)$$

L’état $|\phi_0\rangle$ est choisi normé :

$$\int |\phi_0(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1 \quad \int |\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})|^2 \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = 1. \quad (78)$$

Notons qu’un potentiel séparable est généralement non local, puisque $\hat{V} \psi(\mathbf{r})$ dépend des valeurs de ψ en tout point de l’espace par l’intermédiaire du produit scalaire α . Une exception correspond au choix $|\phi_0\rangle = |\mathbf{r}_0\rangle$, qui correspond à une interaction de contact au point $\mathbf{r}_0$.

La recherche d’éventuels états liés ($E < 0$) d’un potentiel séparable est très simple en point de vue impulsion. Prenons $V_0 < 0$ et posons pour une particule de masse m_r

$$V_0 = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_r} \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_r}. \quad (79)$$

L’équation de Schrödinger ($\hat{H}_0 + \hat{V}$) $|\psi\rangle = E |\psi\rangle$ avec $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_r$ s’écrit :

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m_r} \tilde{\psi}(\mathbf{q}) + \alpha V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}) = E \tilde{\psi}(\mathbf{q}) \quad (80)$$

ce qui conduit à

$$\tilde{\psi}(\mathbf{q}) = \alpha \frac{k_0^2}{q^2 + \kappa^2} \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}) \quad (81)$$

Pour que cette solution soit acceptable, il faut vérifier son autocoherence, c’est-à-dire qu’elle fournit bien le bon produit scalaire α . Cela vient sélectionner l’unique énergie éventuellement solution de

$$\frac{1}{k_0^2} = \int \frac{|\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})|^2}{q^2 + \kappa^2} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \quad (82)$$

5-3 Problème à trois corps et potentiels séparables

Un potentiel binaire $\hat{V}_{12}$ est dit séparable si son action sur la variable relative est celle décrite ci-dessus, tout en laissant intact l’état de la variable du centre de masse. Nous supposons ici que le potentiel à trois corps $\hat{V}$ est une somme de potentiels binaires $\hat{V}_{ij}$ séparables. Il est alors possible de simplifier considérablement la recherche des énergies des états liés du problème à trois corps [voir par exemple Naidon, Endo & Ueda (2014), Naidon & Endo (2017) et Greene, Giannakeas et al. (2017)].

Considérons l’équation (72) que nous allons mettre sous une forme facilement utilisable. L’état $|\chi_3\rangle$ est défini comme une fonction des deux coordonnées de Jacobi $\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3$:

$$\langle \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3 | \chi_3 \rangle = \chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3). \quad (83)$$

Pour exploiter le caractère séparable de $\hat{V}_{12}$, nous allons écrire (72) dans l’espace des impulsions. Les moments conjugués d’un jeu donné de coordonnées de Jacobi, par exemple

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \quad \boldsymbol{\rho}_3 = \frac{2}{\sqrt{3}} \left[\mathbf{r}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \right], \quad (84)$$

s’écrivent

$$\mathbf{q}_{12} = \frac{1}{2} (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \quad \mathbf{Q}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\mathbf{k}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \right]. \quad (85)$$

Nous définissons la transformée de Fourier de $\chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$ par rapport aux deux variables $\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3$:

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3) = \int e^{-i(\mathbf{q}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12} + \mathbf{Q}_3 \cdot \boldsymbol{\rho}_3)} \chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) d^3 r_{12} d^3 \rho_3 \quad (86)$$

et nous utilisons l’expression de $\hat{H}_0$ en terme de ces variables :

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{m} (\nabla_{\mathbf{r}_{12}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}_3}^2). \quad (87)$$

Nous posons :

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} \quad V_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{m}, \quad (88)$$

et nous pouvons écrire (72) sous la forme :

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3) = \frac{-m/\hbar^2}{q_{12}^2 + Q_3^2 + \kappa^2} \left[{}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_3 \rangle + \sum_{j=1,2} {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_j \rangle \right] \quad (89)$$

Dans l’expression ci-dessus et dans la suite de ce paragraphe, nous avons explicité par un exposant $^{(k)}$ le système de coordonnées $i = 1, 2, 3$ utilisé pour chaque ket $|\mathbf{q}_{ij}, \mathbf{Q}_k\rangle$. Le premier terme du crochet se calcule directement

$$\begin{aligned} {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_3 \rangle &= V_0 {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | [(|\phi_0\rangle\langle\phi_0|)^{(12)} \otimes \hat{1}_3] | \chi_3 \rangle \\ &= V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \langle \phi_0, \mathbf{Q}_3 | \chi_3 \rangle \\ &= V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \int \tilde{\phi}_0^*(\mathbf{q}') \tilde{\chi}(\mathbf{q}', \mathbf{Q}_3) \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (90)$$

Les deux autres termes du crochet nécessitent un peu plus de travail. Commençons par remarquer que ces deux contributions sont égales du fait de la symétrie du problème. Intéressons-nous par exemple à la contribution de $i = 2$, pour laquelle nous introduisons une relation de fermeture pour les coordonnées de Jacobi associées à $i = 2$:

$${}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_2 \rangle = \int {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2 \rangle {}^{(2)}\tilde{\chi}(\mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2) \frac{d^3 q'_{31} d^3 Q'_2}{(2\pi)^6}. \quad (91)$$

Pour calculer l’élément de matrice intervenant dans cette expression, il nous faut passer des moments $(\mathbf{q}_{31}, \mathbf{Q}_2)$ aux moments $(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3)$. On vérifiera que :

$$\mathbf{q}_{12} = -\frac{1}{2}\mathbf{q}_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{Q}_2 \quad \mathbf{Q}_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{q}_{31} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}_2 \quad (92)$$

dont on déduit

$$|\mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2\rangle^{(2)} = | -\frac{1}{2}\mathbf{q}'_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{Q}'_2, -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{q}'_{31} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}'_2 \rangle^{(3)} \quad (93)$$

L’élément de matrice intervenant dans (91) s’écrit alors :

$$\begin{aligned} {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2 \rangle^{(2)} &= V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \tilde{\phi}_0^* \left(-\frac{1}{2} \mathbf{q}'_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{Q}'_2 \right) \\ &\times (2\pi)^3 \delta \left(\mathbf{Q}_3 + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{q}'_{31} + \frac{1}{2} \mathbf{Q}'_2 \right). \end{aligned} \quad (94)$$

L’intégrale sur $\mathbf{q}'_{31}$ figurant dans (91) disparaît du fait de la présence de la distribution de Dirac et on arrive à :

$$\begin{aligned} {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_2 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{3}} V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \times \\ &\int \tilde{\phi}_0^* \left[\frac{1}{\sqrt{3}} (\mathbf{Q}_3 + 2\mathbf{Q}'_2) \right] \tilde{\chi} \left[\frac{-1}{\sqrt{3}} (2\mathbf{Q}_3 + \mathbf{Q}'_2), \mathbf{Q}'_2 \right] \frac{d^3 Q'_2}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (95)$$

Nous allons maintenant rechercher la solution $\chi(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3)$ sous la forme directement inspirée de la solution (81) du problème à deux corps :

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3) = \frac{k_0^2}{q_{12}^2 + Q_3^2 + \kappa^2} \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \mathcal{F} \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \mathbf{Q}_3 \right) \quad (96)$$

où $\mathcal{F}$ est la fonction à déterminer. Pour simplifier les notations, nous ferons l’hypothèse que la fonction $\phi_0(\mathbf{r})$ est invariante par rotation, de sorte que $\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})$ est également invariante par rotation et ne dépend que de $q = |\mathbf{q}|$. En substituant la forme (96) dans la série d’équations (89,90,95) et en posant $\mathbf{Q} = 2\mathbf{Q}_3/\sqrt{3}$, $\mathbf{Q}' = 2\mathbf{Q}'_2/\sqrt{3}$, nous arrivons à l’équation de Skorniakov & Ter-Martirosian (1957) :

$$\boxed{\mathcal{A}(\mathbf{Q}, \kappa) \mathcal{F}(\mathbf{Q}) = 2 \int \mathcal{B}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \kappa) \mathcal{F}(\mathbf{Q}') \frac{d^3 Q'}{(2\pi)^3}} \quad (97)$$

avec

$$\mathcal{A}(\mathbf{Q}, \kappa) = \frac{1}{k_0^2} - \int \frac{|\tilde{\phi}_0(q)|^2}{q^2 + \frac{3}{4}Q^2 + \kappa^2} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \quad (98)$$

et

$$\mathcal{B}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \kappa) = \frac{\tilde{\phi}_0^* \left(|\mathbf{Q}' + \frac{1}{2}\mathbf{Q}| \right) \tilde{\phi}_0 \left(|\mathbf{Q} + \frac{1}{2}\mathbf{Q}'| \right)}{Q^2 + Q'^2 + \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}' + \kappa^2}. \quad (99)$$

On a donc ramené le problème à trois corps à la détermination de la fonction $\mathcal{F}(\mathbf{Q})$, solution de l’équation intégrale (97).

On peut retrouver le cas d’un potentiel de contact en prenant $|\phi_0\rangle = |\mathbf{r}_0 = 0\rangle$, ce qui revient à prendre $\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})$ indépendant de $\mathbf{q}$ dans ce qui précède. Notons qu’il faut alors introduire une coupure ultra-violette – équivalente au paramètre à trois corps – pour régulariser les intégrales intervenant dans (97), voir par exemple l’appendice de l’article de revue de Naidon & Endo (2017) ainsi que Pricoupenko (2012) et Petrov (2012).

Chapitre VI

L'effet Efimov exploré avec des gaz d'atomes froids

Ce dernier chapitre est consacré à la description des principales manifestations expérimentales de l'effet Efimov dans des gaz d'atomes ultra-froids. Cette exploration détaillée a été rendue possible grâce aux résonances de diffusion, appelées dans ce contexte *résonances de Fano–Feshbach*, qui permettent d'ajuster la longueur de diffusion a à une valeur considérablement plus grande (en valeur absolue) que la portée b des potentiels inter-atomiques.

Dans ces expériences, la caractérisation des trimères d'Efimov se fait essentiellement par un signal de pertes d'atomes ou de dimères. Le taux de pertes passe par un maximum ou un minimum en des points bien particuliers du diagramme énergétique $E(a)$ rappelé en figure VI.1. Nous allons détailler les processus en jeu en § 1 et montrer comment il a été possible d'observer les principales caractéristiques de la physique d'Efimov de part et d'autre de la résonance, ce qui revient à relier la physique pour $a < 0$ à celle pour $a > 0$ (§ 2).

Il est également possible d'utiliser des méthodes de spectroscopie (incohérente ou cohérente) basées sur un processus de photo-association pour étudier différentes facettes de l'effet Efimov. Nous ne les aborderons pas ici et nous renvoyons les lecteurs intéressés vers Lompe, Ottenstein et al. (2010), Nakajima, Horikoshi et al. (2011), Machtey, Shotan et al. (2012), Yudkin, Elbaz, Giannakeas et al. (2019) et Yudkin, Elbaz & Khaykovich (2020).

Les expériences menées entre 2006 et 2010 sur les gaz d'atomes froids

ont révélé une propriété inattendue. On attendait pour le paramètre à trois corps R_0 des valeurs *a priori* aléatoires, au moins dans le modèle d'interaction de portée nulle. En fait, pour les interactions de van der Waals en r^{-6} qui sont dominantes dans ce domaine de basse température, on trouve que le paramètre à trois corps est étroitement lié au rayon de van der Waals, $R_{\text{vdW}} = \frac{1}{2} (mC_6/\hbar^2)^{1/4}$. Nous discuterons l'origine de ce lien en nous appuyant sur le formalisme de l'approche hypersphérique (§ 3).

La dernière partie (§ 4) sera consacrée à la présentation de quelques effets allant au delà de celui initialement considéré par Efimov. Nous nous intéresserons notamment au cas des fermions, éventuellement accompagnés d'une particule supplémentaire pour les lier. Notre présentation sera loin d'être exhaustive; nous renvoyons donc les lecteurs spécifiquement intéressés par le problème quantique à petit nombre de corps vers le numéro spécial des Comptes Rendus de Physique de l'Académie des Sciences de janvier 2011 et vers les articles de revue récents de Naidon & Endo (2017), Greene, Giannakeas et al. (2017) et D'Incao (2018).

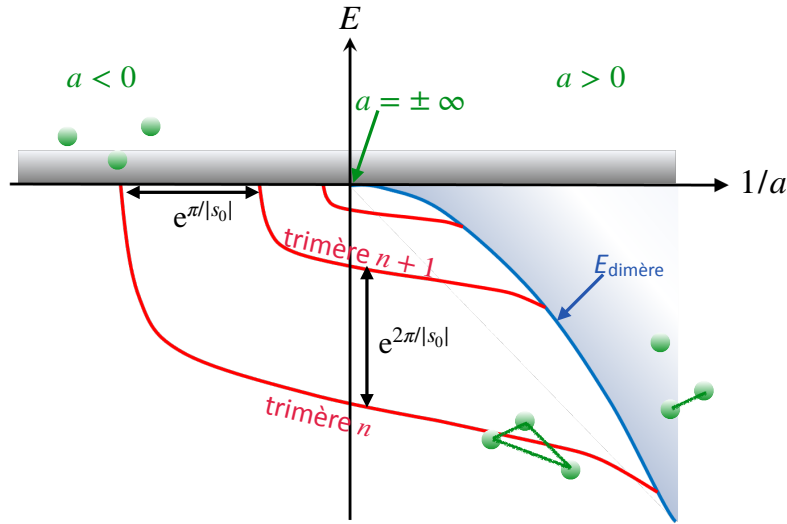


FIGURE VI.1. Représentation schématique des énergies E des trimères d'Efimov en fonction de $1/a$ (l'échelle n'est pas respectée). Le nombre imaginaire pur s_0 a pour module $|s_0| = 1.00624$ (cf. chapitre 5).

1 Le taux de recombinaison à trois corps

1-1 Loi d'échelle pour le coefficient L_3

La plupart des expériences menées à ce jour sur les gaz d'atomes froids utilisent un signal de perte d'atomes pour détecter les seuils d'apparition des trimères d'Efimov. Ces pertes se produisent notamment quand trois atomes (supposés ici être des bosons identiques) sont voisins l'un de l'autre, avec la possibilité de former une molécule. Pour un gaz atomique uniforme de densité moyenne ρ_A , la décroissance du nombre d'atomes N_A obéit alors à la loi

$$\frac{dN_A}{dt} = -\frac{g^{(3)}}{3!} L_3 \rho_A^2 N_A. \quad (1)$$

Dans cette équation, le facteur $g^{(3)}$ rend compte du groupement bosonique qui doit être pris en compte si le gaz est non-dégénéré (effet Hanbury Brown & Twiss) : il correspond à la somme des différentes contributions liées à la symétrie d'échange des trois bosons et il vaut alors $g^{(3)} = 3! = 6$. Pour un condensat pur, il n'y a pas de corrélations densité-densité et $g^{(3)} = 1$. On pourra consulter Kagan, Svistunov et al. (1985) et Söding, Guéry-Odelin et al. (1999) pour plus de détails.

Une simple analyse dimensionnelle, éventuellement complétée par un traitement plus quantitatif (Fedichev, Reynolds et al. 1996), montre que dans le cadre des interactions de portée nulle, le coefficient de perte L_3 s'écrit comme

$$L_3 = 3 C(a) \frac{\hbar a^4}{m} \quad (2)$$

Dans cette expression, le coefficient C est un nombre sans dimension dépendant du rapport a/R_0 , où R_0 est le paramètre à trois corps nécessaire pour régulariser le problème au voisinage de l'origine. En dehors de tout effet Efimovien, Fedichev, Reynolds et al. (1996) avaient prédit $C = 3.9$.

Quand on prend en compte les effets liés à la physique d'Efimov, les processus en jeu dans cette recombinaison à trois corps diffèrent selon que l'on s'intéresse à la partie $a < 0$ ou $a > 0$ et nous allons donc les détailler dans ce qui suit.

Notons que la mesure de L_3 dans un gaz d'atomes froids piégés est généralement affectée par la température. La limite $\sim \hbar a^4/m$ est notamment remplacée par $\sim \hbar \lambda^4/m$ quand la longueur d'onde thermique λ devient inférieure à a . Nous n'aborderons quasiment pas ces effets de température finie dans ce qui suit et nous renvoyons le lecteur intéressé par exemple vers Rem, Grier et al. (2013) et Eismann, Khaykovich et al. (2016), dans lesquels le chauffage qui accompagne ces processus de recombinaison est pris en compte dans la dynamique du gaz.

1-2 Partie $a < 0$ de la résonance

De ce côté de la résonance, les trimères se forment directement à partir d'une collision entre trois atomes libres (VI.2). Au seuil de formation, là où la longueur de diffusion s'approche d'un des $a_-^{(n)}$, ces trimères ont une

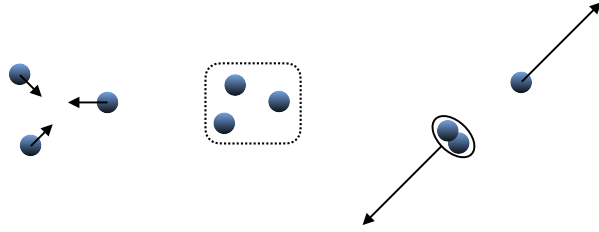


FIGURE VI.2. Recombinaison à trois corps assistée par la formation intermédiaire d'un état d'Efimov d'énergie quasi-nulle, du côté $a < 0$ de la résonance ($a \approx a_-^{(n)}$). L'état final contient un dimère fortement lié non décrit par l'approche du pseudo-potentiel.

énergie quasi-nulle, une grande extension et ils ont donc un recouvrement fort avec la fonction d'onde des atomes libres. Une fois ce trimère formé, il peut se désintégrer en relâchant un atome libre et un dimère fortement lié (non décrit par l'approche pseudo-potentiel, mais bien présent pour les potentiels interatomiques réels). On s'attend donc à une augmentation de L_3 autour de chaque valeur $a = a_-^{(n)}$.

Cet effet a été initialement prédit par Esry, Greene et al. (1999a) et on trouvera des références détaillées dans les articles de revue récents de Naidon & Endo (2017), Greene, Giannakeas et al. (2017) et D'Incao (2018). L'analyse de la recombinaison à trois corps et de la formation de dimères fortement liés conduit à l'expression suivante¹ pour le coefficient L_3 (Braaten & Hammer 2004) :

$$a < 0 : \quad C(a) \approx C' \frac{\sinh(2\eta)}{\sin^2 \left[|s_0| \ln(a/a_-^{(0)}) \right] + \sinh^2 \eta} \quad (3)$$

avec $C' \approx 4590$. Ce résultat dépend d'un paramètre ajustable, le nombre sans dimension η , appelé *paramètre d'inélasticité*.

La signification physique du paramètre η est relativement simple : pour tenir compte des pertes à trois corps et établir le résultat (3), on résout

1. La structure de cette expression est très voisine de celle donnant la transmission d'une cavité optique Fabry-Perot, connue sous le nom de fonction d'Airy. Cette similarité n'est bien sûr pas fortuite, les deux problèmes étant formellement similaires.

l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde hyperradiale $\phi(R)$ en modifiant la condition aux limites aux courtes distances. Jusqu'ici, nous avons posé pour $R \ll |a|, k^{-1}$:

$$\phi(R) \sim \frac{1}{\sqrt{R}} \sin[|s_0| \ln(R/R_0)] \sim \frac{1}{\sqrt{R}} \left[e^{i|s_0| \ln(R/R_0)} - e^{-i|s_0| \ln(R/R_0)} \right] \quad (4)$$

où les deux termes à l'intérieur du crochet peuvent s'interpréter comme les ondes sortantes et entrantes dans une collision à trois corps : dans cette collision, l'hyperrayon a initialement une valeur grande devant toutes les longueurs caractéristiques du problème. Il décroît vers des valeurs de l'ordre de la portée des potentiels, ce qui correspond à la situation physique où les trois particules sont relativement proches l'une de l'autre. Il repart ensuite vers l'infini, ce qui signifie qu'au moins une des trois particules est loin des deux autres. La description d'une collision inélastique se fait en imposant au flux de sortie de la collision d'être strictement inférieur au flux entrant, ce qui revient à poser la condition aux limites :

$$\phi(R) \sim \frac{1}{\sqrt{R}} \left[e^{-2\eta} e^{i|s_0| \ln(R/R_0)} - e^{-i|s_0| \ln(R/R_0)} \right]. \quad (5)$$

La détermination de (3) à partir de cette nouvelle condition aux limites est décrite par Braaten & Hammer (2004) et Braaten & Hammer (2006).

Le paramètre η varie selon les espèces atomiques et la force des transitions conduisant vers les dimères fortement liés. On vérifiera sur la figure VI.3 que ce coefficient L_3 (normalisé par la valeur "nue" $3\hbar a^4/m$) passe par un maximum pour toutes les valeurs de a égales à un des $a_-^{(n)}$ (l'argument du sinus est alors un multiple de π).

On définit la *longueur de recombinaison* (Esry, Greene et al. 1999a) :

$$\rho_3 = (\mu L_3 / \hbar)^{1/4} \quad (6)$$

où $\mu = m/\sqrt{3}$ est la masse réduite à trois corps. On s'attend à ce que les résonances décrites ci-dessus ne soient bien visibles que si cette longueur est plus faible que la longueur d'onde thermique des particules, ce qui impose de travailler avec des gaz suffisamment froids (voir par exemple la figure VI.9). Cette condition est plus difficile à remplir pour les trimères excités que pour le trimère fondamental $n = 0$, puisque L_3 augmente avec n (l'expression de L_3 fait intervenir a^4).

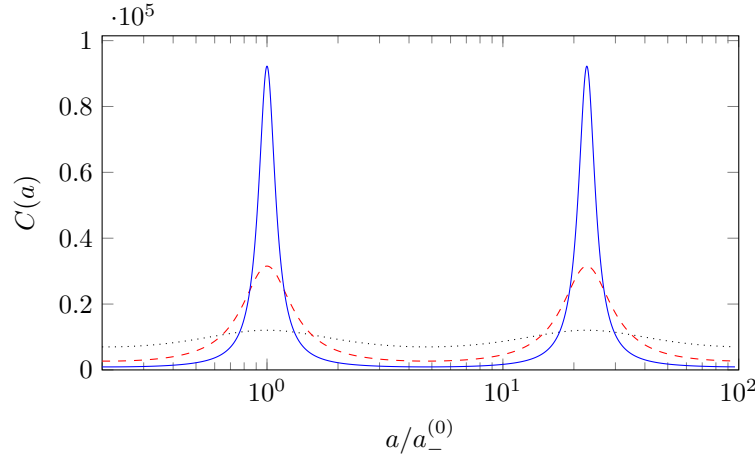


FIGURE VI.3. Coefficient normalisé de pertes par recombinaison à trois corps, $C(a) \equiv L_3/(3\hbar a^4/m)$, du côté $a < 0$ de la résonance avec $\eta = 0.1$ (trait continu bleu), $\eta = 0.3$ (trait tireté rouge) et $\eta = 1$ (trait pointillé noir).

1-3 Partie $a > 0$ de la résonance

Dans ce cas, l’existence du dimère faiblement lié d’énergie $-\hbar^2/ma^2$ ouvre une nouvelle voie de recombinaison à trois corps (figure VI.4) : trois atomes libres entrant en collision peuvent donner naissance à un de ces dimères, le troisième atome repartant de manière isolée. Un tel processus peut être analysé entièrement dans le cadre de notre approche en terme de pseudo-potentiel, puisqu’il ne fait pas intervenir d’états fortement liés. Le résultat du calcul du coefficient L_3 ne fait donc pas intervenir de paramètre ajustable (contrairement au cas $a < 0$ où η intervient) et on trouve (Esry, Greene et al. 1999b; Bedaque, Braaten et al. 2000; Petrov 2004; Braaten & Hammer 2007a; D’Incao 2018) :

$$a > 0 \text{ (dimères faiblement liés)} : \quad C(a) \approx C'' \sin^2 \left[|s_0| \ln \left(\frac{a}{a_+^{(1)}} \right) \right] \quad (7)$$

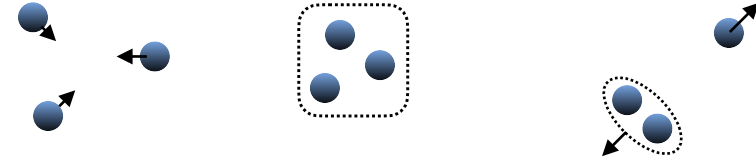


FIGURE VI.4. Recombinaison à trois corps assistée par la formation intermédiaire d’un état d’Efimov d’énergie quasi-nulle, du côté $a > 0$ de la résonance. L’état final fait intervenir le dimère faiblement lié d’énergie $-\hbar^2/ma^2$. Le taux de recombinaison normalisé $C(a)$ présente des minima ($a_+^{(n)}$) et des maxima ($a_p^{(n)}$) correspondant à un processus d’interférence entre les différents canaux conduisant à cet état final. Contrairement au cas $a < 0$, le calcul de ce taux peut être fait entièrement dans le cadre du modèle du pseudo-potentiel et il ne nécessite pas l’introduction d’un paramètre supplémentaire (en dehors de R_0).

avec²

$$a_+^{(0)} \approx 0.20 a_*^{(1)} \quad C'' \approx 67.1. \quad (8)$$

L’annulation de ce taux pour les valeurs $a_+^{(n)} = a_+^{(0)} e^{n\pi/|s_0|}$ s’interprète comme un effet d’interférence destructive entre les différents chemins conduisant à la production du dimère lors d’une collision de trois atomes. Dans un tel processus, l’hyperrayon est initialement très grand, il décroît, puis repart à l’infini. Plusieurs canaux correspondant aux potentiels hypersphériques peuvent avoir simultanément une contribution significative et le terme en $\sin^2[\dots]$ de (7) peut être compris comme une oscillation de Stückelberg, résultant du couplage entre ces différents canaux. L’article de revue de D’Incao (2018) fournit une description détaillée de ces différents chemins.

Notons qu’on trouve également dans la littérature la notation $a_p^{(n)}$ pour le maximum de la fonction $\sin^2[\dots]$ intervenant dans (7). Chaque maximum $a_p^{(n)}$ est à mi-chemin (en coordonnées logarithmiques) entre deux

2. Nous repérons ici $a_+^{(0)}$ par rapport à $a_*^{(1)}$ au lieu de $a_*^{(0)}$. En effet, quand on va au delà de la limite de portée nulle et qu’on considère un potentiel réel de type van der Waals, la branche du trimère $n = 0$ ne croise pas la branche du dimère, ce qui entraîne que le point $a_*^{(0)}$ est repoussé à l’infini (voir la discussion à la fin de § 2-1).

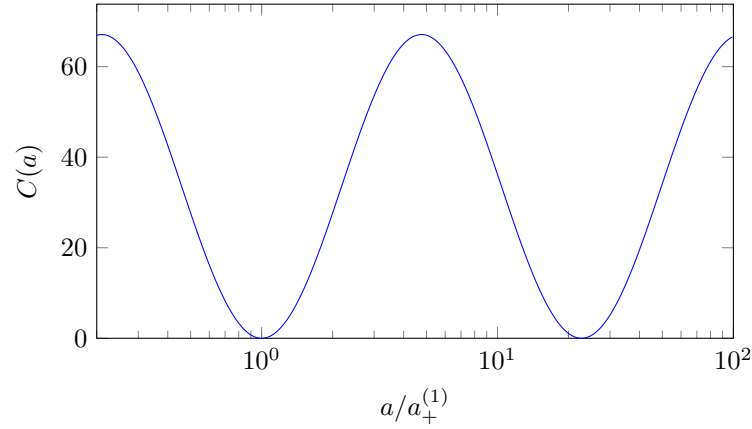


FIGURE VI.5. Coefficient normalisé de pertes par recombinaison à trois corps, $C(a) \equiv L_3/(3\hbar a^4/m)$, du côté $a > 0$ de la résonance. La valeur de $a_+^{(n)}$ est $\approx 4.5 a_*^{(n)} \approx 0.20 a_*^{(n+1)}$, où $a_*^{(n)}$ désigne le point de rencontre entre dimère et la n -ème branche du trimère. Dans le modèle qui conduit à cette prédiction, la recombinaison se fait uniquement vers le dimère faiblement lié qui existe de ce côté-ci de la résonance.

minima successifs $a_+^{(n)}$ et $a_+^{(n+1)}$, et on a donc :

$$a_p^{(n)} = a_+^{(n)} \sqrt{22.7} \approx a_*^{(n+1)}. \quad (9)$$

La variation de $C(a)$ pour $a > 0$ est tracée en figure VI.5.

1-4 Lien entre les deux côtés de la résonance

Dans le régime universel, on peut relier les points remarquables côté $a < 0$, c'est-à-dire les valeurs seuils $a_-^{(n)}$ pour l'existence d'un trimère, et les points remarquables côté $a > 0$, c'est-à-dire le croisement 'dimère-trimère' $a_*^{(n)}$, ou encore le minimum du taux de recombinaison à trois corps $a_+^{(n)}$. Le résultat de Braaten & Hammer (2006) [leurs équations (200) et (201)]

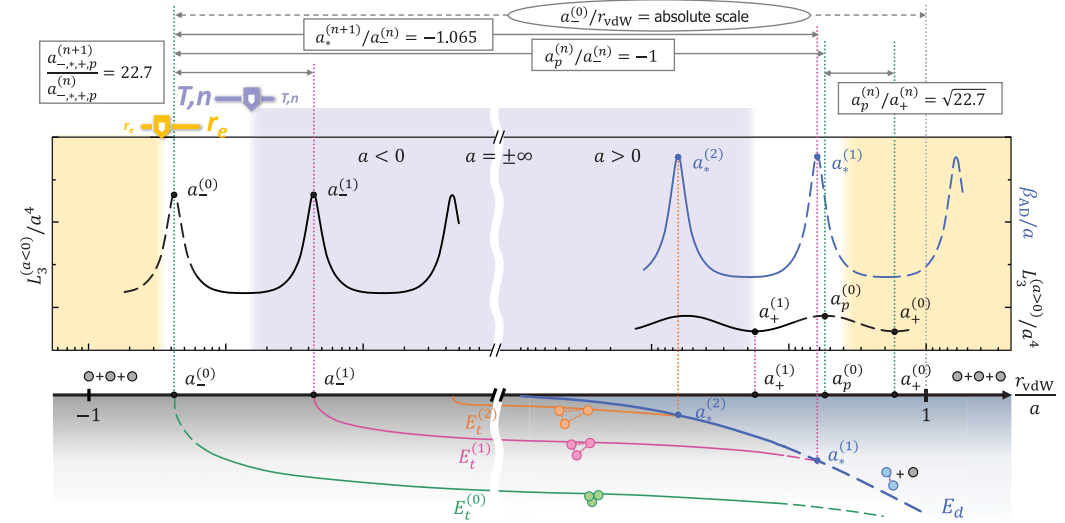


FIGURE VI.6. Liens entre les côtés $a < 0$ et $a > 0$ pour les principales caractéristiques de la physique d'Efimov. Figure extraite de Xie, Van de Graaff et al. (2020).

affiné par Gogolin, Mora et al. (2008) [leur équation (19)] donne :

$$\frac{a_-^{(n)}}{a_*^{(n)}} \approx -21.31 \quad (10)$$

ce qui signifie que $a_-^{(n)}$ est en fait proche (en valeur absolue) de $a_*^{(n+1)}$:

$$\frac{a_-^{(n)}}{a_*^{(n+1)}} \approx -0.939 = -\frac{1}{1.065}. \quad (11)$$

On déduit de cette relation le lien entre a_- et a_+ , qui sont les quantités les plus facilement accessibles à partir de la mesure du taux de recombinaison à trois corps entre atomes du gaz :

$$\frac{a_-^{(n)}}{a_+^{(n)}} = -4.7 \quad (12)$$

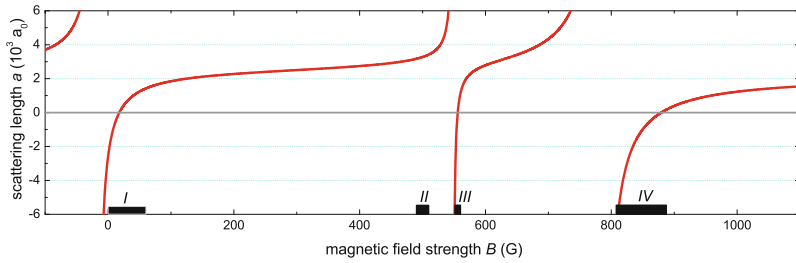


FIGURE VI.7. Prédiction théorique pour la longueur de diffusion $a(B)$ d'un gaz de césium dans l'état $|f = 3, m_f = 3\rangle$, quand on ne prend en compte que les couplages aux dimères de moment cinétique nul. Figure extraite de Ferlaino, Zenesini et al. (2011).

Ces principales relations sont récapitulées sur la figure VI.6, extraite de Xie, Van de Graaff et al. (2020).

2 Observation des principales caractéristiques

2-1 Première observation sur le césium

Dans le domaine des gaz d'atomes froids, la première mise en évidence claire d'un effet Efimov a été faite par Kraemer, Mark et al. (2006). L'expérience a été menée sur un gaz de césium préparé dans son état hyperfin³ le plus bas $|f = 3, m_f = 3\rangle$ autour d'une résonance de Feshbach. L'atome de césium se prête bien à ce type d'expériences pour deux raisons :

- La longueur de diffusion "de fond" a_{bg} , c'est-à-dire bien en dehors d'une résonance [cf. cours 2021], est grande devant la portée R_{vdW} : $a \approx 2200 a_0 \approx 20 R_{vdW}$, ce qui assure qu'on aura généralement affaire à des résonances larges, pour lesquelles l'universalité liée à la description en terme de pseudo-potentiel sera assurée. Quand on prend seulement en compte les interactions avec les états moléculaires de moment

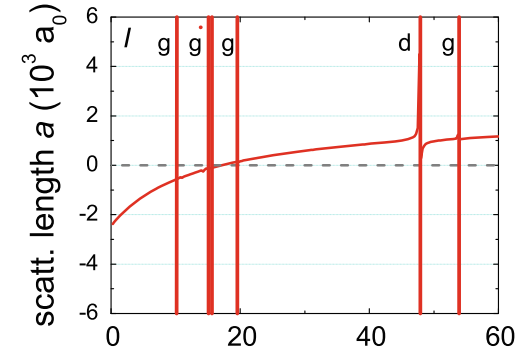


FIGURE VI.8. Prédiction théorique pour la longueur de diffusion $a(B)$ d'un gaz de césium dans l'état $|f = 3, m_f = 3\rangle$, quand on ajoute les couplages aux dimères de moment cinétique non nul. L'axe des abscisses indique le champ magnétique exprimé en Gauss. Figure extraite de Ferlaino, Zenesini et al. (2011).

cinétique nul, on arrive ainsi au diagramme $a(B)$ de la figure VI.7.

- Le césium étant un élément lourd, les effets relativistes jouent un rôle important dans la dynamique du couplage électronique. Cela ajoute des couplages significatifs avec des états moléculaires de moment cinétique non nul, et vient donc enrichir le diagramme $a(B)$. Un zoom sur la région de faible champ magnétique (marquée par le symbole I en figure VI.7) est représenté en figure VI.8.

Kraemer, Mark et al. (2006) ont étudié la variation du taux de recombinaison à trois corps en se plaçant autour de $B = 7.5 \text{ G}$, où a prend des valeurs grandes en valeur absolue et négatives. Leur résultat principal est montré en figure VI.9. Pour les points à basse température (10 nK), on constate une augmentation forte du taux de recombinaison à trois corps au voisinage de $a_-^{(0)} = -872(22) a_0$, correspondant au seuil d'apparition du trimère d'Efimov fondamental. La ligne continue rouge de la figure VI.9 correspond à un ajustement par la prédiction théorique (3) pour $\eta = 0.10(3)$.

Il est intéressant de comparer les propriétés du trimère observé par Kraemer, Mark et al. (2006) et celles du trimère fondamental He_3 observé

3. Rappelons que le noyau de ^{133}Cs a un spin $i = 7/2$ de sorte que le couplage hyperfin avec le spin $1/2$ de l'électron de valence donne naissance à deux états, $f = 3$ et $f = 4$.

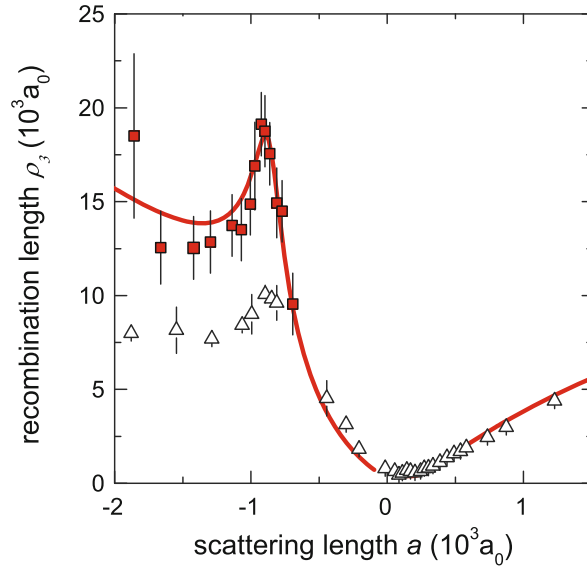


FIGURE VI.9. Longueur de recombinaison à trois corps [définie en (6)] mesurée par Kraemer, Mark et al. (2006). Les carrés rouges (resp. triangles noirs) correspondent à une température de 10 nK (resp. 200 nK). Figure adaptée de Ferlaino, Zenesini et al. (2011).

par Schöllkopf & Toennies (1994) (voir chapitre précédent). Comme montré par Lee, Koehler et al. (2007), ces deux trimères ont en commun le fait que leur branche énergétique, prolongée du côté des valeurs de a petites et positives, ne croise jamais la branche du dimère [voir également Bruch & Sawada (1973) et Yudkin, Elbaz & Khaykovich (2020)]. De ce point de vue, ni le trimère He_3 , ni le trimère Cs_3 de Kraemer, Mark et al. (2006) ne satisfont l'ensemble des critères que l'on peut imposer à un édifice efimovien. En revanche, l'état observé par Kraemer, Mark et al. (2006) est indubitablement un état borroméen puisqu'il existe dans une zone $a < 0$ pour laquelle il n'existe pas de dimère dans un état faiblement lié (il y a bien sûr des dimères Cs_2 fortement liés, mais c'est une autre physique). Par comparaison, rappelons que He_3 a été observé pour $a > 0$, donc dans une zone où le dimère He_2 faiblement lié existe : ce n'était donc pas un état borroméen.

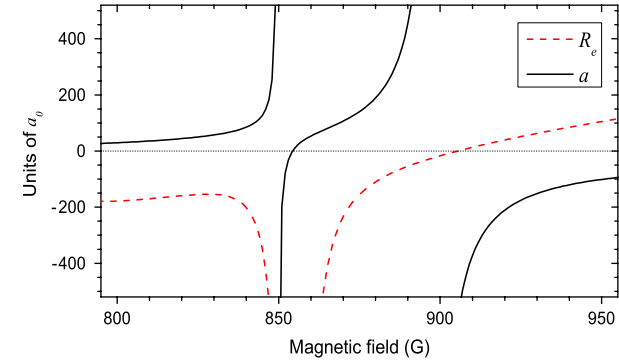


FIGURE VI.10. Longueur de diffusion et portée effective pour la résonance de Feshbach de ^7Li . Figure extraite de Gross, Shotan et al. (2009).

Signalons également que l'expérience de Kraemer, Mark et al. (2006) a exploré de manière continue une zone de champ magnétique conduisant à des longueurs de diffusion de part et d'autre de $a = 0$. En plus du pic remarquable montré en figure VI.9 obtenu pour $a < 0$, les auteurs ont également observé des pics du côté $a > 0$. Toutefois, il est important de signaler qu'on ne s'attend pas dans ce cas à une relation universelle entre les deux domaines. Ces relations universelles sont obtenues entre les zones $a < 0$ et $a > 0$ encadrant une résonance $a = \pm\infty$, pas un point d'annulation de a .

2-2 Connexion des régions $a < 0$ et $a > 0$

En 2009, plusieurs groupes expérimentaux ont annoncé avoir réussi à connecter les deux domaines $a > 0$ et $a < 0$ situés autour d'une résonance $a = \infty$: Knoop, Ferlaino et al. (2009), Gross, Shotan et al. (2009), Zaccanti, Deissler et al. (2009) et Pollack, Dries et al. (2009). Pour les deux derniers cités, on pourra également consulter leur réanalyse partielle des données dans Roy, Landini et al. (2013) et Dyke, Pollack et al. (2013).

Nous allons nous intéresser à l'expérience de Gross, Shotan et al. (2009). Elle a été menée sur un gaz d'atomes de ^7Li (bosons) préparés dans l'état se connectant à $|f = 1, m = 0\rangle$ en champ nul (le niveau fondamental de

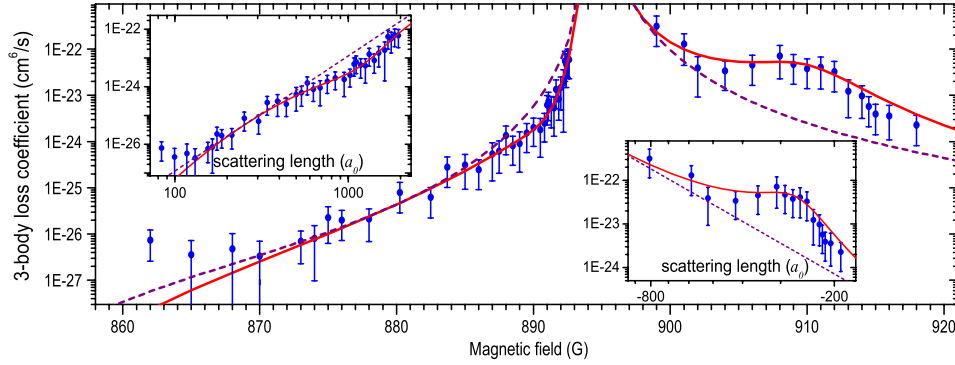


FIGURE VI.11. Taux de pertes à trois corps à travers une résonance de Feshbach pour un gaz de ^7Li . Figure extraite de Gross, Shotan et al. (2009).

l'atome de ^7Li est clivé en deux sous-niveaux hyperfins $f = 1$ et $f = 2$). Deux résonances de Feshbach à 846 G et 894 G entrent en jeu (figure VI.10), avec pour résultat une zone dans laquelle a diverge, tout en gardant une valeur relativement faible pour la portée effective r_e (résonance large). Cette configuration est donc bien adaptée à la recherche de l'universalité efimovienne.

Nous présentons sur la figure VI.11 le résultat obtenu par Gross, Shotan et al. (2009) pour la mesure du coefficient L_3 de part et d'autre de la résonance.

- Côté $a < 0$ (correspondant aux grandes valeurs de B), L_3 passe par un maximum en $a_-^{(0)} = -264(11) a_0$ et un ajustement des mesures par (3) donne $\eta_- = 0.236(42)$. Ce résultat donne $|a_-^{(0)}| \sim 8.5 r_e$, de sorte que le régime universel est bien atteint. La température du gaz ($1 \mu\text{K}$) ne permet pas d'observer la résonance suivante, attendue pour une valeur 22.7 fois plus grande de $|a|$.
- Côté $a > 0$ (correspondant aux petites valeurs de B), on observe le début du comportement oscillant attendu pour L_3 [cf. (7)]. On trouve en particulier un minimum prononcé de L_3 autour de $a_+^{(1)} = 1160 a_0$, correspondant à l'interférence destructive mentionnée en § 1-3.

Nous avons annoncé en § 1-4 le lien entre les deux côtés de la résonance

avec pour une même branche de trimère

$$\frac{a_-^{(n)}}{a_+^{(n)}} = -4.7 \quad \text{ou encore} \quad \frac{a_-^{(n)}}{a_+^{(n+1)}} = -\frac{4.7}{22.7} = -0.21. \quad (13)$$

Les valeurs trouvées expérimentalement $a_-^{(0)} = -264 a_0$ et $a_+^{(1)} = 1160 a_0$ conduisent au rapport -0.23 , proche de celui attendu si l'on suppose que les deux mesures portent sur deux trimères consécutifs. Comme l'écrivent Gross, Shotan et al. 2009 dans leur conclusion, "This seems like an observation of the long hunted universal behavior of a three-body observable in a physical system with resonantly enhanced two-body interactions"!

Indiquons également le résultat obtenu par Zaccanti, Deissler et al. (2009) et Pollack, Dries et al. (2009) après la réanalyse mentionnée plus haut et explicitée par Naidon & Endo (2017) :

- L'expérience de Zaccanti, Deissler et al. (2009), menée sur ^{39}K , a conduit à $a_-/a_+ = -3.1(0.3)$ [valeur avant réanalyse $-6.7(0.6)$].
- L'expérience de Pollack, Dries et al. (2009), menée sur ^7Li , a conduit à $a_-/a_+ = -2.8(0.3)$ [valeur avant réanalyse $-2.5(0.6)$].

Ces résultats sont notablement plus loin de la limite universelle, probablement en raison des effets liés à la portée effective r_e , qui était relativement grande dans ces expériences. On pourra consulter la discussion approfondie de Xie, Van de Graaff et al. (2020) pour plus de détails.

2-3 La suite géométrique d'Efimov

L'observation de deux résonances successives du même côté de la résonance permet de tester directement le facteur d'échelle 22.7 de la théorie d'Efimov. Zaccanti, Deissler et al. (2009) et Pollack, Dries et al. (2009) ont mené des premières mesures pour tester cette loi sur les atomes de ^{39}K et ^7Li [voir également Williams, Hazlett et al. 2009 pour l'observation d'un trimère excité].

Nous décrivons ici une expérience plus récente menée à Innsbruck par Huang, Sidorenkov et al. (2014) sur ^{133}Cs . Dans cette expérience, un soin particulier a été apporté à l'évaluation des effets de température finie et à l'extrapolation des quantités mesurées à température nulle. L'expérience

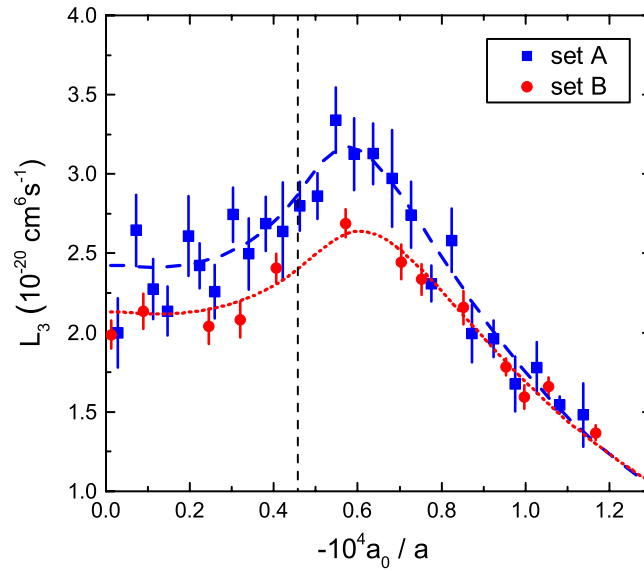


FIGURE VI.12. Observation du deuxième trimère d'Efimov pour le césium autour de 800 G. L'ajustement par un modèle théorique prenant en compte la température non nulle du gaz conduit à $a_-^{(1)} = -20\,190\,(1200)\,a_0$, soit $a_-^{(1)}/a_-^{(0)} = 21.0\,(1.3)$. Ensemble A : $T = 8.7\,\text{nK}$, ensemble B : $T = 10.0\,\text{nK}$. Figure extraite de Huang, Sidorenkov et al. (2014).

a été menée sur une résonance de Feshbach à beaucoup plus haut champ que celle utilisée par Kraemer, Mark et al. (2006), aux alentours de 800 G. Cette résonance large, couplée à un bon contrôle de la température du gaz dans le domaine de quelques nanokelvins, permet d'atteindre de grandes longueurs de diffusion, jusqu'à $10^5\,a_0$.

Dans l'expérience de Huang, Sidorenkov et al. (2014), le gaz est préparé au voisinage de la dégénérescence quantique dans un piège hybride (magnétique + optique), à une température entre 7 et 10 nK. La taille de l'état fondamental du piège est de $\sim 5\,\mu\text{m}$, à comparer à la taille attendue pour le deuxième trimère recherché $\sim 1\,\mu\text{m}$: il y a assez de place pour ce trimère, mais le suivant (de taille 22.7 fois plus grande) ne logerait pas dans ce piège...

La figure VI.12 montre le résultat principal de Huang, Sidorenkov et al. (2014) avec un pic marqué du coefficient de perte à trois corps autour de $a = -17\,000\,a_0$. Le trimère fondamental avait été observé auparavant par le même groupe (Berninger, Zenesini et al. 2011) et il se forme pour $a_-^{(0)} = -963\,(11)\,a_0$, soit un rapport 17.7 là où l'universalité d'Efimov prédit 22.7.

Cette déviation par rapport à la prédiction "universelle" d'Efimov peut être due (au moins en partie) à des effets liés à la température non nulle du gaz. Pour la position $a_-^{(0)}$ du trimère fondamental, les effets liés à la température sont peu importants. Pour prédire la valeur seuil $a_-^{(1)}$ pour le trimère suivant, Huang, Sidorenkov et al. (2014) ont utilisé le modèle développé par Rem, Grier et al. (2013). Ils ont analysé leurs données expérimentales en gardant la position $a_-^{(1)}$ et la température comme paramètres ajustables. L'ajustement a donné une température très proche de celle mesurée directement et fournit la valeur $a_-^{(1)} = -20\,190\,(1200)\,a_0$, soit un facteur 21.0 (1.3) au dessus de $a_-^{(0)}$. C'est remarquablement proche de la valeur universelle d'Efimov ($1.3\,\sigma$ d'écart). Par ailleurs, on s'attend de toute façon à une déviation non négligeable par rapport à la loi d'échelle pour les tout premiers trimères $n = 0$ et $n = 1$, en particulier du fait des effets de portée non nulle (Schmidt, Rath et al. 2012).

Pour terminer ce paragraphe, rappelons que cette suite géométrique efimovienne a également été mise en évidence dans des mélanges mMM : l'expérience est alors moins contraignante car la raison de la suite géométrique est considérablement réduite quand on va vers des rapports $m/M \ll 1$ (voir chapitre 4).

2-4 Le croisement dimère - trimère

Une caractéristique importante du diagramme énergétique du côté $a > 0$ de la résonance se situe en $a_*^{(n)}$ quand l'énergie du trimère devient égale à l'énergie du dimère (le troisième atome étant quasiment au repos, infiniment loin du dimère). Si on part d'un mélange atomes-dimères, on s'attend à ce que le taux de pertes β_{AD} pour ce mélange soit maximal en un tel point : lors d'une collision atom-dimère, les partenaires vont passer beaucoup de temps au voisinage les uns des autres, ce qui favorise la transition

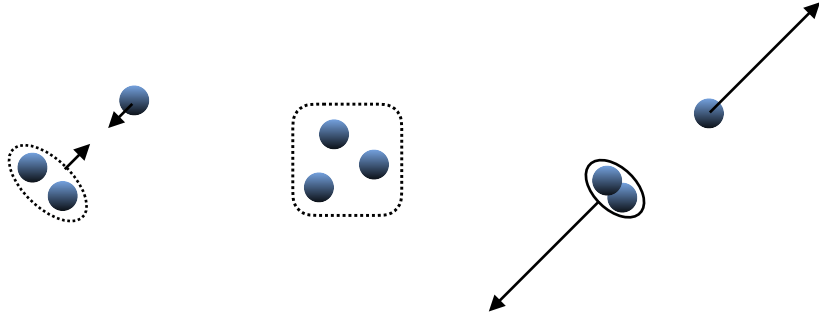


FIGURE VI.13. Collision inélastique atome-dimère assistée par la formation intermédiaire d'un état d'Efimov du côté $a > 0$ de la résonance. L'état initial fait intervenir le dimère faiblement lié d'énergie $-\hbar^2/ma^2$ et l'état final contient un dimère fortement lié, non décrit dans le modèle du pseudo-potentiel. Le taux de ce processus est maximal pour $a = a_*^{(n)}$, quand l'énergie du dimère faiblement lié coïncide avec celle du trimère d'Efimov.

vers d'autres états plus profondément liés (figure VI.13). L'argument est le même que celui qui conduit à une augmentation du taux de pertes à trois corps du côté $a < 0$ de la résonance aux points $a_-^{(n)}$.

La première mise en évidence des pertes dans un mélange atomes-dimères dues à cet effet a été publiée par Knoop, Ferlaino et al. (2009). Nous allons nous intéresser ici aux expériences plus récentes du groupe de Boulder, décrites par Chapurin, Xie et al. (2019) et Xie, Van de Graaff et al. (2020), qui ont permis de vérifier l'universalité d'Efimov entre la valeur a_* et les autres points remarquables du diagramme énergétique.

Xie, Van de Graaff et al. (2020) ont travaillé avec un gaz de ^{39}K préparé dans l'état hyperfin $|f = 1, m_f = -1\rangle$ autour de $B = 33.6$ Gauss. Nous avons décrit dans le cours 2021 les propriétés de la résonance de Fano-Feshbach correspondante. Cette résonance a le mérite d'avoir une portée effective assez petite ($r_e \approx 130 a_0$ à résonance), ce qui permet d'augmenter la plage d'universalité des effets efimoviens. Chapurin, Xie et al. (2019) avaient étudié le côté $a < 0$ de cette résonance et trouvé $a_-^{(0)} = -908(11) a_0$ et $\eta = 0.25(1)$ (figure VI.14).

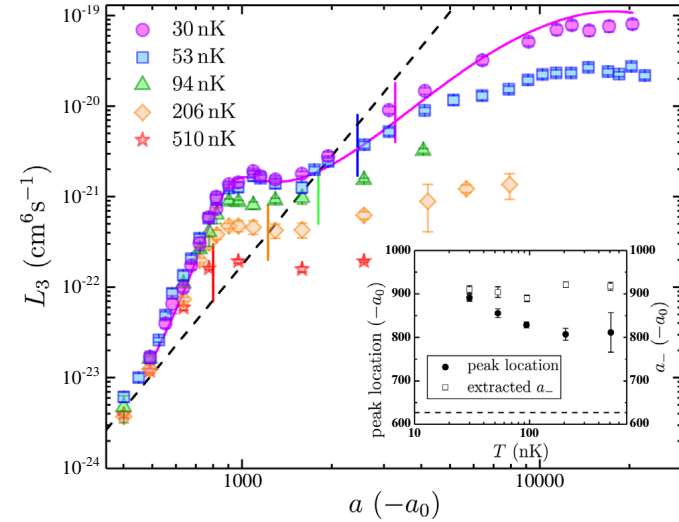


FIGURE VI.14. Taux de relaxation à trois corps dans un gaz de ^{39}K côté $a < 0$ pour la résonance de Fano-Feshbach située autour de $B = 33.6$ Gauss. On trouve $a_- = -908(11) a_0$. Figure extraite de Chapurin, Xie et al. (2019).

Les dimères sont formés par "magnéto-association", obtenue en traversant rapidement la résonance de Fano-Feshbach vers le côté $a > 0$. Le nombre de dimères peut ensuite décroître par simple basculement de spin d'un des atomes qui le composent, ce qui désintègre le dimère. Il peut également diminuer sous l'effet des collisions avec les atomes, ce qui constitue le processus intéressant, et qui conduit à l'évolution du nombre de dimères N_D en présence d'une densité d'atomes ρ_A selon la loi :

$$\frac{dN_D}{dt} = -\beta_{AD} \rho_A N_D. \quad (14)$$

Le taux β_{AD} qui décrit ce processus est tracé en figure VI.15, avec un ajustement selon la loi proposée par Braaten & Hammer (2007b) [voir aussi Braaten & Hammer (2009) et Helfrich & Hammer (2009)] :

$$\beta_{AD} = C \frac{\sinh(2\eta)}{\sin^2[s_0 \ln(a/a_*)] + \sinh^2(\eta)} \frac{\hbar a}{m} \quad (15)$$

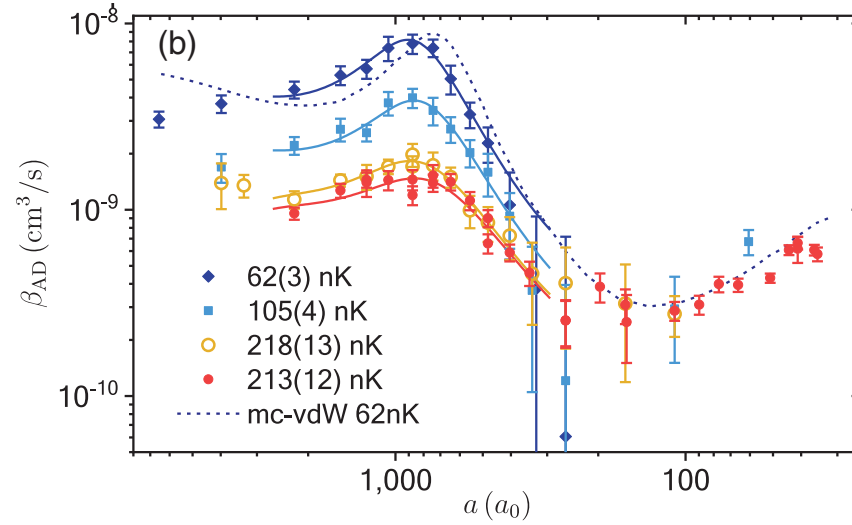


FIGURE VI.15. Taux de pertes à deux corps (atomes-dimères) au voisinage de $a_*^{(1)}$ dans un gaz de ^{39}K . Figure extraite de Xie, Van de Graaff et al. (2020).

La structure de ce terme est très voisine de celle proposée en (VI.3) pour la recombinaison à trois corps; c'est logique puisque ces deux termes décrivent la même physique, avec la formation d'édifices fortement liés, non précisés dans le modèle et décrits par le paramètre η .

Le résultat de l'analyse de Xie, Van de Graaff et al. (2020), extrapolé à température nulle, donne $a_*^{(1)} = 884(14) a_0$ et $\eta = 0.28(2)$. Les mêmes auteurs ont également mesuré le taux de recombinaison à trois corps L_3 (donc sans dimère) côté $a > 0$ et ont obtenu l'oscillation presque sinusoïdale (après division de L_3 par a^4) montrée en figure VI.16, comme attendu d'après (7). On en déduit la position du premier minimum $a_+^{(0)} = 246(6) a_0$ et du premier maximum $a_p^{(0)} = 876(28) a_0$.

Récapitulons l'ensemble des résultats obtenus par Chapurin, Xie et al. (2019) et Xie, Van de Graaff et al. (2020) (en unité de a_0) :

$$a_+^{(0)} = 246 \quad a_p^{(0)} = 876 \quad a_*^{(1)} = 884 \quad a_-^{(0)} = -908 \quad (16)$$

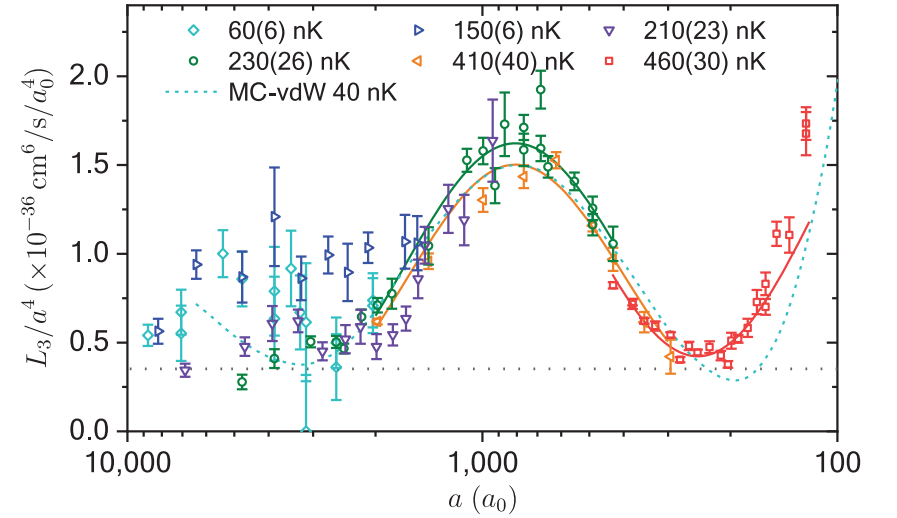


FIGURE VI.16. Taux de pertes à trois corps dans un gaz de ^{39}K côté $a > 0$. Figure extraite de Xie, Van de Graaff et al. (2020).

Cet ensemble constitue un test remarquable de l'universalité d'Efimov avec les différents rapports

$$\frac{a_*^{(1)}}{a_-^{(0)}} = \frac{884}{-908} = -0.97 \quad \text{Valeur attendue : } -1.065 \quad (17)$$

$$\frac{a_p^{(0)}}{a_-^{(0)}} = \frac{876}{-908} = -0.96 \quad \text{Valeur attendue : } -1 \quad (18)$$

$$\frac{a_p^{(0)}}{a_+^{(0)}} = \frac{876}{246} = 3.56 \quad \text{Valeur attendue : } 4.76 \quad (19)$$

Notons que pour la dernière équation, la valeur relativement petite de $a_+^{(0)}$ (comparée à la portée effective r_e) rend problématique l'atteinte de la valeur universelle, ce qui peut expliquer la déviation observée.

3 Le paramètre à trois corps

3-1 Une coïncidence surprenante?

Dans l'approche que nous avons présentée ici, basée sur une interaction de portée nulle, le paramètre à trois corps R_0 est un paramètre *ad hoc*, sans lien avec les autres quantités physiques du problème. On s'attendait initialement à ce qu'il en aille de même pour l'interaction de van der Waals qui est en jeu dans les gaz d'atomes froids. Ce fut donc une surprise quand, après avoir compilé les valeurs expérimentales de R_0 pour différentes résonances de Fano-Feshbach d'une espèce atomique donnée – le césium – (Gross, Shotan et al. 2010; Berninger, Zenesini et al. 2011) ainsi que pour différentes espèces atomiques, on a constaté que ces valeurs étaient étroitement liées à la longueur de van der Waals

$$R_{\text{vdW}} = \frac{1}{2} \left(\frac{mC_6}{\hbar^2} \right)^{1/4}. \quad (20)$$

Par exemple, si on s'intéresse au pic $a_-^{(0)}$ du taux de recombinaison à trois corps du côté $a < 0$ de la résonance, on constate que la position de ce pic semble "verrouillée" autour de $-10 R_{\text{vdW}}$ avec quelques exceptions notamment du côté des résonances de Fano-Feshbach très étroites (voir la figure VI.17 pour plus de détails).

Pour éclaircir la situation sur le plan théorique, Wang, D'Incao et al. (2012) ont étudié le comportement de ce rapport $a_-^{(0)}/R_{\text{vdW}}$ pour différents potentiels à deux corps en variant à chaque fois le nombre d'états liés dans ces potentiels [voir aussi Mestrom, Wang et al. (2017)]. Leurs résultats sont indiqués en figure VI.18; ils ont été obtenus pour :

$$V_\lambda^a(r) = -\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_{12}}{r^{12}} \quad C_{12} \equiv \lambda^6 C_6 \quad (21)$$

$$V_\lambda^b(r) = -\frac{C_6}{r^6} \exp(-\lambda^6/r^6) \quad (22)$$

$$V_{\text{vdW}}^{\text{hs}}(r) = B_{\text{hs}} \Theta(r_{\text{hs}} - r) - \frac{C_6}{r^6} \Theta(r - r_{\text{hs}}) \quad (23)$$

Ces potentiels ont tous un comportement en r^{-6} à grande distance⁴ et

4. Pour le potentiel de van der Waals avec cœur dur $V_{\text{vdW}}^{\text{hs}}(r)$ ("hs"=hard sphere), les paramètres sont ajustés pour travailler au seuil d'apparition du premier état lié.

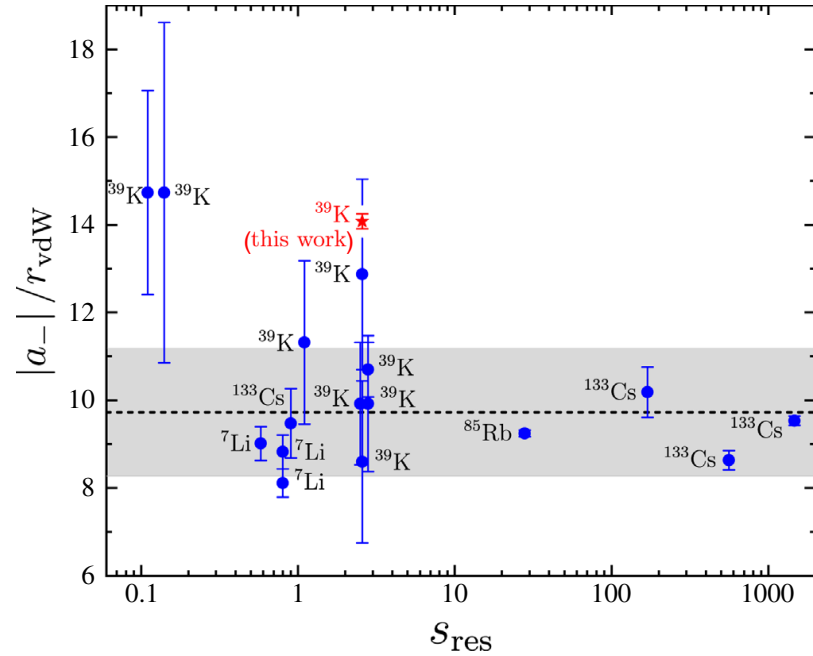


FIGURE VI.17. Valeurs du rapport $a_-^{(0)}/R_{\text{vdW}}$ pour le premier trimère d'Efimov pour différentes espèces atomiques, en fonction de la largeur s_{res} de la résonance de Fano-Feshbach. La zone grise correspond à $a_-^{(0)}/R_{\text{vdW}} = -9.7 \pm 1.5$. Figure extraite de Chapurin, Xie et al. (2019).

conduisent au "tir groupé" observé expérimentalement $a_-^{(0)} \sim -10 R_{\text{vdW}}$. Le quatrième potentiel utilisé en figure VI.18, $V_{\text{sch}}(r)$, décroît exponentiellement vite à l'infini et nous ne le discuterons pas ici.

Le lien trouvé entre le paramètre à trois corps et R_{vdW} n'est donc pas fortuit : on le retrouve théoriquement et il s'agit maintenant de comprendre son origine physique.

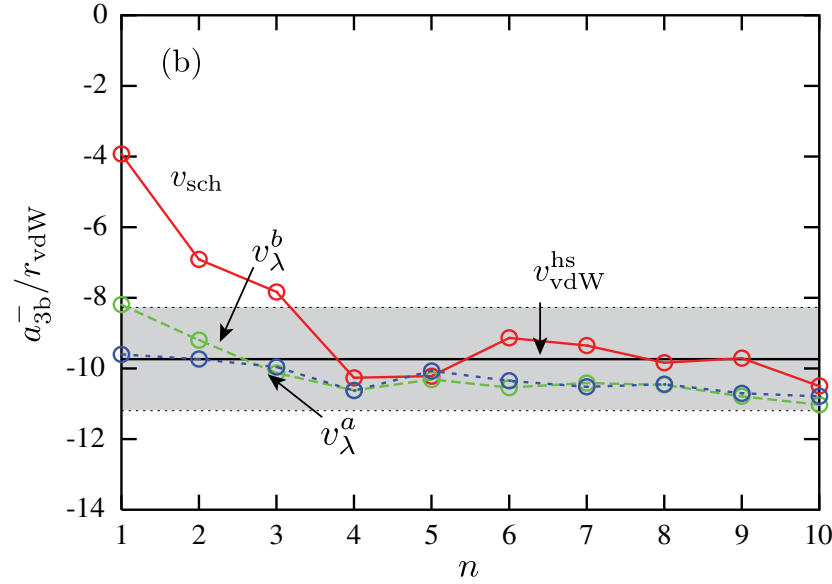


FIGURE VI.18. Valeurs du rapport $a_{-}^{(0)}/R_{\text{vdW}}$ pour le premier trimère d'Efimov calculé pour différents potentiels d'interaction à deux corps. Figure extraite de Wang, D'Incao et al. (2012).

3-2 Retour vers l'approche hypersphérique

Pour comprendre l'origine de ce lien entre paramètre à trois corps et R_{vdW} , nous allons revenir sur la démarche décrite au chapitre précédent pour traiter le problème à trois corps. Une fois le passage dans le référentiel du centre de masse effectué, le problème est décrit par 6 variables, l'hyper-rayon R avec

$$R^2 = \frac{2}{3} (r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2) \quad (24)$$

et 5 angles :

- les 2 angles α (Delves) et β (Jacobi) qui déterminent la forme du triangle (à une homothétie près),
- les 3 angles d'Euler qui déterminent l'orientation du triangle dans l'espace.

Dans ce qui suit, nous noterons Ω le quintuplet formé par ces cinq angles, une configuration donnée du triangle dans le référentiel du laboratoire étant donc définie par (R, Ω) .

L'approche hypersphérique prend pour point de départ l'équation de Schrödinger mise sous la forme (D'Incao, Greene et al. 2009) :

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \hat{H}_{\text{ang}}(\Omega; R) \right] \Phi(R, \Omega) = \mathcal{E} \Phi(R, \Omega) \quad \text{avec} \quad \mathcal{E} = \frac{mE}{\hbar^2} \quad (25)$$

où l'opérateur $\hat{H}_{\text{ang}}(\Omega; R)$ fait intervenir des dérivées par rapport aux cinq angles de Ω (opérateur de moment cinétique généralisé), et contient également les potentiels d'interaction entre les trois particules. L'hyper-rayon R joue le rôle de paramètre dans $\hat{H}_{\text{ang}}(\Omega; R)$: cet opérateur est local en R et ne contient pas de dérivées par rapport à R .

On commence par résoudre le problème aux valeurs propres pour l'hyper-angle Ω à R fixé et on trouve ainsi une série de fonctions propres et de valeurs propres paramétrées par R :

$$\hat{H}_{\text{ang}}(\Omega; R) F_i(\Omega; R) = \epsilon_i(R) F_i(\Omega; R), \quad (26)$$

Pour tout R , ces fonctions F_i forment une base orthonormée des fonctions de Ω avec

$$\langle F_i(R) | F_j(R) \rangle = \int F_i^*(\Omega; R) F_j(\Omega; R) d^5\Omega = \delta_{i,j}. \quad (27)$$

Une fois cette première étape effectuée, on cherche la solution de l'équation initiale (25) sous la forme générale :

$$\Phi(R, \Omega) = \sum_j \phi_j(R) F_j(\Omega; R), \quad (28)$$

où les fonctions $\phi_j(R)$ sont à ce stade inconnues. Pour les déterminer, on injecte cette forme dans (25) et on projette le résultat sur un F_i particulier pour trouver :

$$-\frac{d^2 \phi_i}{dR^2} + \epsilon_i(R) \phi_i(R) + [\dots] = \mathcal{E} \phi_i(R). \quad (29)$$

Dans cette expression, le terme $[\dots]$ apparaît du fait de la dépendance en R des fonctions $F_j(\Omega; R)$; on trouve plus précisément, avec la notation utilisée

en (27) :

$$[\dots] = -2 \sum_j \frac{d\phi_j}{dR} \langle F_i | \partial_R F_j \rangle - \sum_j \phi_j(R) \langle F_i | \partial_R^2 F_j \rangle \quad (30)$$

L'approche la plus simple consiste à négliger complètement le terme [...]. Cela correspond à l'approximation de Born–Oppenheimer en physique moléculaire et c'est également ce que nous avons présenté au chapitre 5, §4.1 : le potentiel hypersphérique que nous avons alors introduit, $[s_i^2(R) - 1/4]/R^2$, n'était autre que le terme $\epsilon_i(R)$ qui apparaît dans (29).

A l'inverse, si on garde le système infini d'équations couplées pour les ϕ_j , on a une description exacte du problème. En pratique, elle sera d'autant meilleure que la troncature de ce système se fera pour un indice j élevé.

Une solution intermédiaire qui va nous guider ici consiste à ne garder qu'une seule fonction inconnue ϕ_i tout en prenant en compte les corrections provenant de la dépendance en R de $F_i(\Omega; R)$ dans (30). Après un calcul relativement simple [voir par exemple Dalibard, Gerbier et al. (2011) ou le cours 2014, chap. 3, §4], on arrive à la forme simple suivante pour l'équation vérifiée par ψ_i :

$$\left\{ \left[-i \frac{d}{dR} - \mathcal{A}_i(R) \right]^2 + \epsilon_i(R) + \mathcal{V}_i(R) \right\} \phi_i(R) = \mathcal{E} \phi_i(R) \quad (31)$$

où l'on a fait apparaître deux potentiels géométriques $\mathcal{A}_i$ et $\mathcal{V}_i$:

$$\mathcal{A}_i(R) = i \langle F_i(R) | \partial_R F_i(R) \rangle \quad \mathcal{V}_i(R) = \sum_{j \neq i} |\langle \partial_R F_i(R) | F_j(R) \rangle|^2 \quad (32)$$

Si la variable R évoluait dans un espace de dimension supérieure à 1, le potentiel $\mathcal{A}_i$ serait un "potentiel vecteur" et décrirait une possible phase de Berry. Pour le problème qui nous intéresse ici, où la variable R est unidimensionnelle, $\mathcal{A}_i$ ne joue pas de rôle. Il peut d'ailleurs être éliminé par un changement de jauge pour la fonction ϕ_i , en posant $\tilde{\phi}_i(R) = \phi_i(R) e^{-i\chi(R)}$ avec $\chi(R) = \int_0^R \mathcal{A}_i(R') dR'$. En revanche, le "potentiel scalaire" $\mathcal{V}_i(R)$ va jouer un rôle important. Notons tout de suite qu'il est toujours positif et d'autant plus grand que l'état angulaire $|\phi_i(R)\rangle$ varie vite avec R .

3-3 Emergence d'un cœur dur en $\sim 2R_{\text{vdW}}$

Pour apprécier de manière quantitative le rôle du potentiel géométrique défini au paragraphe précédent, il est intéressant d'examiner les résultats de Wang, D'Incao et al. (2012) déjà cités, ainsi que ceux de Naidon, Endo & Ueda (2014) [avec leur erratum Naidon, Endo & Ueda (2021)]. Ces auteurs ont considéré deux types de potentiels à deux corps

$$V_{\text{soft}}(r) = -\frac{C_6}{r^6 + \sigma^6} \quad \text{et} \quad V_{\text{LJ}}(r) = -\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_{12}}{r^{12}}. \quad (33)$$

Pour C_6 fixé, ils ont fait varier le nombre d'états liés en changeant σ ou C_{12} , puis calculé le potentiel total résultant $W_i(R) = \epsilon_i(R) + \mathcal{V}_i(R)$ pour le canal de plus basse énergie $i = 0$. Le calcul a été fait dans le cas unitaire ($a = \infty$) pour lequel le potentiel adiabatique $\epsilon_0(R)$ est égal à $-(|s_0|^2 + 1/4)/R^2$ si la portée du potentiel à deux corps peut être négligée.

Le résultat tracé sur la figure VI.19 est frappant. Dès que le nombre d'états liés dépasse 3, la forme de $W_i(R)$ devient quasiment indépendante de ce nombre d'états liés et donc de la profondeur du potentiel à deux corps $V(r)$ originel. Plus précisément :

- Pour $R \gtrsim 10R_{\text{vdW}}$, on retrouve le potentiel d'Efimov déterminé au chapitre précédent pour une portée nulle, $-(|s_0|^2 + 1/4)/R^2$.
- Pour $2R_{\text{vdW}} \lesssim R \lesssim 10R_{\text{vdW}}$, le potentiel $W_i(R)$ est significativement plus profond que le potentiel d'Efimov pour une portée nulle.
- Pour $R \approx 2R_{\text{vdW}}$, un cœur dur émerge et cela même si le potentiel à deux corps de départ $V(r)$ est strictement monotone, comme c'est le cas pour $V_{\text{soft}}(r)$.

Il ne reste plus qu'à comprendre pourquoi le potentiel $W_0(R)$ fait apparaître ce quasi cœur dur à courte distance. L'explication de Wang, D'Incao et al. (2012) et Naidon, Endo & Ueda (2014) repose sur la forme optimale du trimère en fonction de l'hyperrayon R :

- Quand $R \gg R_{\text{vdW}}$, la forme optimale est la même que pour un potentiel de portée nulle : c'est un triangle allongé avec deux particules proches l'une de l'autre et la troisième beaucoup plus loin.
- Quand l'hyperrayon devient de l'ordre de quelques R_{vdW} , la forme optimale du triangle est plus proche d'un triangle équilatéral. En effet, la forme allongée impliquerait d'avoir deux particules à une distance $\ll R_{\text{vdW}}$, ce qui est peu probable quand on regarde la solution

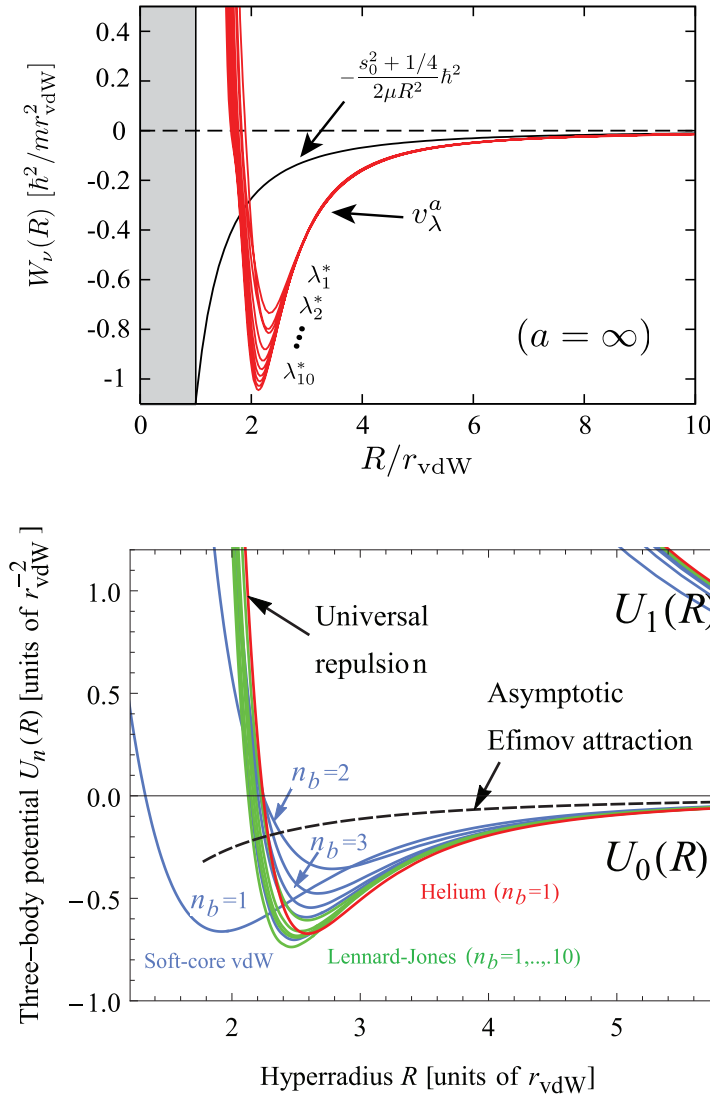


FIGURE VI.19. Potentiel total $W_i(R) = \epsilon_i(R) + \mathcal{V}_i(R)$ pour le canal $i = 0$. Le calcul est fait à l'unitarité, c'est-à-dire pour $a = \infty$. Figures extraites de Wang, D'Incao et al. (2012) (haut) et Naidon, Endo & Ueda (2014) (bas).

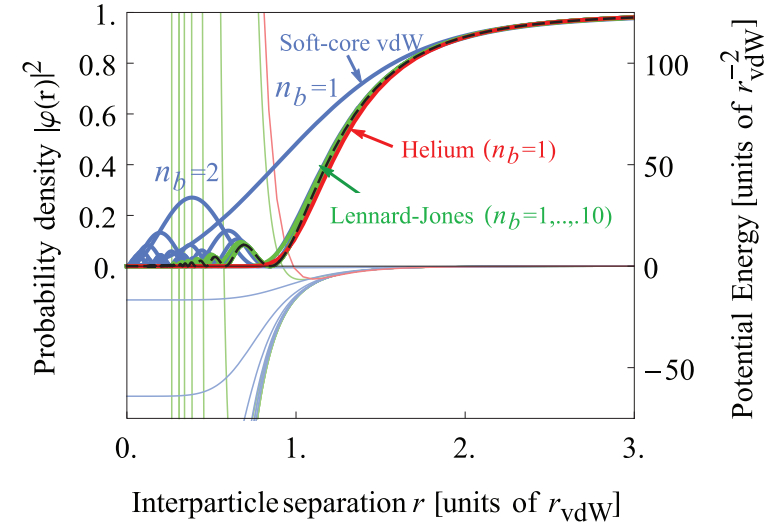


FIGURE VI.20. Densité de probabilité pour la fonction d'onde à deux corps d'énergie nulle pour les différents potentiels donnés en (33). Dès qu'il y a plusieurs états liés pour ces potentiels, la probabilité pour trouver les deux atomes à une distance inférieure à R_{vdW} devient très faible. Les lignes en traits fins indiquent les potentiels utilisés pour le calcul. Le calcul est fait pour $a = \infty$. Figure extraite de Naidon, Endo & Ueda (2014).

du problème à deux corps indiquée sur la figure VI.20 [voir également le cours 2021, chapitre 4, §4].

La forme du triangle varie donc rapidement au voisinage $R \sim 2R_{\text{vdW}}$, ce qui crée un potentiel géométrique scalaire $\mathcal{V}_0(R)$ important [cf. (32)].

Notons que cette explication repose sur une analyse d'un potentiel binaire à un canal. Dans les expériences menées sur les gaz d'atomes froids, on utilise des résonances de Fano–Feshbach pour approcher la situation $a = \infty$ et les paramètres de la résonance, comme sa largeur et la longueur d'onde de fond (*background scattering length*), peuvent jouer un rôle significatif. On pourra consulter Schmidt, Rath et al. (2012), Wang & Julienne (2014) et Langmack, Schmidt et al. (2018) pour un traitement détaillé dans

ce cas.

Le cas des résonances de Feshbach étroites est particulier du fait de la portée effective $\gg R_{\text{vdW}}$ qui apparaît dans le problème (Petrov 2004). Le recours à un paramètre à trois corps pour régulariser la situation n’est alors plus nécessaire et Gogolin, Mora et al. (2008) ont pu fournir une solution analytique au problème à trois corps dans ce cas [voir aussi Castin & Tignone (2011b), Endo & Castin (2016), Secker, Ahmed-Braun et al. (2021) et Kraats, Ahmed-Braun et al. (2022) et refs. in]. Plusieurs expériences récentes ont été menées dans ce régime, parmi lesquelles Johansen, DeSalvo et al. (2017), Yudkin, Elbaz, Giannakeas et al. (2019), Xie, Van de Graaff et al. (2020), Li, Yudkin et al. (2022) et Etrych, Martirosyan et al. (2022).

4 Au delà de l’effet Efimov standard

Le travail original d’Efimov (1970) portait sur trois bosons identiques en interaction résonante et c’est sur ce cas que nous nous sommes concentrés dans ces deux derniers chapitres. Pour conclure cette présentation, nous allons maintenant passer en revue quelques situations différentes, par la nature statistique ou par le nombre de particules en jeu. Compte tenu de la place impartie, notre discussion sera forcément parcellaire et nous renvoyons les lecteurs intéressés vers Naidon & Endo (2017) qui présentent en détail de nombreux prolongements au problème d’Efimov.

4-1 Trois fermions identiques

Commençons par le cas simple où l’on remplace les trois bosons identiques de l’effet Efimov par trois fermions polarisés. Il n’y a alors plus d’interaction binaire en onde s et il faut se tourner vers les interactions binaires en onde p ($\ell = 1$) pour lesquelles l’amplitude de diffusion $f_1(k)$ s’écrit [voir le cours 2021, chap. 3, §2.3] :

$$\frac{1}{f_1(k)} \approx -\frac{1}{k^2 v} + \frac{k_e}{2} - ik, \quad (34)$$

où v est le volume de diffusion et k_e un terme de portée effective (toujours négatif au voisinage de la résonance). La transposition de $|a| = \infty$ pour une

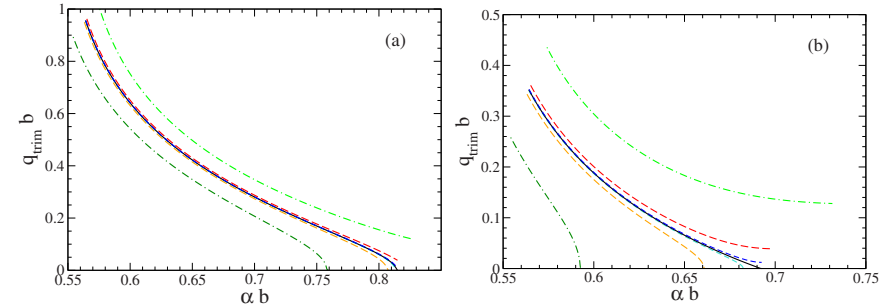


FIGURE VI.21. Nombre d’onde q définissant l’énergie du trimère $-\hbar^2 q^2/m$ formé à partir de trois fermions identiques. La portée effective est notée ici $\alpha \equiv -k_e/2$. Le paramètre b désigne la portée du potentiel, obtenu ici par une modélisation d’une résonance de Fano–Feshbach avec un couplage gaussien entre le canal ouvert et le canal fermé. Figure de gauche (resp. droite) : parité positive (resp. négative). Ligne noire continue : $v = \infty$. ligne tiretée bleue : $v = \pm 10^4 b^3$, ligne tiretée rouge/orange : $v = \pm 10^3 b^3$, ligne tiretée verte : $v = \pm 10^2 b^3$. Figures extraites de Jona-Lasinio, Pricoupenko et al. (2008).

résonance en onde s correspond alors à un volume de diffusion v infini. Un état faiblement lié du dimère apparaît du côté $v > 0$ de la résonance.

Ce problème a été étudié par Jona-Lasinio, Pricoupenko et al. (2008) [voir aussi Levinsen, Cooper et al. (2008) et Braaten, Hagen et al. (2012)]. Ces auteurs ont montré que pour le canal de moment cinétique 1, il pouvait exister deux trimères liés, un de chaque parité, pour v choisi suffisamment proche de la résonance $v = \infty$. Ces trimères peuvent être de nature borroméenne, c’est-à-dire exister pour des valeurs grandes et négatives du volume de diffusion, pour lesquelles il n’y a pas d’état faiblement lié à deux corps. La position de ces trimères est universelle dans la mesure où elle ne dépend que des paramètres du problème à deux corps, en l’occurrence les valeurs de v , k_e et de la portée b du potentiel (figure VI.21).

Il n’y a donc pas d’effet Efimov dans ce cas, c’est-à-dire pas d’émergence d’une série infinie d’états liés à trois corps au seuil de formation du dimère. Par ailleurs, il n’est pas nécessaire d’introduire un paramètre à trois corps pour décrire l’énergie des deux trimères universels mentionnés ci-dessus. Ce problème a été repris récemment par Chen & Greene (2022), qui ont

confirmé les conclusions de Jona-Lasinio, Pricoupenko et al. (2008) pour des potentiels de type Lennard-Jones $-r^{-6} + r^{-12}$.

4-2 Trois particules discernables

Quand on considère trois particules discernables, la fonction d'onde n'a pas à être symétrisée ou antisymétrisée, ce qui relâche une contrainte présente pour des particules indiscernables. Pour une même force des interactions, l'énergie de l'état fondamental du système à trois particules discernables est donc forcément inférieure ou égale à celle calculée pour des bosons ou des fermions.

Si les trois interactions en onde s sont résonantes ($|a_{ij}| = \infty$) et les trois masses égales, on retrouve en fait le même résultat que pour trois bosons identiques du fait de la symétrie du système. On a en particulier le paramètre d'échelle $\lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 22.7$ avec $|s_0| = 1.00624$.

Si deux interactions sont résonantes et la troisième nulle, par exemple $|a_{12}| = |a_{13}| = +\infty$ et $a_{23} = 0$, on retrouve formellement le cas mMM étudié aux chapitres 3 et 4. Si la relation $m \ll M$ n'est pas vérifiée, l'approche de Born–Oppenheimer n'est plus valable mais un traitement similaire à celui adopté dans le chapitre 5 reste possible. On retrouve alors un effet Efimov, avec un paramètre d'échelle $\lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 2000$ avec $|s_0| = 0.414$ (Naidon & Endo 2017). La très grande valeur de ce paramètre λ rend difficile toute vérification expérimentale.

4-3 Quatre bosons identiques

Nous continuons notre discussion par le cas de quatre bosons identiques, de spin nul ou polarisés. Là aussi, la première question qui se pose est celle d'un véritable effet Efimov à quatre corps, c'est-à-dire l'existence d'une infinité d'états liés de tétramères au seuil d'apparition $a_-^{(0)}$ du premier trimère d'Efimov, côté $a < 0$. Cette question a en fait été abordée très peu de temps après la publication d'Efimov par Amado & Greenwood (1973) et la réponse est négative.

Ce résultat ne clôt malgré tout pas complètement la question. Sans

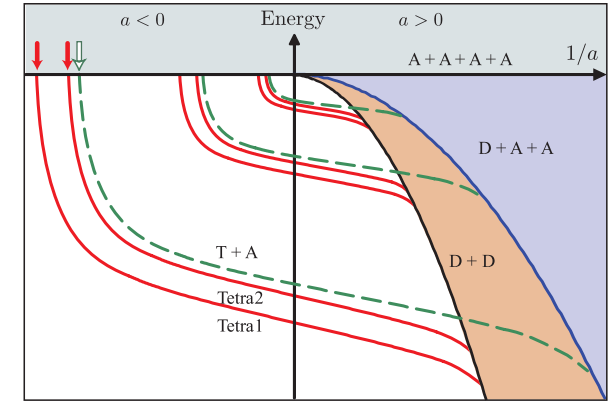


FIGURE VI.22. Les deux branches de tétramères universels attachées à chaque branche de trimère d'Efimov. Figure extraite de Ferlaino, Knoop et al. (2009).

qu'une série efimovienne de tétramères existe, il peut y avoir un ou quelques tétramères attachés à chaque trimère d'Efimov. Il s'agit d'un édifice à quatre particules, d'énergie négative et inférieure à l'énergie du trimère. La prédiction de tels tétramères "universels" a été faite par Hammer & Platter (2007), puis affinée par Stecher, D'Incao et al. (2009). Il y a deux branches de tétramères attachées à chaque branche de trimères (figure VI.22). Ces tétramères sont qualifiés d'universels car une fois la position du trimère connue, leur énergie peut être calculée sans nécessiter l'introduction d'un paramètre à quatre corps⁵.

Ces tétramères ont une nature borroméenne, dans le sens qu'ils peuvent exister pour une longueur de diffusion inférieure en valeur absolue à la longueur de diffusion $a_-^{(n)}$ (négative) pour laquelle le trimère apparaît. La prédiction de Stecher, D'Incao et al. (2009) est

$$a_{4b1}^{(0)} = 0.43 a_-^{(0)} \quad a_{4b2}^{(0)} = 0.90 a_-^{(0)} \quad (35)$$

L'existence de ces tétramères a été confirmée par Ferlaino, Knoop et al.

5. Cette affirmation nécessite quelques précautions pour le trimère fondamental, car les tétramères correspondants ont une taille plus petite que lui et peuvent donc être sensibles à la physique à courte portée [voir Naidon & Endo (2017)].

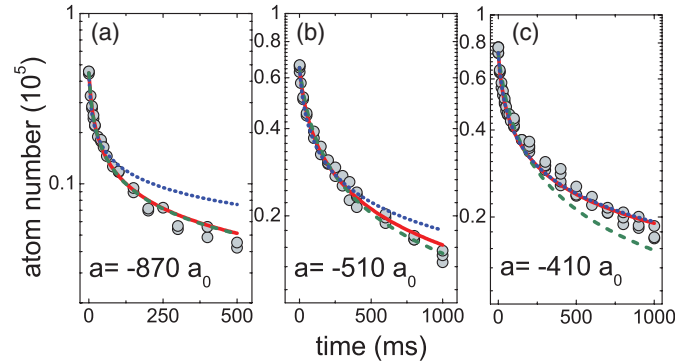


FIGURE VI.23. Décroissance du nombre d'atomes de césium au voisinage du seuil d'apparition du premier trimère d'Efimov. Ligne tiretée (pointillée) : pertes à trois (quatre) corps uniquement. Ligne continue : prédiction déduite de (36). Figure extraite de Ferlaino, Knoop et al. (2009).

(2009) dans une expérience qui tire précisément parti de cette nature borroméenne. Les chercheurs d'Innsbruck ont étudié les pertes d'atomes dans un piège de césium au voisinage du seuil d'apparition $a_-^{(0)} = -870 a_0$ du trimère. Ils ont observé deux valeurs de a pour lesquelles les pertes s'expliquaient par la somme d'une loi à trois corps et d'une loi à quatre corps (figure VI.23) :

$$\frac{\dot{N}}{N} = -L_3 \rho^2 - L_4 \rho^3. \quad (36)$$

Les valeurs trouvées pour $a_{4b1}^{(0)}$ et $a_{4b2}^{(0)}$ sont en bon accord avec la prédiction (35) [coefficients mesurés : 0.47 et 0.84].

4-4 N_f fermions identiques et une autre particule

Le système $mMMM$, c'est-à-dire $N_f = 3$ fermions identiques et une autre particule, ainsi que sa généralisation à $N_f = 4$, sont les seuls systèmes connus⁶ qui présentent un véritable effet Efimov. Le cas $N_f = 3$ a été étudié

6. En particulier, le système $mMMM$ avec M bosonique ne présente pas cette propriété (Adhikari & Fonseca 1981). Il en va de même pour le système à quatre fermions $mmMM$

par Castin, Mora et al. (2010) et le cas $N_f = 4$ par Bazak & Petrov (2017).

La question que nous abordons dans ce paragraphe peut se formuler de la manière suivante : combien de fermions polarisés de masse M peuvent être liés par interaction avec une unique particule légère de masse $m \ll M$? Pour commencer, rappelons le résultat important obtenu aux chapitres 3 et 4 pour le cas $N_f = 2$. Nous avons considéré le système à trois corps mMM pour une interaction de portée nulle avec $|a| = +\infty$ et indiqué que (Kartavtsev & Malykh 2007) :

- un effet Efimov peut se produire quand $M/m > 13.607$;
- pour $8.173 < M/m < 13.607$, il existe côté $a > 0$ un (ou deux) trimères "universels", dont l'énergie ne dépend pas d'un paramètre à trois corps.

Pour étudier le problème $mMMM$, donc avec un fermion M supplémentaire, Castin, Mora et al. (2010) se sont placés eux aussi à l'unitarité pour une interaction binaire mM de portée nulle. Les interactions MM entre deux fermions identiques sont supposées négligeables (il ne pourrait s'agir que d'interactions en ondes impaires, *a priori* faibles à basse température). On considère donc l'hamiltonien purement cinétique

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^4 \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \quad (37)$$

avec les conditions aux limites de Bethe-Peierls aux points où la particule légère m vient au contact d'un des fermions M . La question est de savoir si cet hamiltonien admet des états d'énergie négative dans lesquels les trois particules lourdes sont liées ensemble par la particule légère.

Comme pour le problème à trois corps, il est utile pour un problème à N corps (avec ici $N = N_f + 1$) d'isoler d'abord les 3 variables du centre de masse (que l'on prendra au repos dans ce qui suit), puis de séparer les $d = 3N - 3$ variables restantes en

- une variable R , l'hyperrayon, donnant l'échelle de longueur du problème;
- $d - 1 = 3N - 4$ hyperangles, notés collectivement Ω , définissant l'arrangement spatial des N corps (à une homothétie près) et l'orientation de cet arrangement dans l'espace.

(Endo & Castin 2015).

L'expression générale de l'opérateur énergie cinétique en dimension d peut s'écrire en fonction de ces variables (voir par exemple Greene, Giannakeas et al. (2017)) :

$$\hat{H} = \hat{T}_R + \frac{\hbar^2}{2m_r R^2} \hat{\Lambda}_\Omega^2 \quad (38)$$

où l'opérateur énergie cinétique radiale est :

$$\hat{T}_R = -\frac{\hbar^2}{2m_r} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{d-1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \right) \quad (39)$$

et où $\hat{\Lambda}_\Omega$ est l'opérateur "grand moment cinétique" pour le système de dimension d . Cet opérateur fait intervenir les hyperangles et les dérivées d'ordre 1 et 2 par rapport à ces angles⁷, mais pas l'hyperrayon R .

Notons que la définition précise du couple "hyperrayon – masse réduite" varie selon les auteurs par des facteurs numériques d'ordre unité. Dans ce qui suit, nous ne rentrerons pas dans des calculs quantitatifs et nous n'aurons donc pas besoin de spécifier ce choix. On pourra consulter par exemple Greene, Giannakeas et al. (2017) pour une construction explicite des hyperangles, de l'hyperrayon et de la masse réduite associée.

En règle générale, quand a n'est pas infinie ou nulle, les conditions aux limites de Bethe–Peierls couplent hyperrayon et hyperangles, ce qui rend le problème particulièrement complexe. Dans le cas $|a| = +\infty$ (ou dans le cas sans interaction $a = 0$), les conditions aux limites de Bethe–Peierls ne font intervenir que les hyperangles. C'est une signature de l'invariance d'échelle du système déjà mentionnée plusieurs fois dans les chapitres précédents : il n'y a aucune échelle de longueur à mettre en rapport avec R pour obtenir une équation sans dimension. C'est ainsi que pour le problème à trois corps, nous avons abouti au chapitre 5 à l'équation traduisant ces conditions aux limites pour la partie angulaire $F(\alpha)$ de la fonction d'onde :

$$|a| = +\infty : \quad \left[\frac{dF}{d\alpha} \right]_{\alpha \rightarrow 0} + \frac{8}{\sqrt{3}} F\left(\frac{\pi}{3}\right) = 0. \quad (41)$$

7. Par exemple, en dimension $d = 3$, on a l'expression bien connue en fonction de l'angle polaire θ et l'angle azimuthal φ :

$$\hat{\Lambda}^2 = \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (40)$$

Le traitement de Castin, Mora et al. (2010) part donc du fait que l'on peut chercher alors les états propres de $\hat{H}$ sous une forme factorisée :

$$\Phi(R, \Omega) = \frac{\phi(R)}{R^{(d-1)/2}} F(\Omega) \quad \text{avec pour } N = 4 : \quad \frac{d-1}{2} = 4. \quad (42)$$

Il faut dans un premier temps résoudre le problème aux valeurs propres pour la partie angulaire $F(\Omega)$ en prenant en compte les conditions aux limites de Bethe–Peierls :

$$\hat{\Lambda}_\Omega^2 F(\Omega) = \lambda F(\Omega). \quad (43)$$

Une fois cette étape (délicate!) franchie, l'équation radiale s'écrit simplement

$$\boxed{-\frac{d^2 \phi}{dR^2} + \frac{s^2 - 1/4}{R^2} \phi(R) = \epsilon \phi(R)} \quad (44)$$

où [cf. Eq. (C-13) de Werner & Castin (2006)]

$$\boxed{s^2 = \lambda + \frac{1}{4}(d-2)^2} \quad (45)$$

est un nombre dépendant de M/m , mais indépendant de R , et où on a posé $\epsilon = 2m_r E / \hbar^2$.

Nous nous retrouvons alors en terrain familier : si des valeurs négatives de s^2 sont possibles, un effet Efimov apparaîtra. Le résultat de Castin, Mora et al. (2010) pour $N = N_f + 1 = 4$ est qu'effectivement, cet effet peut se produire quand

$$\boxed{13.384 < \frac{M}{m}} \quad (46)$$

Cette condition est (légèrement) moins contraignante que celle trouvée pour le problème mMM . Il existe donc un intervalle de valeurs de M/m , $[13.384, 13.607]$, sur lequel le problème à quatre corps est Efimovien alors que celui à trois corps ne l'est pas (voir la figure VI.24). Pour $M/m > 13.607$, il est difficile d'énoncer des résultats généraux sur le problème $(3+1)$ dans la mesure où la résolution du problème Efimovien $(2+1)$ nécessite l'introduction d'un paramètre à trois corps non universel. Nous avons représenté cette zone en violet sur la figure VI.24.

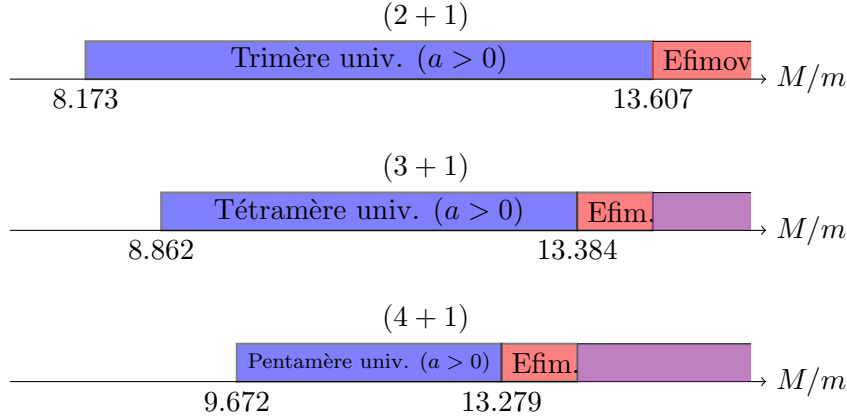


FIGURE VI.24. Les états liés possibles de N_f fermions de masse M en interaction binaire résonante avec une particule de masse m ($N_f = 2, 3, 4$). Ces données sont extraites de Kartavtsev & Malykh (2007), Castin, Mora et al. (2010), Bazak & Petrov (2017) et Bazak (2020). L'échelle de l'axe M/m n'est pas linéaire. Il n'y a pas d'effet Efimov pour $N_f = 5$ ou 6 (Bazak 2020).

On peut également chercher un tétramère universel pour des valeurs de M/m plus faibles, similaire au(x) trimère(s) universel(s) de Kartavtsev & Malykh (2007). Un tel tétramère existe effectivement sur l'intervalle $[8.862, 13.384]$ (Blume 2012; Bazak 2020).

Comme nous l'avons annoncé en introduction de ce paragraphe, le problème $(4 + 1)$, c'est-à-dire $N_f = 4$ fermions de masse M et une particule légère de masse m , conduit lui aussi à un effet Efimov original avec la formation de pentamères, dans un (petit) domaine de valeurs de M/m pour lequel il n'y a pas de trimères d'Efimov, ni de tétramères d'Efimov (Bazak & Petrov 2017). En revanche, on peut montrer qu'il n'existe pas d'états d'Efimov pour les systèmes $(5 + 1)$ et $(6 + 1)$ (Bazak 2020). Ces résultats sont eux aussi résumés sur la figure VI.24.

Références

- Acharya, Bijaya, Chen Ji & Lucas Platter (2016), « Effective-field-theory analysis of Efimov physics in heteronuclear mixtures of ultracold atomic gases », in *Physical Review A* **94**, p. 032702.
- Adhikari, Sadhan K. & António C. Fonseca (1981), « Four-body Efimov effect in a Born-Oppenheimer model », in *Phys. Rev. D* **24** (2), p. 416-425.
- Alfaro, V. de, S. Fubini & G. Furlan (1976), « Conformal invariance in quantum mechanics », in *Il Nuovo Cimento A* **34**, p. 569-612.
- Alhaidari, AD (2008), « Analytic solution of the wave equation for an electron in the field of a molecule with an electric dipole moment », in *Annals of Physics* **323**, p. 1709-1728.
- Alhaidari, AD & H Bahlouli (2008), « Electron in the Field of a Molecule with an Electric Dipole Moment », in *Physical Review Letters* **100**, p. 110401.
- Amado, RD & FC Greenwood (1973), « There is no Efimov effect for four or more particles », in *Physical Review D* **7**, p. 2517.
- Araujo, Vanilse S, Francisco Antônio Bezerra Coutinho & J Fernando Perez (2004), « Operator domains and self-adjoint operators », in *American Journal of Physics* **72**, p. 203-213.
- Astrakharchik, GE & Boris A Malomed (2015), « Quantum versus mean-field collapse in a many-body system », in *Physical Review A* **92**, p. 043632.
- Barontini, G, C Weber, F Rabatti, J Catani, G Thalhammer, M Inguscio & F Minardi (2009), « Observation of heteronuclear atomic Efimov resonances », in *Physical Review Letters* **103**, p. 043201.
- (2010), « Erratum : observation of heteronuclear atomic Efimov resonances [Phys. Rev. Lett. 103, 043201 (2009)] », in *Physical Review Letters* **104**, p. 059901.
- Bazak, Betzalel (2020), « Efimov physics beyond three particles », in *International Conference on Few-Body Problems in Physics*, Springer, , p. 885-894.
- Bazak, Betzalel & Dmitry S Petrov (2017), « Five-body Efimov effect and universal pentamer in fermionic mixtures », in *Physical Review Letters* **118**, p. 083002.
- Bedaque, Paulo F, Eric Braaten & H-W Hammer (2000), « Three-body recombination in Bose gases with large scattering length », in *Physical Review Letters* **85**, p. 908.
- Benjamin, Simon C., Luis Quiroga & Neil F. Johnson (1996), « Analytic results for the linear and nonlinear response of atoms in a trap with a model interaction », in *Physical Review A* **54** (5), p. 4309-4314.
- Berninger, M, A Zenesini, B Huang, W Harm, H-C Nägerl, F Ferlaino, R Grimm, PS Julienne & JM Hutson (2011), « Universality of the three-body parameter for Efimov states in ultracold cesium », in *Physical Review Letters* **107**, p. 120401.
- 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.
- Bloom, Ruth S, Ming-Guang Hu, Tyler D Cumby & Deborah S Jin (2013), « Tests of universal three-body physics in an ultracold Bose-Fermi mixture », in *Physical Review Letters* **111**, p. 105301.
- Blume, D (2012), « Universal four-body states in heavy-light mixtures with a positive scattering length », in *Physical Review Letters* **109**, p. 230404.
- Bonneau, Guy, Jacques Faraut & Galliano Valent (2001), « Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics », in *American Journal of physics* **69**, p. 322-331.
- Braaten, Eric, P Hagen, H-W Hammer & Lucas Platter (2012), « Renormalization in the three-body problem with resonant p-wave interactions », in *Physical Review A* **86**, p. 012711.

- Braaten, Eric & H-W Hammer (2004), « Enhanced dimer relaxation in an atomic and molecular Bose-Einstein condensate », in *Physical Review A* **70**, p. 042706.
- (2007a), « Efimov physics in cold atoms », in *Annals of Physics* **322**, p. 120-163.
 - (2007b), « Resonant dimer relaxation in cold atoms with a large scattering length », in *Physical Review A* **75**, p. 052710.
 - (2009), « Erratum : Resonant dimer relaxation in cold atoms with a large scattering length [Phys. Rev. A 75, 052710 (2007)] », in *Physical Review A* **79**, p. 039905.
 - (2006), « Universality in few-body systems with large scattering length », in *Physics Reports* **428**, p. 259-390.
- Braaten, Eric, H.-W. Hammer & M. Kusunoki (2003), « Universal equation for Efimov states », in *Physical Review A* **67** (2), p. 022505.
- Brown, W Byers & Robert E Roberts (1967), « On the critical binding of an electron by an electric dipole », in *The Journal of Chemical Physics* **46**, p. 2006-2007.
- Bruch, Ludwig W. & Katuro Sawada (1973), « Inequality Relating the Ground-State Energies of Two and Three Bosons », in *Phys. Rev. Lett.* **30** (1), p. 25-27.
- Brühl, R, A Kalinin, O Kornilov, JP Toennies, GC Hegerfeldt & M Stoll (2005), « Matter Wave Diffraction from an Inclined Transmission Grating : Searching for the Elusive ^4He Trimer Efimov State », in *Physical Review Letters* **95**, p. 063002.
- Burgess, CP, Peter Hayman, Matt Williams & László Zalavári (2017), « Point-particle effective field theory I : classical renormalization and the inverse-square potential », in *Journal of High Energy Physics* **2017**, p. 1-35.
- Calogero, F. (1971), « Solution of the One-Dimensional N-Body Problems with Quadratic and/or Inversely Quadratic Pair Potentials », in *Journal of Mathematical Physics* **12**, p. 419.
- Calogero, Francesco (2003), *Classical many-body problems amenable to exact treatments : (solvable and/or integrable and/or linearizable...)* in *One-, Two-and Three-Dimensional Space*, t. 66, Springer Science & Business Media.
- Camblong, Horacio E, Luis N Epele, Huner Fanchiotti & Carlos A Garcia Canal (2001a), « Dimensional transmutation and dimensional regularization in quantum mechanics : I. general theory », in *Annals of Physics* **287**, p. 14-56.
- (2001b), « Quantum anomaly in molecular physics », in *Physical Review Letters* **87**, p. 220402.
- Camblong, Horacio E, Luis N Epele, Huner Fanchiotti & Carlos A García Canal (2000), « Renormalization of the inverse square potential », in *Physical Review Letters* **85**, p. 1590.
- (2001c), « Dimensional transmutation and dimensional regularization in quantum mechanics : II. rotational invariance », in *Annals of Physics* **287**, p. 57-100.
- Case, K. M. (1950), « Singular Potentials », in *Phys. Rev.* **80** (5), p. 797-806.
- Castin, Yvan (2004), « Exact scaling transform for a unitary quantum gas in a time dependent harmonic potential », in *Comptes Rendus Physique* **5**, p. 407-410.
- Castin, Yvan, Christophe Mora & Ludovic Pricoupenko (2010), « Four-Body Efimov Effect for Three Fermions and a Lighter Particle », in *Physical Review Letters* **105** (22), p. 223201.
- Castin, Yvan & Edoardo Tignone (2011a), « Trimers in the resonant $(2+1)$ -fermion problem on a narrow Feshbach resonance : Crossover from Efimovian to hydrogenoid spectrum », in *Physical Review A* **84** (6), p. 062704.
- (2011b), « Trimers in the resonant $(2+1)$ -fermion problem on a narrow Feshbach resonance : Crossover from Efimovian to hydrogenoid spectrum », in *Physical Review A* **84**, p. 062704.
- Chapurin, Roman, Xin Xie, Michael J. Van de Graaff, Jared S. Popowski, Jose P. D’Incao, Paul S. Julienne, Jun Ye & Eric A. Cornell (2019), « Precision Test of the Limits to Universality in Few-Body Physics », in *Physical Review Letters* **123**, p. 233402.
- Chen, Yu-Hsin & Chris H Greene (2022), « Efimov physics implications at p-wave fermionic unitarity », in *Physical Review A* **105**, p. 013308.
- Chenciner, Alain (2014), « Poincaré and the three-body problem », in *Henri Poincaré, 1912–2012 : Poincaré Seminar 2012*, Springer, , p. 51-149.
- 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.
- Connolly, Kevin & David J Griffiths (2007), « Critical dipoles in one, two, and three dimensions », in *American Journal of Physics* **75**, p. 524-531.
- Coon, Sidney A & Barry R Holstein (2002), « Anomalies in quantum mechanics : the $1/r^2$ potential », in *American Journal of Physics* **70**, p. 513-519.

- Coulson, CA & Mary Walmsley (1967), « The minimum dipole moment required to bind an electron to a finite electric dipole », in *Proceedings of the Physical Society (1958-1967)* **91**, p. 31.
- Crawford, Oakley H (1967), « Bound states of a charged particle in a dipole field », in *Proceedings of the Physical Society (1958-1967)* **91**, p. 279.
- D’Incao, José P (2018), « Few-body physics in resonantly interacting ultracold quantum gases », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **51**, p. 043001.
- D’Incao, José P, Chris H Greene & BD Esry (2009), « The short-range three-body phase and other issues impacting the observation of Efimov physics in ultracold quantum gases », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **42**, p. 044016.
- D’Incao, JP & BD Esry (2005a), « Manifestations of the Efimov effect for three identical bosons », in *Physical Review A* **72**, p. 032710.
- (2005b), « Scattering length scaling laws for ultracold three-body collisions », in *Physical Review Letters* **94**, p. 213201.
 - (2006a), « Enhancing the observability of the Efimov effect in ultracold atomic gas mixtures », in *Physical Review A* **73**, p. 030703.
 - (2006b), « Mass dependence of ultracold three-body collision rates », in *Physical Review A* **73**, p. 030702.
- Dalibard, Jean, Fabrice Gerbier, Gediminas Juzeliunas & Patrik Öhberg (2011), « Colloquium : Artificial gauge potentials for neutral atoms », in *Rev. Mod. Phys.* **83** (4), p. 1523-1543.
- Denschlag, Johannes, Gerhard Umshaus & Jörg Schmiedmayer (1998), « Probing a singular potential with cold atoms : A neutral atom and a charged wire », in *Physical Review Letters* **81**, p. 737.
- Dereziński, Jan & Serge Richard (2017), « On Schrödinger operators with inverse square potentials on the half-line », in *Annales Henri Poincaré*, t. 18, 3, Springer, , p. 869-928.
- Desfrancois, C, H Abdoul-Carime, N Khelifa & JP Schermann (1994), « From $1/r$ to $1/r^2$ Potentials : Electron Exchange between Rydberg Atoms and Polar Molecules », in *Physical Review Letters* **73**, p. 2436.
- Desfrancois, C, N Khelifa, A Lisfi & JP Schermann (1992), « State-selected Rydberg electron attachment to sulfur hexafluoride clusters at different collision energies », in *The Journal of chemical physics* **96**, p. 5009-5016.
- Dyke, P, SE Pollack & RG Hulet (2013), « Finite-range corrections near a Feshbach resonance and their role in the Efimov effect », in *Physical Review A* **88**, p. 023625.
- Efimov, V. (1970), « Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system », in *Physics Letters B* **33**, p. 563-564.
- (1971), « Weakly-bound states of three resonantly-interacting particles », in *Sov. J. Nucl. Phys* **12**, p. 101.
 - (1972), « Level spectrum of three resonantly interacting particles », in *JETP Lett* **16**, p. 50.
 - (1973), « Energy levels of three resonantly interacting particles », in *Nuclear Physics A* **210**, p. 157-188.
 - (2011), « Large Few-Body Systems. », in *Few-Body Systems* **51**.
- Eismann, Ulrich, Lev Khaykovich, Sébastien Laurent, Igor Ferrier-Barbut, Benno S. Rem et al. (2016), « Universal Loss Dynamics in a Unitary Bose Gas », in *Phys. Rev. X* **6** (2), p. 021025.
- Endo, Shimpei & Yvan Castin (2015), « Absence of a four-body Efimov effect in the $2+2$ fermionic problem », in *Physical Review A* **92** (5), p. 053624.
- (2016), « Unitary boson-boson and boson-fermion mixtures : third virial coefficient and three-body parameter on a narrow Feshbach resonance », in *The European Physical Journal D* **70**, p. 238.
- Endo, Shimpei, Antonio M García-García & Pascal Naidon (2016), « Universal clusters as building blocks of stable quantum matter », in *Physical Review A* **93**, p. 053611.
- Endo, Shimpei, Pascal Naidon & Masahito Ueda (2012), « Crossover trimers connecting continuous and discrete scaling regimes », in *Physical Review A* **86** (6), p. 062703.
- Esry, B. D., Chris H. Greene & James P. Burke (1999a), « Recombination of Three Atoms in the Ultracold Limit », in *Physical Review Letters* **83**, p. 1751-1754.
- (1999b), « Recombination of Three Atoms in the Ultracold Limit », in *Physical Review Letters* **83** (9), p. 1751-1754.
- Essin, Andrew M & David J Griffiths (2006), « Quantum mechanics of the $1/x^2$ potential », in *American Journal of Physics* **74**, p. 109-117.
- Etrych, Jiří, Gevorg Martirosyan, Alec Cao, Jake AP Glidden, Lena H Dogra, Jeremy M Hutson, Zoran Hadzibabic & Christoph Eigen (2022), « Pinpointing Feshbach Resonances and Testing Efimov Universalities in ^{39}K », in *arXiv preprint arXiv :2208.13766*.
- Fedichev, P. O., M. W. Reynolds & G. V. Shlyapnikov (1996), « Three-Body Recombination of Ultracold Atoms to a Weakly Bound s Level », in *Physical Review Letters* **77** (14), p. 2921-2924.

Ferlaino, F, S Knoop, M Berninger, W Harm, JP D'incio, H-C Nägerl & R Grimm (2009), « Evidence for universal four-body states tied to an Efimov trimer », in *Physical Review Letters* **102**, p. 140401.

Ferlaino, F, A Zenesini, M Berninger, B Huang, H-C Nägerl & R Grimm (2011), « Efimov resonances in ultracold quantum gases », in *Few-Body Systems* **51**, p. 113-133.

Ferlaino, Francesca & Rudolf Grimm (2010), « Forty years of Efimov physics : How a bizarre prediction turned into a hot topic », in *Physics* **3**, p. 9.

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 *Physical Review Letters* **129** (23), p. 233401.

Gadway, Bryce & Bo Yan (2016), « Strongly interacting ultracold polar molecules », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **49**, p. 152002.

Garrett, WR (1980), « Critical binding of electron-dipole rotor systems; electronically excited states », in *The Journal of Chemical Physics* **73**, p. 5721-5725.

Giannakeas, Panagiotis & Chris H Greene (2018), « Ultracold heteronuclear three-body systems : How diabaticity limits the universality of recombination into shallow dimers », in *Physical Review Letters* **120**, p. 023401.

– (2021), « Asymmetric lineshapes of Efimov resonances in mass-imbalanced ultracold gases », in *Atoms* **9**, p. 110.

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*.

Gogolin, Alexander O., Christophe Mora & Reinhold Egger (2008), « Analytical Solution of the Bosonic Three-Body Problem », in *Physical Review Letters* **100** (14), p. 140404.

Greene, Chris H, P Giannakeas & J Pérez-Ríos (2017), « Universal few-body physics and cluster formation », in *Reviews of Modern Physics* **89**, p. 035006.

Grisenti, R. E., W. Schöllkopf, J. P. Toennies, G. C. Hegerfeldt, T. Köhler & M. Stoll (2000), « Determination of the Bond Length and Binding Energy of the Helium Dimer by Diffraction from a Transmission Grating », in *Physical Review Letters* **85** (11), p. 2284-2287.

Gross, Noam, Zav Shotan, Servaas Kokkelmans & Lev Khaykovich (2009), « Observation of universality in ultracold Li 7 three-body recombination », in *Physical Review Letters* **103**, p. 163202.

– (2010), « Nuclear-spin-independent short-range three-body physics in ultracold atoms », in *Physical Review Letters* **105**, p. 103203.

Gupta, Kumar S & SG Rajeew (1993), « Renormalization in quantum mechanics », in *Physical Review D* **48**, p. 5940.

Gutzwiller, Martin C (1998), « Moon-Earth-Sun : The oldest three-body problem », in *Reviews of Modern Physics* **70**, p. 589.

Häfner, Stephan, Juris Ulmanis, Eva D Kuhnle, Yujun Wang, Chris H Greene & Matthias Weidemüller (2017), « Role of the intraspecies scattering length in the Efimov scenario with large mass difference », in *Physical Review A* **95**, p. 062708.

Hagen, C. R. (1972), « Scale and Conformal Transformations in Galilean-Covariant Field Theory », in *Phys. Rev. D* **5** (2), p. 377-388.

Hammer, H-W & L Platter (2007), « Universal properties of the four-body system with large scattering length », in *The European Physical Journal A* **32**, p. 113-120.

Helfrich, K, H-W Hammer & DS Petrov (2010), « Three-body problem in heteronuclear mixtures with resonant interspecies interaction », in *Physical Review A* **81**, p. 042715.

Helfrich, Kerstin & H-W Hammer (2009), « Resonant atom-dimer relaxation in ultracold atoms », in *EPL (Europhysics Letters)* **86**, p. 53003.

Hu, Ming-Guang, Ruth S Bloom, Deborah S Jin & Jonathan M Goldwin (2014), « Avalanche-mechanism loss at an atom-molecule Efimov resonance », in *Physical Review A* **90**, p. 013619.

Huang, Bo, Leonid A. Sidorenkov, Rudolf Grimm & Jeremy M. Hutson (2014), « Observation of the Second Triatomic Resonance in Efimov's Scenario », in *Physical Review Letters* **112**, p. 190401.

Jag, Michael, Matteo Zaccanti, Marko Cetina, Rianne S Lous, Florian Schreck, Rudolf Grimm, Dmitry S Petrov & Jesper Levinsen (2014), « Observation of a strong atom-dimer attraction in a mass-imbalanced Fermi-Fermi mixture », in *Physical Review Letters* **112**, p. 075302.

Johansen, Jacob, BJ DeSalvo, Krutik Patel & Cheng Chin (2017), « Testing universality of Efimov physics across broad and narrow Feshbach resonances », in *Nature Physics* **13**, p. 731-735.

- Jona-Lasinio, M., L. Pricoupenko & Y. Castin (2008), « Three fully polarized fermions close to a p -wave Feshbach resonance », in *Physical Review A* **77** (4), p. 043611.
- Kagan, Y., E. L. Surkov & G. V. Shlyapnikov (1996), « Evolution of a Bose gas under variations of the confining potential », in *Physical Review A* **54**, R1753.
- Kagan, Yu, BV Svistunov & GV Shlyapnikov (1985), « Effect of Bose condensation on inelastic processes in gases », in *JETP Lett* **42**.
- Kartavtsev, OI & AV Malykh (2007), « Low-energy three-body dynamics in binary quantum gases », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **40**, p. 1429.
- (2016), « Universal description of three two-component fermions », in *EPL (Europhysics Letters)* **115**, p. 36005.
- Kato, K., Yujun Wang, J. Kobayashi, P. S. Julienne & S. Inouye (2017), « Isotopic Shift of Atom-Dimer Efimov Resonances in K-Rb Mixtures : Critical Effect of Multichannel Feshbach Physics », in *Physical Review Letters* **118** (16), p. 163401.
- Khramov, Alexander, Anders Hansen, William Dowd, Richard J Roy, Constantinos Makrides, Alexander Petrov, Svetlana Kotochigova & Subhadeep Gupta (2014), « Ultracold heteronuclear mixture of ground and excited state atoms », in *Physical Review Letters* **112**, p. 033201.
- Knoop, S, F Ferlaino, M Mark, M Berninger, H Schöbel, H-C Nägerl & R Grimm (2009), « Observation of an Efimov-like trimer resonance in ultracold atom-dimer scattering », in *Nature Physics* **5**, p. 227-230.
- Kraats, J van de, DJM Ahmed-Braun, J-L Li & SJMF Kokkelmans (2022), « The Efimovian three-body potential from broad to narrow Feshbach resonances », in *arXiv preprint arXiv :2210.14200*.
- Kraemer, Tobias, Manfred Mark, Philipp Waldburger, Johann G Danzl, Cheng Chin, Bastian Engeser, Almar D Lange, Karl Pilch, Antti Jaakkola, H-C Nägerl et al. (2006), « Evidence for Efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms », in *Nature* **440**, p. 315-318.
- Kunitski, Maksim, Stefan Zeller, Jörg Voigtsberger, Anton Kalinin, Lothar Ph H Schmidt, Markus Schöffler, Achim Czasch, Wieland Schöllkopf, Robert E Grisenti, Till Jahnke et al. (2015), « Observation of the Efimov state of the helium trimer », in *Science* **348**, p. 551-555.
- Landau, L. D. & E. M. Lifshitz (1975), *Mécanique quantique*, Editions Mir.
- Langmack, Christian, Richard Schmidt & Wilhelm Zwerger (2018), « Efimov states near a Feshbach resonance and the limits of van der Waals universality at finite background scattering length », in *Physical Review A* **97**, p. 033623.
- Lee, Mark D, Thorsten Koehler & Paul S Julienne (2007), « Excited Thomas-Efimov levels in ultracold gases », in *Physical Review A* **76**, p. 012720.
- Levinsen, J, NR Cooper & V Gurarie (2008), « Stability of fermionic gases close to a p -wave Feshbach resonance », in *Physical Review A* **78**, p. 063616.
- Levy-Leblond, Jean-Marc (1967), « Electron capture by polar molecules », in *Physical Review* **153**, p. 1.
- Li, Ang, Yaakov Yudkin, Paul S Julienne & Lev Khaykovich (2022), « Efimov resonance position near a narrow Feshbach resonance in a Li 6- Cs 133 mixture », in *Physical Review A* **105**, p. 053304.
- Lim, TK, Sister Kathleen Duffy & William C Damer (1977), « Efimov state in the he 4 trimer », in *Physical Review Letters* **38**, p. 341.
- Lompe, Thomas, Timo B Ottenstein, Friedhelm Serwane, Andre N Wenz, Gerhard Zürn & Selim Jochim (2010), « Radio-frequency association of Efimov trimers », in *Science* **330**, p. 940-944.
- Machtey, Olga, Zav Shotan, Noam Gross & Lev Khaykovich (2012), « Association of Efimov trimers from a three-atom continuum », in *Physical Review Letters* **108**, p. 210406.
- Maier, RAW, M Eisele, E Tiemann & C Zimmermann (2015), « Efimov resonance and three-body parameter in a lithium-rubidium mixture », in *Physical Review Letters* **115**, p. 043201.
- Malomed, Boris A (2018), « Suppression of quantum-mechanical collapse in bosonic gases with intrinsic repulsion : A brief review », in *Condensed Matter* **3**, p. 15.
- Mestrom, Paul MA, Jia Wang, Chris H Greene & José P D’Incao (2017), « Efimov-van der Waals universality for ultracold atoms with positive scattering lengths », in *Physical Review A* **95**, p. 032707.
- Mikkelsen, M, AS Jensen, DV Fedorov & NT Zinner (2015), « Three-body recombination of two-component cold atomic gases into deep dimers in an optical model », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **48**, p. 085301.
- Mittleman, MH & VP Myerscough (1966), « Minimum moment required to bind a charged particle to an extended dipole », in *Physics Letters* **23**, p. 545-546.
- Moroz, Sergej (2011), « Nonrelativistic scale anomaly, and composite operators with complex scaling dimensions », in *Annals of Physics* **326**, p. 1368-1380.

Mott, Nevill Francis & Harrie Stewart Wilson Massey (1949), *The theory of atomic collisions*, Clarendon Press.

Naidon, Pascal & Shimpei Endo (2017), « Efimov physics : a review », in *Reports on Progress in Physics* **80**, 056001 (see also corrected version at arXiv :1610.09805v3).

Naidon, Pascal, Shimpei Endo & Masahito Ueda (2014), « Physical origin of the universal three-body parameter in atomic Efimov physics », in *Physical Review A* **90**, p. 022106.

– (2021), « Erratum : Physical origin of the universal three-body parameter in atomic Efimov physics [Phys. Rev. A 90, 022106 (2014)] », in *Physical Review A* **104** (5), p. 059903.

Naidon, Pascal, Ludovic Pricoupenko & Christiane Schmickler (2022), « Shallow trimers of two identical fermions and one particle in resonant regimes », in *SciPost Physics* **12**, p. 185.

Nakajima, Shuta, Munekazu Horikoshi, Takashi Mukaiyama, Pascal Naidon & Masahito Ueda (2011), « Measurement of an Efimov trimer binding energy in a three-component mixture of ^6Li », in *Physical Review Letters* **106**, p. 143201.

Niederer, U. (1972), « The maximal kinematical invariance group of the free Schrödinger equation », in *Helvetica Physica Acta* **45**, p. 802.

– (1973), « The maximal kinematical invariance group of the harmonic oscillator », in *Helvetica Physica Acta* **46**, p. 191.

Nielsen, E., D.V. Fedorov, A.S. Jensen & E. Garrido (2001), « The three-body problem with short-range interactions », in *Physics Reports* **347**, p. 373-459.

Nishida, Yusuke (2009), « Casimir interaction among heavy fermions in the BCS-BEC crossover », in *Physical Review A* **79**, p. 013629.

Ovdat, Omrie & Eric Akkermans (2021), « Breaking of continuous scale invariance to discrete scale invariance : A universal quantum phase transition », in *Fractal Geometry and Stochastics VI*, Springer, , p. 209-238.

Pack, Russell T & Gregory A Parker (1987), « Quantum reactive scattering in three dimensions using hyperspherical (APH) coordinates. Theory », in *The Journal of chemical physics* **87**, p. 3888-3921.

Paik, Steve T (2018), « Teaching renormalization, scaling, and universality with an example from quantum mechanics », in *Journal of Physics Communications* **2**, p. 015016.

Petrov, D. S. (2003), « Three-body problem in Fermi gases with short-range interparticle interaction », in *Physical Review A* **67**, p. 010703.

– (2004), « Three-Boson Problem near a Narrow Feshbach Resonance », in *Physical Review Letters* **93**, p. 143201.

– (2012), « The few-atom problem », in *Many-Body Physics With Ultracold Gases (Les Houches 2010) Lecture Notes of the Les Houches Summer School* **94**, p. 109-160.

Petrov, D. S. & F. Werner (2015), « Three-body recombination in heteronuclear mixtures at finite temperature », in *Physical Review A* **92**, p. 022704.

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.

Pires, R., J. Ulmanis, S. Häfner, M. Repp, A. Arias, E.D. Kuhnle & M. Weidemüller (2014), « Observation of Efimov Resonances in a Mixture with Extreme Mass Imbalance », in *Physical Review Letters* **112**, p. 250404.

Pitaevskii, L. P. & A. Rosch (1997), « Breathing mode and hidden symmetry of trapped atoms in two dimensions », in *Physical Review A* **55**, R853.

Pollack, Scott E, Daniel Dries & Randall G Hulet (2009), « Universality in three- and four-body bound states of ultracold atoms », in *Science* **326**, p. 1683-1685.

Pricoupenko, Ludovic (2012), « Few-body problem in ultra-cold atoms (lectures at Université Pierre et Marie Curie) ».

Rem, B. S., A. T. Grier, I. Ferrier-Barbut, U. Eismann, T. Langen et al. (2013), « Lifetime of the Bose Gas with Resonant Interactions », in *Physical Review Letters* **110** (16), p. 163202.

Roy, Sanjukta, Manuele Landini, Andreas Trenkwalder, Giulia Semeghini, Giacomo Spagnolli, Andrea Simoni, Marco Fattori, Massimo Inguscio & Giovanni Modugno (2013), « Test of the Universality of the Three-Body Efimov Parameter at Narrow Feshbach Resonances », in *Physical Review Letters* **111**, p. 053202.

Saint-Jalm, R., P. C. M. Castilho, É. Le Cerf, B. Bakali-Hassani, J.-L. Ville, S. Nascimbene, J. Beugnon & J. Dalibard (2019), « Dynamical Symmetry and Breathers in a Two-Dimensional Bose Gas », in *Phys. Rev. X* **9** (2), p. 021035.

Sakaguchi, Hidetsugu & Boris A Malomed (2011), « Suppression of the quantum-mechanical collapse by repulsive interactions in a quantum gas », in *Physical Review A* **83**, p. 013607.

Scazza, Francesco, Matteo Zaccanti, Pietro Massignan, Meera M. Parish & Jesper Levinsen (2022), « Repulsive Fermi and Bose Polarons in Quantum Gases », in *Atoms* **10**, p. 55.

- Schiff, Leonard I (1968), *Quantum Mechanics*, McGrawHill.
- Schmidt, Richard, Steffen Patrick Rath & Wilhelm Zwerger (2012), « Efimov physics beyond universality », in *The European Physical Journal B* **85**, p. 1-6.
- Schöllkopf, Wieland & J Peter Toennies (1994), « Nondestructive mass selection of small van der Waals clusters », in *Science* **266**, p. 1345-1348.
- Secker, T, DJM Ahmed-Braun, PMA Mestrom & SJJMF Kokkelmans (2021), « Multichannel effects in the Efimov regime from broad to narrow Feshbach resonances », in *Physical Review A* **103**, p. 052805.
- Skorniakov, GV & KA Ter-Martirosian (1957), « Three body problem for short range forces. I. Scattering of low energy neutrons by deuterons », in *Soviet Phys. JETP* **4**, p. 648-661.
- Söding, J., D. Guéry-Odelin, P. Desbiolles, F. Chevy, H. Inamori & J. Dalibard (1999), « Three-body decay of a rubidium Bose-Einstein condensate », in *Appl. Phys. B* **69**, p. 257.
- Stecher, Javier von, Jose P D’Incao & Chris H Greene (2009), « Signatures of universal four-body phenomena and their relation to the Efimov effect », in *Nature Physics* **5**, p. 417-421.
- Sun, Mingyuan & Xiaoling Cui (2019), « Efimov physics in the presence of a Fermi sea », in *Physical Review A* **99**, p. 060701.
- Sundaram, Sriram, CP Burgess & Duncan HJ O’Dell (2021), « Fall-to-the-centre as a symmetry breaking transition », in *Journal of Physics : Conference Series*, t. 2038, IOP Publishing, , p. 012024.
- Sutherland, Bill (1972), « Exact Results for a Quantum Many-Body Problem in One Dimension. II », in *Physical Review A* **5**, p. 1372.
- Tang, KT & JP Toennies (2003), « The van der Waals potentials between all the rare gas atoms from He to Rn », in *The Journal of chemical physics* **118**, p. 4976-4983.
- Thomas, L. H. (1935), « The Interaction Between a Neutron and a Proton and the Structure of ^3H », in *Physical Review* **47**, p. 903-909.
- Tung, Shih-Kuang, Karina Jiménez-García, Jacob Johansen, Colin V. Parker & Cheng Chin (2014), « Geometric Scaling of Efimov States in a Li 6 - Cs 133 Mixture », in *Physical Review Letters* **113**, p. 240402.
- Turner, JE & Kenneth Fox (1966), « Minimum dipole moment required to bind an electron to a finite dipole », in *Physics Letters* **23**, p. 547-549.
- Ulmanis, J, S Häfner, R Pires, ED Kuhnle, M Weidemüller & Eberhard Tiesmann (2015), « Universality of weakly bound dimers and Efimov trimers close to Li-Cs Feshbach resonances », in *New Journal of Physics* **17**, p. 055009.
- Ulmanis, J, S Häfner, R Pires, Felix Werner, DS Petrov, ED Kuhnle & M Weidemüller (2016), « Universal three-body recombination and Efimov resonances in an ultracold Li-Cs mixture », in *Physical Review A* **93**, p. 022707.
- Ulmanis, Juris, Stephan Häfner, Rico Pires, Eva D Kuhnle, Yujun Wang, Chris H Greene & Matthias Weidemüller (2016), « Heteronuclear Efimov scenario with positive intraspecies scattering length », in *Physical Review Letters* **117**, p. 153201.
- Voigtsberger, Jörg, Stefan Zeller, Jasper Becht, Nadine Neumann, Felix Sturm, H-K Kim, Markus Waitz, Florian Trinter, Maksim Kunitski, Anton Kalinin et al. (2014), « Imaging the structure of the trimer systems 4He_3 and $3\text{He}_4\text{He}_2$ », in *Nature communications* **5**, p. 1-6.
- Wacker, LJ, NB Jørgensen, D Birkmose, N Winter, M Mikkelsen, J Sherson, N Zinner & Jan J Arlt (2016), « Universal three-body physics in ultracold KRb mixtures », in *Physical Review Letters* **117**, p. 163201.
- Wallis, Richard F, Robert Herman & Harold Willis Milnes (1960), « Energy levels of an electron in the field of a finite dipole », in *Journal of Molecular Spectroscopy* **4**, p. 51-74.
- Wang, Jia, J. P. D’Incao, B. D. Esry & Chris H. Greene (2012), « Origin of the Three-Body Parameter Universality in Efimov Physics », in *Physical Review Letters* **108**, p. 263001.
- Wang, Yujun, Paul Julienne & Chris H Greene (2015), « Few-body physics of ultracold atoms and molecules with long-range interactions », in *Annual Review of Cold Atoms and Molecules* **3**, p. 77.
- Wang, Yujun & Paul S Julienne (2014), « Universal van der Waals physics for three cold atoms near Feshbach resonances », in *Nature Physics* **10**, p. 768-773.
- Wang, Yujun, Jia Wang, JP D’Incao & Chris H Greene (2012), « Universal three-body parameter in heteronuclear atomic systems », in *Physical Review Letters* **109**, p. 243201.
- Werner, Félix (2008), « Atomes froids piégés en interaction résonnante : gaz unitaire et problème à trois corps », thèse de doct. (Université Paris VI).
- Werner, Felix & Yvan Castin (2006), « Unitary gas in an isotropic harmonic trap : Symmetry properties and applications », in *Physical Review A* **74**, p. 053604.
- Westfall, Richard S. (1980), *Never at rest : a biography of Isaac Newton*, Cambridge University Press.

- Williams, JR, EL Hazlett, JH Huckans, RW Stites, Y Zhang & KM O'hara (2009), « Evidence for an excited-state Efimov trimer in a three-component Fermi gas », in *Physical Review Letters* **103**, p. 130404.
- Wu, Meng-Shan, Hui-Li Han & Ting-Yun Shi (2016), « Universalities for the Efimov-favored system with finite-range interactions », in *Physical Review A* **93**, p. 062507.
- Xie, Xin, Michael J Van de Graaff, Roman Chapurin, Matthew D Frye, Jeremy M Hutson, José P D'Incao, Paul S Julienne, Jun Ye & Eric A Cornell (2020), « Observation of Efimov Universality across a Nonuniversal Feshbach Resonance in K 39 », in *Physical Review Letters* **125**, p. 243401.
- Yamaguchi, Yoshio (1954), « Two-Nucleon Problem When the Potential Is Nonlocal but Separable. I », in *Phys. Rev.* **95** (6), p. 1628-1634.
- Yamashita, Marcelo Takeshi, FF Bellotti, T Frederico, DV Fedorov, AS Jensen & NT Zinner (2013), « Single-particle momentum distributions of Efimov states in mixed-species systems », in *Physical Review A* **87**, p. 062702.
- Yudkin, Yaakov, Roy Elbaz, P. Giannakeas, Chris H. Greene & Lev Khaykovich (2019), « Coherent Superposition of Feshbach Dimers and Efimov Trimers », in *Physical Review Letters* **122**, p. 200402.
- Yudkin, Yaakov, Roy Elbaz & Lev Khaykovich (2020), « Efimov energy level rebounding off the atom-dimer continuum », in *arXiv preprint arXiv :2004.02723*.
- Yuen, Chi Hong (2020), « Theoretical Studies of Collisions Involving Three Bodies and Electron-Molecule Collisions Relevant to Astrophysical and Atmospheric Conditions », thèse de doct. University of Central Florida.
- Zaccanti, Matteo, Benjamin Deissler, Chiara D'Errico, Marco Fattori, Mattia Jona-Lasinio, Stefan Müller, Giacomo Roati, Massimo Inguscio & Giovanni Modugno (2009), « Observation of an Efimov spectrum in an atomic system », in *Nature Physics* **5**, p. 586-591.
- Zhao, Cai-Yun, Hui-Li Han, Meng-Shan Wu & Ting-Yun Shi (2019), « Universal three-body parameter of heavy-heavy-light systems with a negative intraspecies scattering length », in *Physical Review A* **100**, p. 052702.
- Zinner, NT & NG Nygaard (2015), « Efimov States in Li–Cs Mixtures within a Minimal Model », in *Few-Body Systems* **56**, p. 125-131.