

Effet Efimov*

Jean-Marc Richard

Institut de Physique Nucléaire de Lyon
Université de Lyon, IPNL–CNRS-IN2P3–Université Claude Bernard
4, rue Enrico Fermi, 696222 Villeurbanne cedex
j-m.richard@ipnl.in2p3.fr

Version du 6 décembre 2011

Résumé

Ces notes sont une version préliminaire du cours donné en 2011-12 au M2 de l'Université de Lyon. Il traite d'effet Efimov, avec des rappels sur quelques outils et préalables : problème à deux et trois corps, propriétés spectrales du potentiel en $-1/r^2$, potentiels séparables, approximation adiabatique, systèmes borroméens, effondrement de Thomas, résonances de Feshbach, etc.

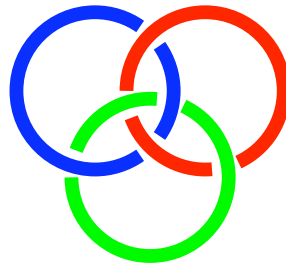


FIGURE 1 – Anneaux borroméens

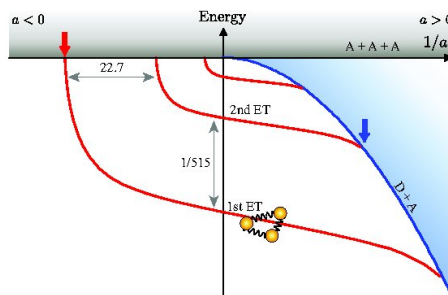


FIGURE 2 – Carte des états de Efimov, l'énergie en fonction de l'inverse de la longueur d'onde à deux corps, figure empruntée à [1].

* Cours de M2, Master de Physique, Université Claude Bernard (Lyon 1), Année 2011–12

Table des matières

1	Introduction et historique	3
2	Liaison à deux corps, longueur de diffusion	5
2.1	Exemples	5
2.2	Digression sur la force tenseur	6
2.3	Le rôle de la dimension de l'espace	7
2.4	Seuil de couplage	8
2.5	États liés et diffusion	8
2.6	États liés et résonances	13
2.7	Résonance de Feshbach	14
3	Particularités du potentiel en $-1/r^2$	15
3.1	Potentiels de courte ou de longue portée	15
3.2	Résolution de l'équation radiale	15
3.3	Résolution approchée de l'équation radiale	16
3.4	Résolution exacte de l'équation radiale	16
4	Potentiel séparable	17
4.1	Définition et propriétés	17
4.2	Résolution à une dimension	17
4.3	Résolution à trois dimensions : état lié	18
4.4	Résolution à trois dimensions : état de diffusion	19
4.5	Résolution à trois dimensions : longueur de diffusion	19
4.6	Exemple à trois dimensions : potentiel de Yamaguchi	19
5	Liaison borroméenne	20
5.1	Exemple	20
5.2	Limite rigoureuse sur la fenêtre borroméenne	21
6	Résolution du problème à trois corps	24
6.1	Coordonnées de Jacobi	24
6.2	Comportement vis-à-vis des permutations	25
6.3	Méthode variationnelle	25
6.4	Développement hypersphérique	27
6.5	Méthode de Born–Oppenheimer	28
7	Méthode de Born–Oppenheimer appliquée à l'effet Efimov	29
8	Méthode hypersphérique adiabatique appliquée à l'effet Efimov	31
9	Conclusions	31
10	Exercices	32

1 Introduction et historique

En 1970, Efimov considéra un système de trois bosons, soumis à des forces à deux corps attractives et de courte portée, dont l'intensité est à la limite entre liaison et non liaison pour les sous-systèmes à deux corps. Autrement dit, l'interaction de deux bosons a un état lié d'énergie nulle et une longueur de diffusion infinie. Efimov montra que ce système à trois corps possède une infinité d'états liés, d'énergie de plus en plus petite et de rayon de plus en plus grand.

Cette prédiction fut assez rapidement confirmée par des travaux d'autres théoriciens (Amado, Fonseca, etc.) qui proposèrent certaines généralisations à des masses inégales et étudièrent la limite de Born-Oppenheimer où deux constituants sont très massifs par rapport au troisième.

Une bonne surprise, c'est que les conditions de Efimov sont presque réalisées dans la nature. Par exemple, la force entre deux atomes d'Hélium donne une liaison de dimère très faible. La force nucléaire donne presque la liaison entre deux neutrons et une énergie de liaison assez faible entre un proton et un neutron, mais il ne semble pas que les systèmes à trois corps développent des états de Efimov.

La découverte expérimentale de l'effet Efimov par Grimm et son équipe à Innsbruck a été rendue possible par l'aptitude à modifier artificiellement la longueur de diffusion des sous-systèmes à deux corps à l'aide d'un champ magnétique. Ce mécanisme est basé sur le phénomène de résonance de Feshbach que nous présenterons, ainsi que d'autres outils.

Ce cours sera largement basé sur un article de Bhaduri et al. [2] et la présentation de Bhaduri au Colloque de Bombay en 2010. Pour plus de détails, voir les articles de revue [3, 4].

L'effet Efimov participe de la physique des systèmes « critiques » à la limite entre liaison et non liaison, intéressants à la fois pour la dynamique quantique et certaines applications. Un état excité du ^{12}C , par exemple, est une étape cruciale de la nucléosynthèse. Historiquement, l'ion H^- a sans doute été le premier « halo » étudié sérieusement. Il joue un rôle important à la surface du Soleil, comme l'a noté Chandrasekar, et dans nombre de réactions de chimie et de biochimie. Aujourd'hui, on fabrique couramment des faisceaux de H^- . Mais on a douté un temps de son existence. À la limite où $m_\alpha \rightarrow \infty$, on décrit les atomes héliumoides dans l'état fondamental avec une fonction d'onde $\psi = \exp[-Z(r_1 + r_2)]$ qui serait la solution exacte sans répulsion entre les deux électrons, et on peut obtenir une bonne approximation $\tilde{E} = -2.75$ en traitant la répulsion comme une perturbation au premier ordre. La plupart des livres de mécanique quantique introduisent une fonction d'onde variationnelle plus souple

$$\Psi_\alpha = (\alpha^3/\pi) \exp[-\alpha(r_1 + r_2)], \quad (1)$$

où $\alpha(Z) < Z$ est la charge effective vue par un électron, qui subit l'écran de l'autre. Cette fonction d'onde donne une énergie variationnelle (les calculs sont les mêmes que si $\alpha = Z$)

$$\tilde{E}(\alpha) = \alpha^2 - 2Z\alpha + 5\alpha/8, \quad (2)$$

dont le minimum est

$$\tilde{E}(\alpha_0) = -(Z - 5/16)^2, \quad \text{pour } \alpha_0 = Z - 5/16, \quad (3)$$

soit pour $Z = 2$, la valeur $\alpha_0 = 1.6875$, ce qui donne une idée de l'effet d'écran moyen, et $\tilde{E}(\alpha_0) = -2.847\dots$ sensiblement meilleure que $E = -2.75$ pour $\alpha = Z = 2$, et proche de la valeur exacte $E = -2.90372$. On vérifie facilement que cette méthode garantit la stabilité pour $Z \gtrsim 1.067$, et donc pas pour $Z = 1$. Il a été aussi démontré qu'aucune fonction de Hartree $f(r_1)f(r_2)$ ne peut lier H^- . Il faut aller au-delà de l'approximation du champ moyen, qui donne en général des résultats excellents. La leçon, c'est que la physique des très faibles liaisons requiert des outils spécifiques.

L'effet Efimov a été précédé par la découverte de l'effondrement de Thomas et de la liaison borroméenne. Tout est résumé sur la figure 5. En bleu, l'énergie du fondamental du système de deux bosons qui interagissent avec un potentiel de courte portée. Il faut $g > g_2$ pour avoir un état lié, et $E \propto -(g - g_2)^2$ près du seuil de couplage. En rouge, l'analogue pour trois bosons. La bonne surprise, c'est que $g_3 < g_2$. Nous y reviendrons. Cela signifie que pour $g_3 < g < g_2$, il n'y a pas d'état à deux corps, mais un état à trois corps qui est qualifié de « borroméen », en référence aux anneaux borroméens de la Fig. 1. Thomas avait noté [5] que $g \gtrsim g_2$, le rapport g_3/g_2 est très grand (collapse de Thomas). Il avait conclu, avant la découverte du méson de Yukawa, que sa masse devait être inférieure à environ $200 \text{ MeV}/c^2$ pour être compatible avec les



FIGURE 3 – Quelques photos. Colloque de Bombay au Tata Institute en 2010.



FIGURE 4 – Quelques photos. Colloque de Rome en 2009.

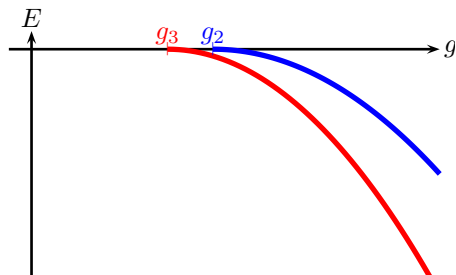


FIGURE 5 – Liaison à deux corps et liaison à trois corps. L'énergie est représentée en fonction de la constante de couplage du potentiel.

données sur les systèmes à deux et à trois nucléons. C'était en 1935. Le méson π fut découvert à Bristol en 1947 [6], avec une masse d'environ $140 \text{ MeV}/c^2$.

Les états de Efimov sont plus souvent représentés non pas comme fonction du couplage g qui est un ingrédient théorique, mais de la longueur de diffusion à deux corps, a . La figure 1 est copiée de [2], dont les auteurs avaient adapté une figure de Ferlaino et al. [4]. Elle montre les états liés à trois corps qui naissent puis disparaissent, absorbés par le continuum formé d'un état lié à deux corps et d'un atome isolé.

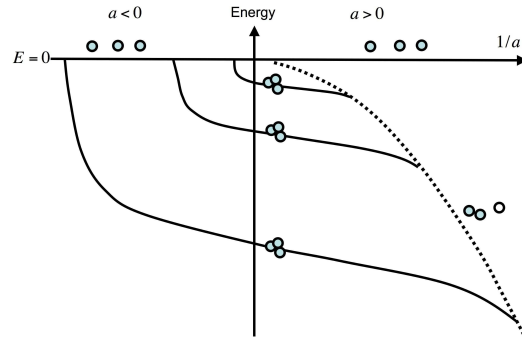


FIGURE 6 – États de Efimov en fonction de l'inverse de la longueur de diffusion à deux corps.

2 Liaison à deux corps, longueur de diffusion

2.1 Exemples

Les exemples sont nombreux d'états liés à deux corps. L'atome d'hydrogène ne peut guère être qualifié de « critique », avec son spectre infini d'excitations radiales ou orbitales. Ni même la molécule d'hydrogène, considérée comme un état lié atome–atome.

Par contre le dimère $^4\text{He}_2$ est critique, avec sa liaison de l'ordre du mK. Un premier potentiel He–He, dû à Efimov, reproduisait assez bien les données, mais ne prédisait pas d'état lié. Les potentiels modernes (Aziz, etc.) prennent bien en compte cette liaison critique, et prédisent une liaison par atome beaucoup plus grande pour les amas $^4\text{He}_n$ avec $n > 2$, que pour $n = 2$.

Le deutéron n'est pas très lié, avec seulement $E = -2.2 \text{ MeV}$, à comparer à 6 MeV par nucléon pour les gros noyaux. Si prend un bon potentiel nucléon–nucléon, on voit que le potentiel central-triplet (dans la décomposition habituelle, c'est la combinaison $V_C + V_{SS}$ des termes central et spin–spin) de l'état $^3\text{S}_1$ avec isospin $I = 0$, qui correspond aux nombres quantiques du deutéron, est *moins attractif* que le potentiel central-singlet $^1\text{S}_0$ du système proton–proton (ou neutron–neutron) dans l'onde S. Cette hiérarchie des potentiels centraux est assez bien comprise et dans les modèles à la Yukawa et dans les modèles à base de quarks. Si c'est le triplet (pn) qui est lié, et non le singlet (pp) ou (nn), c'est à cause de la force tenseur, présente en particulier dans l'échange d'un pion.

Si

$$V = V_C + V_{SS} \sigma_1 \cdot \sigma_2 + V_T [3\sigma_1 \cdot \hat{r} \sigma_2 \cdot \hat{r} - \sigma_1 \cdot \sigma_2] + \dots, \quad (4)$$

on peut montrer à la suite de Rarita et Schwinger [7, 8] que la fonction d'onde du deutéron s'écrit

$$\psi = \frac{u(r)}{r} |^3\text{S}_1\rangle + \frac{w(r)}{r} |^3\text{D}_1\rangle, \quad (5)$$

1. $V_C - 3V_{SS}$ dans cet isospin $I = 1$

et que l'équation de Schrödinger se projette en les équations couplées²

$$\begin{aligned} -\frac{u''}{m} + V_0 u - E u &= -2\sqrt{2} V_T w \\ -\frac{w''}{m} + \frac{6}{mr^2} w + V_0 w - 2 V_T w - E w &= -2\sqrt{2} V_T u, \end{aligned} \quad (6)$$

Si on compte en puissance du terme de couplage, le gain en énergie n'est qu'au deuxième ordre. C'est pourquoi il faut à peu près 6% d'état D, ce qui appréciable, pour ne lier que faiblement le deutéron.

Les conséquences sur le deutérium de cet état D sont perceptibles, avec une correction au moment magnétique et l'apparition d'un moment quadropolaire assez bien mesuré. Si vous voulez améliorer la précision sur ce moment quadropolaire, vous pouvez envisager de mettre un antideutérium en orbite atomique autour d'un noyau, et de mesurer avec haute précision la structure fine des niveaux.

2.2 Digression sur la force tenseur

En étudiant les états liés du système nucléon–antinuécléon dans le cas limite (irréaliste) où l'annihilation est négligée, on retrouve les équations (6) dans le cas limite où V_T est très grand. Il serait naïf de penser que la composante tenseur de la fonction d'onde augmente jusqu'à atteindre presque 100% de la normalisation. En fait la hiérarchie de la composante centrifuge, 0 pour l'onde S et $6/(m r^2)$ pour l'onde D, est remplacée par celle de l'opérateur tenseur, qui peut être diagonalisé, soit

$$V_T \begin{pmatrix} 0 & 2\sqrt{2} \\ 2\sqrt{2} & -2 \end{pmatrix} \rightarrow V_T \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Donc si $V_T > 0$, l'état fondamental quand V_T est grand devient dominé par une fonction d'onde

$$\frac{z(r)}{r} \left[-\sqrt{\frac{1}{3}} |^3S_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |^3D_1\rangle \right], \quad (8)$$

qui obéit à

$$-\frac{z''}{m} + \frac{4}{mr^2} z + V_0 z - 4 V_T z = E z, \quad (9)$$

avec seulement 67% d'état D.

On trouve aussi une force tenseur dans le potentiel ($c\bar{c}$) qui régit le charmonium. Pour les états avec $J^{PC} = 1^{--}$ qui peuvent être formés dans (e^+, e^-), car ils ont les nombres quantiques du photon, on pense généralement que les états $J/\Psi(3097)$, $\Psi'(3686)$, $\Psi''(4040)$, etc., sont des états à dominante $|^3S_1\rangle$, couplés à la voie d'entrée par une largeur leptonique proportionnelle au carré de leur fonction d'onde à l'origine, $|\psi(0)|^2$, et l'état $\Psi''(3770)$ un état essentiellement $|^3D_1\rangle$, qui doit son couplage à (e^+, e^-) à son petit mélange d'onde S. Dans un pur modèle de potentiel³, on retrouve des équations analogues à celles du deutérium. La force tenseur se manifeste aussi dans les états P de spin triplet et contribue à la structure fine.

On court-circuite souvent la résolution des équations en introduisant un mélange empirique entre Ψ' et Ψ'' qui ont des masses voisines, soit

$$\begin{aligned} \Psi' &= \cos \theta |^3S_1\rangle + \sin \theta |^3D_1\rangle, \\ \Psi'' &= -\sin \theta |^3S_1\rangle + \cos \theta |^3D_1\rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

d'autant que le mélange pourrait expliquer aussi quelques propriétés de désintégration (Rosner). Mais la résolution des équations, dans des modèles spécifiques, réserve une surprise : la composante minoritaire d'onde S de Ψ'' n'a pas de noeud et ressemble davantage au $u_{0,0}$ du fondamental qu'au $u_{1,0}$ de son excitation radiale. Autrement dit, si on pense à la formule qui donne la fonction d'onde au premier ordre dans

2. En réalité, il y a aussi une petite contribution spin-orbite agissant sur l'onde D

3. Les modèles plus raffinés introduisent aussi le couplage aux voies réelles ou virtuelles méson–méson, essentiellement $D\bar{D}$ qui est le seul le plus proche

la théorie des perturbations avec développement sur la base des états non perturbés, l'effet du numérateur, qui privilégie les états de même structure nodale, l'emporte sur l'effet du dénominateur qui privilégie les états voisins.

Enfin il existe aussi une force tenseur en QED. En toute rigueur, l'état fondamental de spin triplet de l'atome d'hydrogène n'est pas tout à fait isotrope. Le moment quadrupolaire du muonium⁴, (μ^+ , e^-), peut en principe être mesuré par des oscillations dans le gradient de champ d'un cristal. À l'ordre le plus bas, la composante D du muonium est donné par

$$w_1(r) = -2\sqrt{2} \sum_n w_{n,0}(r) \frac{\int_0^\infty V_T u_{0,0} w_{n,0} dr}{E_{1S} - E_{nD}}, \quad (11)$$

si on prend la méthode (trop) souvent proposée du développement sur la base des états non perturbés. Mais la sommation est fastidieuse et, surtout, doit inclure les états du continu (la somme pour eux devient une intégrale [9]).

Il est ici plus simple de partir l'équation de Sternheimer [10], appelée parfois Dalgarno et Lewis [11],

$$-\frac{w_1''}{m} - \frac{6}{mr^2} w_1 - V_0 w - E_{0,0} w_1 = 2\sqrt{2} V_T u_{0,0}, \quad (12)$$

qu'on pourrait facilement résoudre numériquement, mais qui réserve la bonne surprise d'une solution analytique compacte pour $V_0 = -1/r$ et $V_T \propto 1/r^3$.

2.3 Le rôle de la dimension de l'espace

Le problème de la liaison, c'est à dire de l'existence d'au moins un état lié, dépend de manière cruciale de la dimension d de l'espace. Pour $d = 1$ ou $d = 2$, tout potentiel attractif donne un état lié. Une condition suffisante moins contraignante (elle permet des zones de répulsion) est

$$\int d^{(d)}\mathbf{r} V(\mathbf{r}) < 0. \quad (13)$$

Voir par ex. [12, 13].

Pour se convaincre que $d = 2$ est la dimension limite, considérons une interaction "delta-shell" isotrope, soit $V(r) = -\epsilon\delta(r - R_0)$ à la distance R_0 que l'on peut prendre $R_0 = 1$ sans perte de généralité.

Quand un état lié apparaît à une certaine énergie $E_0 < 0$ (ce qui suppose un potentiel s'annulant à l'infini, et donc $E = 0$ comme séparation des états liés normalisables et des états de diffusion), les états situés au-dessus lui sont orthogonaux, ce qui signifie que leur fonction d'onde radiale possède au moins un zéro. D'où un critère assez facile à mettre en oeuvre pour savoir s'il existe ou non un état lié. On compte le nombre de zéros de l'équation radiale à énergie $E = 0$. En l'absence d'annulation, il n'y a pas d'état lié.

Avec ce potentiel, l'équation radiale s'écrit (on fait $m = 1$ ou plutôt on absorbe m dans ϵ avec avoir mis $1/m$ en facteur)

$$\psi''(r) + (d-1)\frac{\psi'(r)}{r} + \epsilon\delta(r-1) = 0, \quad (14)$$

et une solution est

$$\psi = \begin{cases} 1 & \text{pour } r < 1, \\ 1 - \epsilon(r^{2-d} - 1)/(2-d) & \text{pour } r > 1, d \neq 2, \\ 1 - \epsilon \ln r & \text{pour } r > 1, d = 2, \end{cases} \quad (15)$$

où l'on part d'une constante, modifiée vers la bas par le "kick" en $r = 1$. Si $d \leq 2$, le terme négatif ajouté possède une espérance de décroissance infinie entre $r = 1$ et $r = \infty$ et fera donc franchir l'axe à $\psi(r)$, si menu que soit ϵ . La fonction d'onde à énergie nulle ayant un zéro, on est sûr qu'il y a un état lié d'énergie négative. Par contre, si $d > 2$, il faudra une valeur minimale de ϵ pour obtenir la liaison.

Il existe toute une littérature sur des conditions suffisantes pour qu'un potentiel à trois dimensions supporte un état lié et sur des bornes sur le nombre d'états liés.

4. Il ne s'agit pas de (μ^+ , μ^-) pour lequel il faudrait tenir compte de l'annihilation, en plus des termes de Breit-Fermi habituels

2.4 Seuil de couplage

Considérons un potentiel de courte portée, $gV(r)$ où $V(r)$ est attractif ($V < 0$) ou contient des parties attractives. L'hamiltonien peut s'écrire

$$H = \frac{1}{m} [\mathbf{p}^2 + mgV(r)] . \quad (16)$$

Ses propriétés spectrales ne dépendent que du produit mg et on peut donc supposer $m = 1$. Pour $g > 0$ mais faible, la longueur de diffusion est peut-être négative, ce qui traduit un caractère attractif dominant, mais le potentiel gV n'a pas d'état lié. Soit $g_0 > 0$ la valeur minimale requise pour un état lié. On démontre [14, 15] que l'énergie correspondante se comporte comme

$$E_0(g) \propto -(g - g_0)^2 . \quad (17)$$

Avec une telle énergie évanescence quand $g \rightarrow g_0 + 0$, il est très difficile d'évaluer g_0 . Une chose est de calculer avec précision l'énergie $E_0 < 0$ d'un potentiel qui lie franchement et une autre que de calculer g_0 .

Si g continue à augmenter au-delà de g_0 , d'autres seuils apparaissent, pour créer des excitations radiales ou orbitales. L'ordre dans lequel ces couplages critiques apparaissent dépend de la forme du potentiel. Par exemple, pour un potentiel de Yukawa, l'excitation radiale ($n = 1$) est plus facile que l'excitation orbitale ($\ell = 1$) de parité négative. Voir par exemple [13].

2.5 États liés et diffusion

Pour un potentiel non confinant, il y a un continuum d'états de diffusion et parfois un spectre discret d'états liés. Il est naturel qu'une modification du spectre entraîne une modification visible du continuum. Nous allons étudier ce phénomène plus précisément pour l'onde S d'un potentiel isotrope à trois dimensions, puis indiquerons les changements un peu curieux qui se produisent à deux dimensions.

2.5.1 Longueur de diffusion

L'équation radiale de l'onde S est

$$-u''(r) + \lambda V(r)u(r) = k^2u(r) , \quad (18)$$

où V a absorbé m/\hbar^2 et $k^2 = mE/\hbar^2$. Pour $V = 0$, la solution régulière à l'origine est $u(r) \propto \sin(kr)$ et pour $V \neq 0$, $u(r) \propto \sin(kr + \delta)$ quand $r \rightarrow \infty$, ce qui définit le déphasage modulo π .

Pour un potentiel répulsif, $\delta < 0$, et pour un potentiel faiblement attractif $\delta > 0$, comme pour l'onde S de la diffusion neutron–neutron, par exemple. Mais on peut avoir $\delta > 0$ pour un potentiel assez attractif qui possède des états liés. Dans la diffusion, il est difficile de discerner une annulation de la fonction d'onde en $r = R$ due à un cœur dur de rayon R et l'annulation en R due à l'orthogonalité avec la fonction d'onde d'un état lié. Par exemple, le déphasage proton–neutron 3S_1 est négatif à basse énergie (modulo π).

À basse énergie

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \dots , \quad (19)$$

ce qui définit la longueur de diffusion a , qui est également le point d'annulation de la partie asymptotique de la fonction d'onde à énergie nulle, $u_{\text{as}}(r) \propto (r - a)$. Voir figures.

2.5.2 Longueur de diffusion et énergie de l'état lié proche

La continuité entre la forme asymptotique de la fonction d'onde à énergie positive $E = k^2$, et celle à énergie nulle est immédiate. la première est

$$u_{\text{as}} \propto \sin(kr + \delta)/k \simeq r + \frac{\delta(k)}{k} \quad (20)$$

tandis que la seconde est

$$u_{\text{as}} \propto r - a , \quad (21)$$

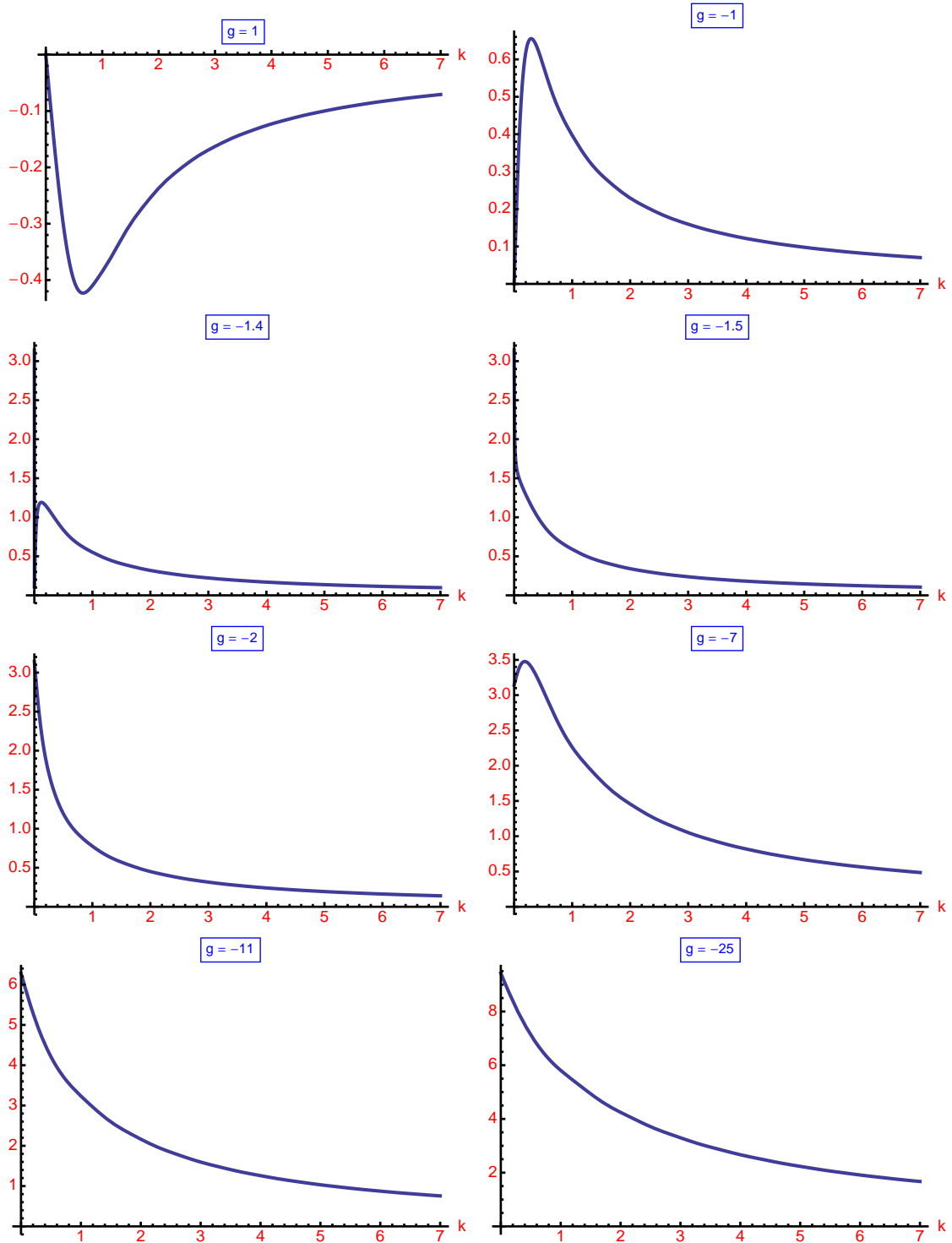


FIGURE 7 – Déphasage en fonction de k pour un potentiel $V = g \exp(-r)$ et différentes valeurs de g .

ce qui donne immédiatement

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta(k)}{k} . \quad (22)$$

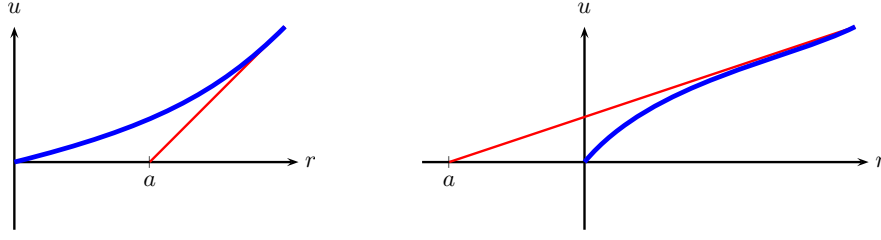


FIGURE 8 – Allure de la fonction d'onde $u(r)$ à énergie nulle pour un potentiel répulsif (gauche) et faiblement attractif (droite)

Toujours dans l'onde S, la forme asymptotique le fonction d'onde pour une énergie de diffusion $E = k^2$ peut s'écrire

$$u_{\text{as}} \propto \exp(-ikr) + S_{\ell} \exp(ikr), \quad S_{\ell} = \exp(2i\delta), \quad (23)$$

tandis que pour une énergie négative $E = -\kappa^2$, la solution régulière à l'origine a une forme asymptotiquement

$$u_{\text{as}} \propto A \exp(\kappa r) + B \exp(-\kappa r), \quad (24)$$

qui peut correspondre à un état lié si $A = 0$ pour B fini, ou bien pour A fini au cas où $B = \infty$.

Toujours l'onde S (mais les autres ondes pourraient se traiter de manière analogue), la matrice de diffusion est

$$S = \exp(2i\delta) = \frac{\cot \delta + i}{\cot \delta - i}, \quad (25)$$

et a donc un pôle pour $\cot \delta = i$, ce qui correspond d'après (19) à $k = i/a$, soit

$$E = -\kappa^2 \simeq -\frac{1}{ma^2}, \quad (26)$$

où l'on voit qu'à un état très peu lié correspond une très grande longueur de diffusion. Quand l'intensité λ du potentiel augmente, l'apparition d'un nouvel état lié correspond à une longueur d'onde négative, qui devient infinie, puis réapparaît finie, mais *positive*. Le paradoxe, alors, est qu'une expérience de diffusion à basse énergie dans ce potentiel attractif révèle un déphasage, qui, modulo π , ressemble à celui d'un potentiel répulsif.

2.5.3 Portée effective

La première correction à (19) est la *portée effective*, de Bethe, Blatt et Jackson, etc. [16, 17]. Voir par exemple le livre de Joachaim [18] pour un exposé pédagogique. Le résultat est

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 + \dots, \quad (27)$$

$$r_e = 2 \int_0^{\infty} [v_0^2 - u_0^2] dr,$$

où, du fait de la portée finie du potentiel, la fonction d'onde à énergie zero, $u_0(r)$ tend rapidement vers la fonction libre $v_0(r)$, avec la normalisation $u_0 \rightarrow v_0 = 1 - r/a$.

Si on utilise (27) et impose $\cot \delta = i$, on obtient une meilleure approximation pour l'énergie d'un état lié proche.

2.5.4 Théorème de Levinson

Quand $k^2 \rightarrow \infty$, en admettant que le formalisme non-relativiste reste valable, l'énergie potentielle devient insignifiante, et donc $\lim_{k \rightarrow \infty} \delta(k) = 0$.

Pour un potentiel répulsif, $\delta(k) \sim -ak$ pour $k \rightarrow 0$. On obtient pour $\delta(k)$ l'allure de la Fig. 7.

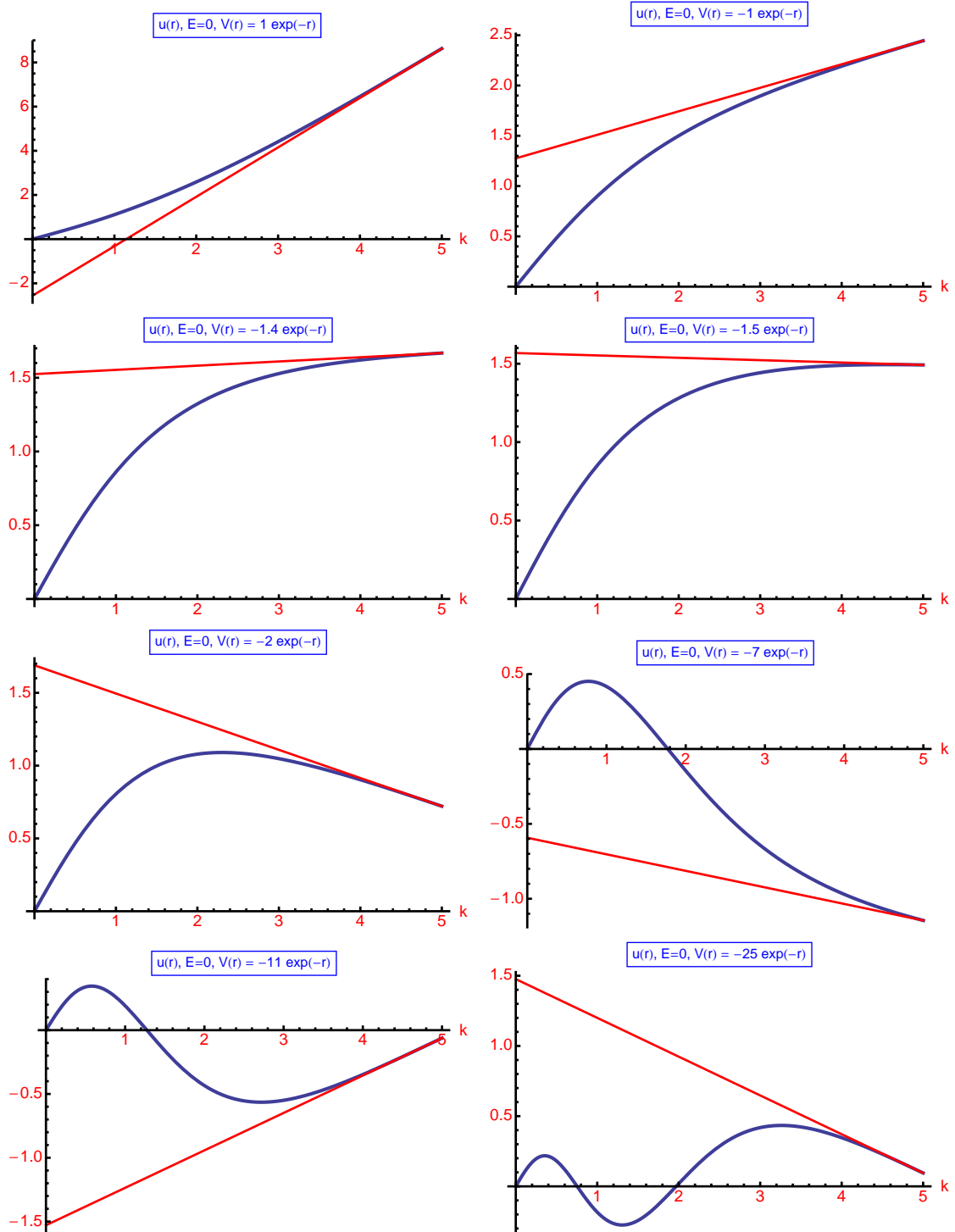


FIGURE 9 – Fonction d’onde $u(r)$ à énergie nulle pour un potentiel $V(r) = g \exp(-r)$.

Pour un potentiel faiblement attractif, on a toujours $\delta(k) \sim -ak$ mais $a < 0$ et on obtient une allure *grosso modo* symétrique de la précédente.

Si le potentiel est capable d’avoir un état lié pas très loin du seuil, la diffusion de basse énergie possède

une longueur d'onde positive, et le déphasage est négatif, modulo π . En fait on observera une décroissance régulière de π à 0 (voir Fig. 7). Pour un potentiel plus attractif, l'état lié est plus profond, et la longueur d'onde positive. Le déphasage croît d'abord, depuis π , puis revient à $\delta(k) \rightarrow 0$ quand $k \rightarrow \infty$.

Et ainsi de suite. Au total, on a le théorème de Levinson

$$\delta(0) - \delta(\infty) = n\pi, \quad (28)$$

où n est le nombre d'états liés, avec décroissance régulière si le dernier état lié est proche de $E = 0$, et croissance puis décroissance si ce dernier état lié est plus profond.

Pour une démonstration rigoureuse, voir par exemple le livre classique de Newton [19]. Le nombre entier n suggère évidemment un comptage de pôles dans une intégration de type Cauchy, c'est-à-dire l'utilisation des propriétés analytiques des opérateurs de diffusion

Pour une compréhension empirique, on peut examiner la Fig. 10 qui représente la fonction d'onde radiale $u(r)$ dans le potentiel $V = -5 \exp(-r)$ (onde S), pour différentes valeurs de l'énergie k^2 . Pour k grand, le potentiel est une petite perturbation dans l'équation radiale, et le déphasage est effectivement très petit. Pour k modéré, on a un net écart entre la solution libre $\sin(kr)$ et $u(r)$, donc un déphasage prononcé. Pour k petit, la solution $u(r)$ doit effectuer une première oscillation pour être orthogonale à l'état lié et part donc, pratiquement à l'origine, avec un déphasage de π qui se maintiendra tout au long des oscillations à l'extérieur du potentiel. On voit que n est, à basse énergie, le nombre d'oscillations rapides de la fonction radiale sous l'influence du portentil, avant d'entamer les oscillations lentes quand elle devient libre.

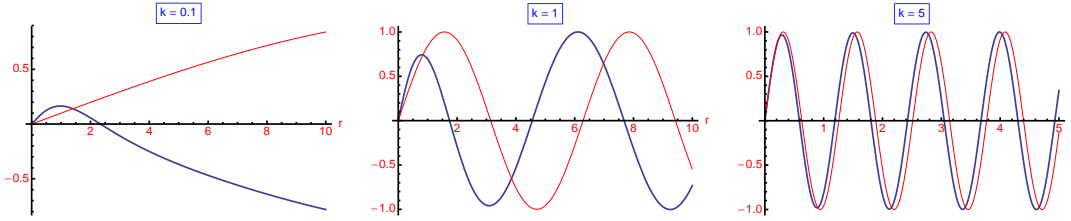


FIGURE 10 – Fonction d'onde $u(r)$ à diverses énergies pour un potentiel $V(r) = -5 \exp(-r)$, comparée à la solution libre $\sin(kr)$.

2.5.5 Diffusion de basse énergie à deux dimensions

La diffusion de basse énergie est assez originale dans le cas de dimension $d = 2$. Voir par exemple l'étude de Averbuch [20], et pour plus de références l'article récent de Khuri et al. [21].

Le déphasage de l'onde $m = 0$ (ou $\ell = 0$ si on préfère écrire la fonction angulaire $\exp(i\ell\theta)$, avec $\ell = 0, 1, \dots$) a un comportement *universel*

$$\delta(k) \simeq \frac{\pi}{2 \ln k}, \quad (29)$$

à basse énergie, indépendant de l'intensité λ du potentiel $\lambda V(r)$. Mais, bien-sûr, $\delta(k) = 0$ si $\lambda = 0$.

Tout naturellement, on trouve $\delta < 0$ pour un potentiel répulsif. Pour un potentiel attractif, disons tel que $\int d^2r V(r) < 0$, il existe un état lié même pour $\lambda \rightarrow 0+$ et le théorème de Levinson est encore valable. donc si on convient que $\delta(k) \rightarrow 0$ quand $k \rightarrow \infty$ et que $\delta(k)$ reste continu, alors il faut lire

$$\delta(k) \simeq n\pi + \frac{\pi}{2 \ln k}, \quad (30)$$

où $n \geq 1$ est le nombre d'états liés. Voir les courbes ci-dessous.

Bien-sûr, ce logarithme n'est pas satisfaisant, et on doit trouver l'échelle. Le résultat est (on oublie ici le terme $n\pi$), voir [21],

$$\delta(k) \simeq \frac{\pi/2}{\ln(ka) + \gamma}, \quad (31)$$

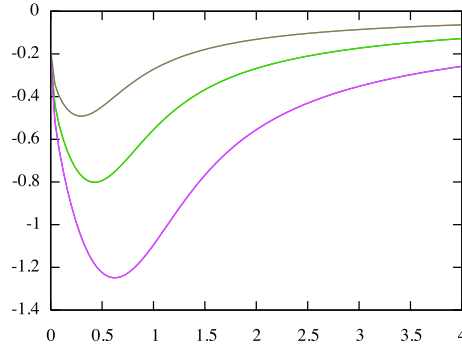


FIGURE 11 – $\delta(k)$ pour $V = g \exp(-r)$, et $g = 1/2, 1, 2$. Chaque déphasage est calculé par deux méthodes, mais on ne peut distinguer les courbes.

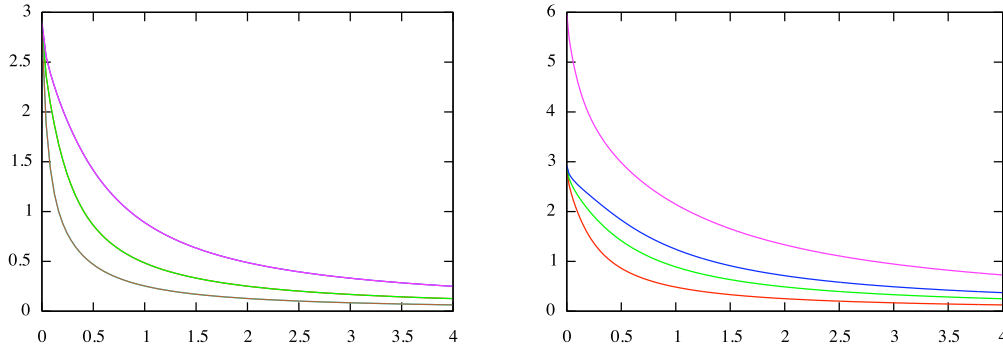


FIGURE 12 – $\delta(k)$ pour $V = -g \exp(-r)$ et $g = 1/2, 1, 2$ (gauche) et $g = 1, 2, 3$ et 6 (droite).

où γ est la constante d'Euler, et a la *longueur de diffusion*, qui comme à trois dimensions, correspond au zéro de la partie asymptotique de la fonction d'onde à énergie nulle. En effet l'équation radiale $\ell = 0$ à deux dimensions est

$$u''(r) + \frac{u(r)}{4r^2} + [k^2 - gV(r)]u(r) = 0, \quad (32)$$

et pour $k^2 = 0$ en dehors du potentiel, on a une forme asymptotique

$$u_{\text{as}}(r) = \sqrt{r} \ln(r/a), \quad (33)$$

qui s'annule en $r = a$, comme la solution asymptotique $u_{\text{as}}(r) = 1 - r/a$ à trois dimensions. Voir [21] pour les conditions de décroissance du potentiel et la généralisation de la portée effective à deux dimensions.

2.6 États liés et résonances

Au premier abord, il semblerait naturel qu'en atténuant l'attraction dans un potentiel, un état lié évolue vers une résonance de largeur très étroite, et donc de durée de vie grande. La largeur augmenterait progressivement quand l'énergie de la résonance deviendrait de plus en plus élevée.

C'est ce qui se passe effectivement si la résonance est « protégée » par une barrière externe, coulombienne dans le cas de la radioactivité α ou centrifuge pour des ondes P . Voir par exemple Fig. 13. On y observe un comportement de résonance bien marqué, avec un déphasage qui varie rapidement de π , comme on le verrait sur un circuit RLC avec une faible résistance si on faisait varier la fréquence du générateur extérieur.

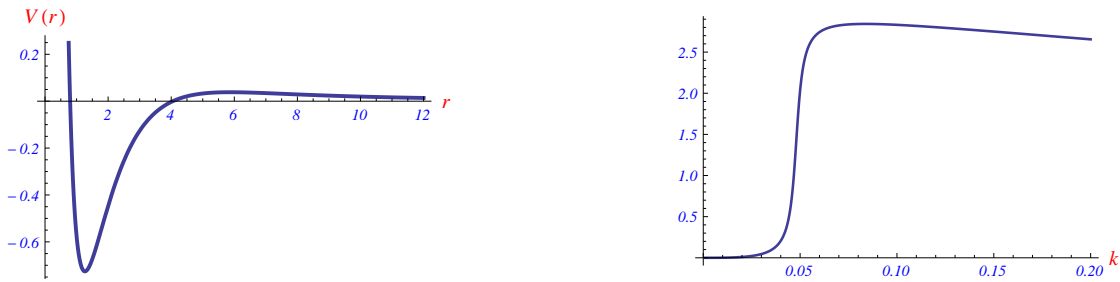


FIGURE 13 – Potentiel effectif d’onde P pour $V(r) = -7 \exp(-r)$ et déphasage correspondant comme fonction de k

On recommence maintenant pour une onde S, avec un potentiel similaire, $V(r) = -1.4 \exp(-r)$, assez peu en dessous du seuil critique de liaison. On obtient le résultat de la Fig. 14. Le déphasage varie,

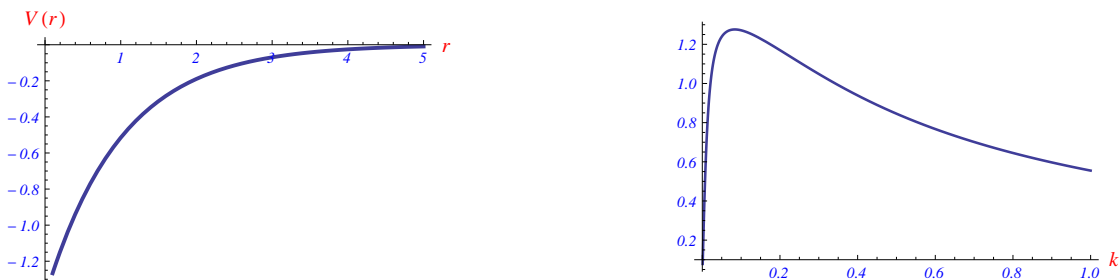


FIGURE 14 – Potentiel d’onde S pour $V(r) = -1.4 \exp(-r)$ et déphasage correspondant comme fonction de k

certes, comme fonction de l’énergie. Mais on n’a pas de variation aussi ample et rapide que pour l’onde P.

2.7 Résonance de Feshbach

Un mécanisme pour rétablir une résonance bien marquée dans l’onde S est d’imaginer un couplage avec un canal fermé qui aurait un état lié. Le seuil de cet état lié étant plus haut, son état lié peut coïncider avec l’énergie incidente dans le canal ouvert. Avec un couplage même minime, on constate que l’onde du canal incident se couple très fortement avec le canal fermé quand les énergies coïncident. Voir Fig. 15. Un autre

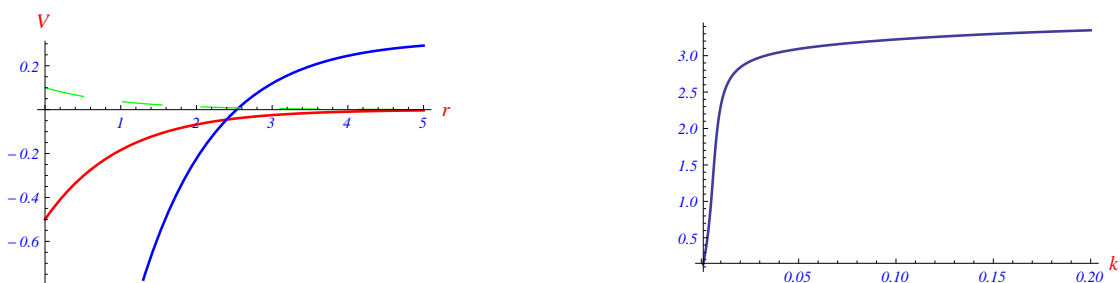


FIGURE 15 – Potentiels d’onde S pour une résonance de Feshbach (rouge : canal de diffusion, bleu canal fermé, vert pointillé : couplage) et déphasage correspondant comme fonction de k

exemple est proposé sur la Fig. 16. Le potentiel est $-V_{11} \theta(R-r)$ dans la voie de diffusion, $-V_{22} \theta(R-r) + H_{22} \theta(r-R)$ dans l’autre voie, avec un couplage $V_{12} \theta(R-r)$. Les valeurs numériques sont

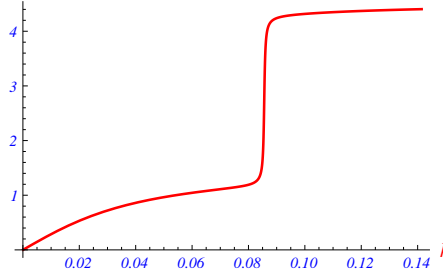


FIGURE 16 – Potentiels d'onde S pour une résonance de Feshbach avec des puits carrés

$\hbar^2/(2m) = 1$, $R = 1$, $V_{11} = 2.4$, $V_{22} = 2.68$, $H_{22} = 0.02$ et $V_{12} = 0.01$. La particularité est qu'un potentiel de profondeur totale $V_{22} + H_{22}$ possède un état très faiblement lié d'énergie $E = -0.0126552$ soit $\kappa = 0.112495$ si $E = -\kappa^2$. Le potentiel V_{11} est donc proche de la liaison, c'est pourquoi on a un déphasage assez important, mais non résonant, pour k petit. Mais le couplage avec la voie fermée donne une résonance très nette quand l'énergie incidente coïncide avec l'énergie de l'état lié.

3 Particularités du potentiel en $-1/r^2$

3.1 Potentiels de courte ou de longue portée

Commençons par quelques considérations générales. À trois dimensions, parmi les potentiels attractifs les plus usuels, il y a deux types principaux. D'abord les potentiels de courte portée, comme $V(r) = -g \exp(-r^2)$, qui est monotone, ou $V(r) = g [2 \exp(-2r) - \exp(-r)]$, qui est répulsif à courte distance et attractif à grande distance ($g > 0$). Pour ces potentiels, il faut un couplage minimal, soit $g \geq g_2$ pour obtenir un état lié, et pour $g > g_2$, il y a un nombre fini d'états liés.

Par contre si $V(r)$ décroît lentement, comme le potentiel coulombien $V(r) = -g/r$, on obtient des états liés pour n'importe quel $g > 0$, si petit soit-il, et on a même une série infinie d'états liés. Dans ce cas de ce potentiel coulombien, $E_n = -g^2/(4n^2)$, avec $n = 1, 2, \dots$

Le potentiel en A/r^2 intervient souvent avec $A > 0$. Dans le cas d'un potentiel central et de trois dimensions, l'onde partielle de moment angulaire ℓ est régie par

$$-u''(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u(r) + V(r) u(r) = E u(r). \quad (34)$$

Le terme $\ell(\ell+1)$ est modifié si on change le nombre d de dimensions. Pour $d > 3$, il reste positif. Pour $d = 2$ dans l'état S (isotrope), il vaut $-1/4$ pour l'onde la plus basse, mais on obtient encore des solutions raisonnables. Par exemple, à $E = 0$, ou bien à courte distance où E est petit devant $1/r^2$, l'équation libre

$$-u''(r) - \frac{1}{4r^2} u(r) = 0, \quad (35)$$

admet comme solutions $u(r) = \sqrt{r}$ et $u(r) = \sqrt{r} \ln r$.

Par contre si $A < -1/4$, les difficultés commencent, qui sont l'analogie quantique de la spirale classique qui converge vers $r = 0$ de plus en plus vite, que l'on appelle parfois effondrement ou effondrement.

3.2 Résolution de l'équation radiale

Considérons donc l'équation correspondant à un potentiel A/r^2 avec $A = -b^2 - 1/4$,

$$u''(r) + \left(b^2 + \frac{1}{4}\right) \frac{u(r)}{r^2} = \kappa^2 u(r), \quad (36)$$

et une énergie $E = -\kappa^2$, toujours avec $\hbar^2/(2m) = 1$.

On a une idée du spectre en examinant l'équation radiale à énergie nulle, soit

$$u''(r) + \left(b^2 + \frac{1}{4}\right) \frac{u(r)}{r^2} = 0. \quad (37)$$

Cette équation est explicitement soluble. Pour $b^2 < 0$, on a deux solutions linéairement indépendantes de type r^β , avec

$$\beta_1 = \frac{1}{2} - |b|, \quad \beta_2 = \frac{1}{2} + |b|, \quad (38)$$

avec au plus une annulation de la combinaison $c_1 r^{\beta_1} + c_2 r^{\beta_2}$. Mais si $|b|$ est trop grand, l'une des solutions doit être éliminée, car trop singulière quand $r \rightarrow 0$.

Pour $b^2 > 0$ qui nous intéresse ici, les exposants sont

$$\beta_1 = \frac{1}{2} - i b, \quad \beta_2 = \frac{1}{2} + i b, \quad (39)$$

ce qui correspond à une solution du type (R sera ici un paramètre)

$$u_0(r) = \sqrt{r} \sin(b \ln r - b \ln R). \quad (40)$$

Il y a une infinité de zéros, ce qui signifie une infinité d'états liés d'énergie négative. Pour r grand, ces zéros sont espacés, ce qui correspond à des oscillations lentes (en r) et donc à de faibles énergies. Par contre les oscillations de plus en plus rapprochées quand $r \rightarrow 0$ sont inquiétantes. Elles correspondent à une énergie cinétique positive très grande, compensée par une énergie potentielle négative encore plus grande. Bref, on a une infinité d'états liés d'énergie $E_n \rightarrow \infty$. Il faut régulariser le potentiel à courte distance.

Adoptons un modèle simple : un cœur dur, dont le rayon peut être identifié avec le paramètre R dans (40), ce qui donne bien $u_0(R) = 0$. Les autres zéros sont donnés par

$$r = R \exp(n \pi / b), \quad n \in \mathbb{N}^*. \quad (41)$$

3.3 Résolution approchée de l'équation radiale

Pour (36) avec les conditions limites $u(R) = 0$ et $u(\infty) = 0$, on peut faire l'approximation très grossière de négliger le potentiel à r grand et l'énergie à r petit, et de raccorder au point r_0 où $k^2 = (1/4 + b^2)/r_0^2$. Ce qui signifie que

$$u(r) \propto \begin{cases} \sqrt{r} \sin[b \ln(r/R)] & \text{si } r < r_0, \\ \exp(-k r) & \text{si } r > r_0, \end{cases} \quad (42)$$

Le raccordement de la fonction et de sa dérivée, compte tenu de la liberté de normalisation, se traduit par l'égalité des dérivées logarithmiques, soit

$$\cot(C - b \ln k) = C', \quad (43)$$

où C et C' sont des constantes que l'on peut évaluer explicitement. On voit que les $\ln k_n$ successifs sont séparés de π/b , ce qui signifie pour les énergies

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \exp(-2 \pi / b). \quad (44)$$

C'est en fait le résultat exact. L'approximation n'affecte que la constante dans $E_n \propto \exp(-2 n \pi / b)$.

3.4 Résolution exacte de l'équation radiale

Nous ne donnerons pas trop de détails. La solution de (37) qui décroît à l'infini est

$$u(r) = \sqrt{r} K_{i b}(\kappa r), \quad (45)$$

qui fait intervenir une fonction de Bessel de troisième espèce, appelée parfois fonction de Hankel. Voir, par exemple, [22]⁵.

Les annulations de $u(r)$ sont celles de $K_{ib}(\kappa r)$. On peut montrer que

$$\kappa r = \exp\left(\frac{-n\pi}{\sqrt{b}}\right) 2 \exp(-\gamma)[1 + \dots], \quad (46)$$

où γ est la constante d'Euler. Si r est fixé à R le rayon du cœur dur, cette équation donne κ_n et on retrouve bien le rapport des énergies successives

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \exp(-2\pi/\sqrt{b}), \quad n \in \mathbb{N}^*. \quad (47)$$

En résumé : un potentiel en $1/r^2$, avec un facteur $-(1/4 + b^2)$, $b > 0$, régularisé à l'origine, donne une série infinie d'états liés dont l'énergie décroît en progression géométrique.

4 Potentiel séparable

4.1 Définition et propriétés

On a l'habitude des potentiels *locaux* qui contribuent dans l'équation de Schrödinger comme le simple produit du potentiel et de la fonction d'onde :

$$-\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (48)$$

(on suppose, comme souvent, que $2m\hbar^2$ est intégré dans V et dans E .)

La généralisation à un potentiel non-local est

$$-\psi''(x) + \int_{-\infty}^{+\infty} v(x, x')\psi(x') dx' = E\psi(x), \quad (49)$$

et on peut vérifier que les propriétés essentielles de l'équation sont préservées : linéarité, spectre discret des états liés, continuum des états de diffusion, etc., etc.

Le cas particulier d'un potentiel local est évidemment

$$v(x, x') = \delta(x - x')V(x). \quad (50)$$

Une autre limite fréquemment employée dans les modèles est celle d'un potentiel *séparable* [23]

$$v(x, x') = -\lambda f(x)f(x'), \quad (51)$$

où f est le facteur de forme de ce potentiel. On le rencontre par exemple pour décrire le potentiel effectif dû aux processus de réarrangement dans les collisions entre molécules, ou, ce qui est équivalent, dans la description de l'annihilation d'un baryon (qqq) et d'un antibaryon ($\bar{q}\bar{q}\bar{q}$) considérée comme un réarrangement en trois mésons ($q\bar{q}$).

Ce potentiel est un opérateur $v_{\text{op}} = -\lambda|f\rangle\langle f|$, une sorte de projecteur, dont on a pris l'élément de matrice $\langle x|v_{\text{op}}|x'\rangle$ en représentation de configuration. Sans surprise, le potentiel en représentation d'impulsion est aussi séparable, et vaut $-\lambda g(p)g(p')$, où g est la transformée de Fourier de f .

4.2 Résolution à une dimension

L'équation de Schrödinger peut donc s'écrire pour $E = k^2$

$$(k^2 - p^2)\tilde{\psi}(p) = -\lambda g(p) \int_{-\infty}^{+\infty} g(p')\tilde{\psi}(p') dp', \quad (52)$$

5. ce livre est disponible sur internet, gratuitement et légalement, voir par exemple, <http://people.math.sfu.ca/cbm/aands/>

ce qui permettrait de calculer les coefficients de réflexion et de transmission pour une onde incidente venant de la gauche.

Pour un état lié avec $E = -\kappa^2$, on a

$$(\kappa^2 + p^2) \tilde{\psi}(p) = \lambda g(p) \int_{-\infty}^{+\infty} g(p') \tilde{\psi}(p') dp' , \quad (53)$$

qui montre que la fonction d'onde de l'état lié, s'il existe, est proportionnelle à $g(p)/(\kappa^2 + p^2)$. Il n'y aura qu'un seul état lié, car on ne voit pas comment deux fonctions d'onde de ce type pourrait être orthogonales. Partant de

$$\tilde{\psi}(p) = \lambda \frac{g(p)}{\kappa^2 + p^2} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p') \tilde{\psi}(p') dp' , \quad (54)$$

on déduit

$$g(p) \tilde{\psi}(p) = \lambda \frac{g^2(p)}{\kappa^2 + p^2} \int_{-\infty}^{+\infty} g(p') \tilde{\psi}(p') dp' , \quad (55)$$

et si on intègre sur \mathbb{R} , une des intégrales se retrouve à l'identique dans les deux membres, et on arrive à une condition très simple pour déterminer l'énergie $E = -\kappa^2$

$$\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g^2(p)}{\kappa^2 + p^2} dp = 1 . \quad (56)$$

On voit que $\lambda > 0$ est requis (avec notre notation), et que cette équation a au plus une seule racine (le membre de gauche est une fonction monotone de κ^2).

À une dimension, la limite $\kappa \rightarrow 0$ dans (56) donne en général une intégrale divergente, et on retrouve la propriété qu'un état lié existe même pour un couplage λ infinitésimal.

4.3 Résolution à trois dimensions : état lié

Pour deux dimensions, voir exercice.

Pour trois dimensions, le formalisme précédent peut s'appliquer si on remplace dx par dr . Pour une onde S, on a l'habitude de poser $\psi(\mathbf{r}) = u(r)/(r\sqrt{4\pi})$, on posera de même

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{v(r)}{r} , \quad (57)$$

et de même

$$g(p) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\tilde{v}(p)}{p} , \quad (58)$$

en faisant attention que ce sont les fonctions f et g qui sont transformées de Fourier lune de l'autre, et non pas v et w qui sont reliées par une transformation intégrale avec un noyau en $\sin(pr)$.

De cette manière l'équation de Schrödinger devient pour l'onde S s'écrit, dans l'espace de configuration avec $\psi(\mathbf{r}) = u(r)/(r\sqrt{4\pi})$

$$-u''(r) - \lambda v(r) \int_0^\infty v(r') u(r') dr' = E u(r) . \quad (59)$$

ou dans l'espace des impulsions avec $\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \tilde{u}(p)/(p\sqrt{4\pi})$

$$p^2 \tilde{u}(p) - \lambda \tilde{v}(p) \int_0^\infty \tilde{u}(p') \tilde{v}(p') dp' = E \tilde{u}(p) . \quad (60)$$

La relation qui détermine l'existence d'un état lié est maintenant

$$\lambda \int d^{(3)}\mathbf{p} \frac{g(p)^2}{\kappa^2 + p^2} = \lambda \int_0^{+\infty} dp \frac{\tilde{v}(p)^2}{\kappa^2 + p^2} = 1 . \quad (61)$$

On voit en particulier qu'il existe un seuil de couplage, λ_2 , déterminé par la condition

$$4 \pi \lambda_2 \int_0^{+\infty} g^2(p) dp = \lambda_2 \int_0^{+\infty} \frac{\tilde{v}(p)^2}{p^2} dp = 1 . \quad (62)$$

En se plaçant au voisinage de cette valeur, on peut créer les conditions pour des états de Efimov dans le problème à trois corps.

4.4 Résolution à trois dimensions : état de diffusion

On peut traiter le problème en représentation d'impulsion, mais il y a une petite subtilité, avec l'apparition d'une intégrale en partie principale. Le résultat est [24]

$$\tan \delta(k) = \frac{\pi \lambda w(k)^2}{1 + \lambda} , \quad I = \int_0^{+\infty} \frac{v(q)^2}{k^2 - q^2} dq , \quad (63)$$

où la barre sur l'intégrale signifie que l'on prend la limite symétrique de la somme de l'intégrale en q de 0 à $k - \epsilon$ et de celle de $k + \epsilon$ à $+\infty$ quand $\epsilon \rightarrow 0$.

Aussi, il est plus simple de raisonner dans l'espace de configuration. L'équation radiale s'écrit

$$u''(r) + k^2 u(r) = -\lambda I v(r) , \quad I = \int_0^{+\infty} v(r') u(r') dr' . \quad (64)$$

Soit u_0 une solution particulière correspondant à $v(r)$ comme terme de source. Par exemple, pour le potentiel normalisé $v(r) = \sqrt{2\beta} \exp(-\beta r)$ que nous prendrons comme exemple, $u_0 = \sqrt{2\beta} \exp(-\beta r)/(k^2 + \beta^2)$. La solution la plus générale qui satisfait $u(0) = 0$ sera

$$u(r) = A \sin(kr) - \lambda I [u_0(r) - u_0(0) \cos(kr)] , \quad (65)$$

où l'on peut identifier un comportement asymptotique $\propto \sin(kr + \delta)$ avec

$$\tan \delta = \frac{\lambda I u_0(0)}{A} , \quad (66)$$

$$I = \int_0^{+\infty} v(r) \{A \sin(kr) - \lambda I [u_0(r) - u_0(0) \cos(kr)]\} dr .$$

La seconde équation permet de calculer I proportionnel à A , qui disparaît donc de $\tan \delta$.

4.5 Résolution à trois dimensions : longueur de diffusion

Le raisonnement est très semblable, on obtient

$$a = \frac{-\lambda I u_0(0)}{A} , \quad (67)$$

$$I = \int_0^{+\infty} v(r) \{Ar - \lambda I [u_0(r) - u_0(0)]\} dr .$$

La seconde équation permet de calculer I proportionnel à A , qui disparaît donc de a .

4.6 Exemple à trois dimensions : potentiel de Yamaguchi

C'est le plus célèbre des potentiels séparables est celui de Yamaguchi [25]. Il s'écrit dans les notations précédentes :

$$\tilde{v}(p) = \frac{2\beta^{1/2} p}{\pi^{1/2}} p^2 + \beta^2 , \quad (68)$$

ou

$$v(r) = \sqrt{2\beta} \exp(-\beta r) , \quad (69)$$

La liaison est réalisé si $\lambda \geq \lambda_2 = \beta^2$. Dans ce cas, l'énergie est donnée par

$$E = -\kappa^2, \quad \kappa = \sqrt{\lambda} - \beta, \quad (70)$$

et la fonction d'onde de l'état lié est

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{\sqrt{\beta \kappa (\beta + \kappa)^3}}{\pi (p^2 + \beta^2) (p^2 + \kappa^2)}, \quad (71)$$

ou

$$\psi(r) = \frac{\sqrt{\beta \kappa (\beta + \kappa)^3}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\exp(-\kappa r) - \exp(-\beta r)}{\beta^2 - \kappa^2}, \quad (72)$$

où l'on reconnaît une décroissance très lente pour $r \rightarrow \infty$ quand $\kappa \rightarrow 0$.

Dans le domaine de la diffusion, le déphasage à énergie k^2 est donné par

$$\tan \delta = \frac{2\beta k \lambda}{\lambda(k^2 - \beta^2) + (\beta^2 + k^2)^2}. \quad (73)$$

et la longueur de diffusion par

$$a = -\frac{2\lambda}{\beta^3 - \beta\lambda}, \quad (74)$$

qui est bien infinie pour le couplage critique $\lambda = \beta^2$.

5 Liaison borroméenne

5.1 Exemple

Montrons d'abord sur un exemple pourquoi la liaison borroméenne est possible. Comme on ne sait résoudre facilement le problème à trois corps que pour l'oscillateur harmonique et que celui-ci n'est pas vraiment de courte portée, on le modifie comme sur la figure 17. À courte distance, on a essentiellement $V(r) = r^2 - 1$. Pour r grand, le potentiel est rabattu, de façon à ce que seuls les états avec $E < 0$ soient liés. Les états avec $E > 0$ décroissent plus ou moins lentement par effet tunnel à travers la barrière externe, comme dans la théorie de Gamow de la désintégration α , et ne sont pas des états liés.

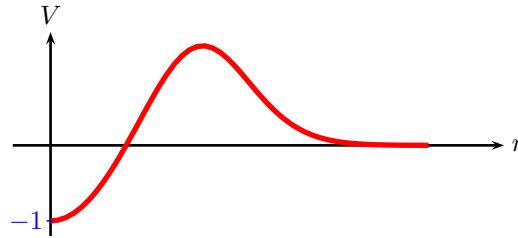


FIGURE 17 – Potentiel harmonique décalé verticalement et écranté à grande distance

On peut supposer $\hbar^2/m = 1$ sans perte de généralité. En utilisant les variables de Jacobi habituelles $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ et $\mathbf{R} \propto \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ pour le problème à deux corps, le mouvement du centre de masse se factorise et l'hamiltonien intrinsèque se réduit à courte distance à

$$h_2 \simeq \mathbf{p}^2 + g(r^2 - 1), \quad (75)$$

d'énergie $E_2 \simeq 3\sqrt{g} - g$. On a donc un état lié pour

$$g > g_2 = 9, \quad (76)$$

Pour le cas à trois corps, en anticipant un peu ce qui sera exposé dans un chapitre ultérieur, on peut utiliser les variables

$$\mathbf{x} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{y} = \frac{2\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{\sqrt{3}}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3 \quad (77)$$

pour séparer le mouvement du centre de masse de la partie intrinsèque

$$h_3 \simeq \mathbf{p}_x^2 + \mathbf{p}_y^2 + \frac{3g}{2}(x^2 + y^2) - 3g, \quad (78)$$

qui lui-même se factorise exactement en deux oscillateurs indépendants, un pour chaque variable de Jacobi, ce qui donne une énergie pour le fondamental

$$E_3 \simeq 6\sqrt{\frac{3g}{2}} - 3g, \quad (79)$$

qui correspond à un état lié si

$$g > g_3 = 6. \quad (80)$$

En fait, on peut jamais faire mieux pour g_3/g_2 . Dans cet exemple, la fenêtre de liaison borroméenne est de 1/3. Pour un potentiel simple, attractif et monotone comme $V(r) = -\exp(-r^2)$ ou un potentiel de Yukawa, elle est de 20%, avec $g_3/g_2 \simeq 0.80$. Pour un potentiel avec répulsion interne, comme dans le cas de deux atomes ou de deux noyaux, le rapport est plus proche de 1.

5.2 Limite rigoureuse sur la fenêtre borroméenne

5.2.1 Inégalités de Hall et Post

Le principe variationnel fournit une borne supérieure au fondamental ou à la somme des premiers niveaux d'un hamiltonien quantique et donne la possibilité d'estimer de façon très précise les énergies. La connaissance d'une borne inférieure serait donc bienvenue, pour fournir un encadrement rigoureux, voire même une bonne approximation.

Une méthode qui sera exploitée dans ce chapitre consiste à tronçonner l'hamiltonien. Par exemple

$$H = H_1 + H_2 + \dots \quad (81)$$

alors le fondamental de H est inférieur à la somme de ceux des H_i , parce que, sauf accident, leur minima ne sont pas obtenus pour la même fonction d'onde que pour H , soit

$$E(H) \leq E(H_1) + E(H_2) + \dots \quad (82)$$

Par exemple si $H_1 = p^2 + 2x^2$, soit $E_1 = \sqrt{2}$ et $H_2 = 2p^2 + x^2$, soit $E_2 = 1/\sqrt{2}$, on obtient $E \geq \sqrt{2} + 1/\sqrt{2} \simeq 2.12$ au lieu de $E = 3$ pour la somme $H = 3p^2 + 3x^2$.

Un exemple moins trivial est $H = 2\mathbf{p}^2 + r^2 - 1/r$ à trois dimensions. Le fondamental est $E \simeq 3.252 \dots$ par un petit calcul numérique. Le premier découpage qui vient à l'esprit est $H_1 = \mathbf{p}^2 + r^2$ et $H_2 = \mathbf{p}^2 - 1/r$, ce qui donne un assez grossier $E \geq 3 - 1/4 = 2.75$. Une amélioration peu coûteuse consiste en $H_1 = (1+x)\mathbf{p}^2 + r^2$ et $H_2 = (1-x)\mathbf{p}^2 - 1/r$, conduisant au bien meilleur

$$E(H) \geq \max_x \left[3\sqrt{1+x} - \frac{1}{4(1-x)} \right] \simeq 3.179 \dots, \quad (83)$$

Ce type d'optimisation sera utilisé un peu plus loin.

Pour les systèmes à plusieurs corps, une méthode intéressante est de séparer l'hamiltonien en termes qui contiennent moins de variables, et donc de minorer l'énergie de N corps par des énergies à $N' < N$ corps, plus faciles à évaluer. Le formalisme a été établi par Hall et Post, mais il a été souvent redécouvert indépendamment, à l'occasion de travaux sur la stabilité de la matière (Dyson, Lenard, Lévy-Leblond, ..) ou pour relier les baryons aux mésons dans le modèle des quarks (Ader et al., Nussinov, Basdevant et al.). Nous signalerons enfin un travail complémentaire, initié par Basdevant et mené à terme indépendamment par Gridnev, pour démontrer dans certaines conditions que la stabilité de N corps entraîne celle de $N + 1$. Voir aussi Amaury Mouchet [26] pour une autre approche.

5.2.2 Première borne pour 3 bosons vs. 2 bosons

Soit l'hamiltonian très simple, symétrique par permutations,

$$H_3 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{3m} + V_{12} + V_{23} + V_{31} . \quad (84)$$

La décomposition

$$H_3 = \left[\frac{\mathbf{p}_1^2}{4m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{4m} + V_{12} \right] + \left[\frac{\mathbf{p}_2^2}{4m} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{4m} + V_{23} \right] + \dots , \quad (85)$$

soit en résumé, $H_3(m) = \sum H_2(2m)$, donne une borne inférieure

$$E_3(m) \geq 3E_2(2m) , \quad (86)$$

qui relie l'énergie du fondamental à trois corps, E_3 , à celle d'un système de deux bosons de masse $2m$. Mais on peut jouer avec masse et constante de couplage, car à un facteur d'échelle près, seul leur produit compte vraiment,

$$H_2(m, g) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + gV_{12} = \frac{1}{m} \left[\frac{\mathbf{p}_1^2}{2} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2} + m g V_{12} \right] = \dots , \quad (87)$$

et donc $E_2(m, g) = E_2(1, mg)/m$, ou encore $E_2(2m, g) = E_2(m, 2g)/2$, ce qui permet de récrire la borne comme

$$E_3(m, g) \geq \frac{3}{2} E_2(m, 2g) , \quad (88)$$

avec une énergie de bosons de masse m , et de couplage $2g$ au lieu de g .

5.2.3 Première application aux mésons et baryons

Dans la version la plus simple du modèle des quarks, le potentiel $v(r)$ entre quark et antiquark dans un méson devient $v(r_{ij})/2$ pour chaque paire dans un baryon. Noter que le modèle de confinement en arbre de Steiner donne une valeur légèrement supérieure, soit

$$V(qqq) \geq [v(r_{12}) + v(r_{23}) + v(r_{31})]/2 , \quad (89)$$

ce qui donne pour les énergies l'inégalité (88) et en ajoutant les masses constituantes

$$\frac{\mathcal{M}(qqq)}{3} \geq \frac{\mathcal{M}(q\bar{q})}{2} \quad (90)$$

vérifié par exemple pour $\Omega(1672)$ et $\phi(1020)$ de contenus respectifs (sss) et $(s\bar{s})$. On peut généraliser pour inclure les corrections hyperfines ou des masses inégales.

5.2.4 Borne améliorée

La borne (86), ou sa forme équivalente (88), est un peu décevante car on n'obtient jamais une valeur proche de l'énergie E_3 , si celle-ci est calculée numériquement. En d'autres termes, la borne n'est jamais saturée.

La raison est suivante : dans (85), chaque crochet est remplacé par son minimum. Mais l'état fondamental du premier crochet correspond à la paire $\{1, 2\}$ à l'arrêt, alors que dans le système à trois corps, cette paire possède un mouvement d'ensemble pour compenser l'impulsion de particule 3. C'est l'analogie de la décomposition de König pour un système binaire en mécanique classique.

Pour palier cette difficulté, on peut travailler avec des hamiltoniens *intrinsèques*, c'est-à-dire les parties invariantes par translation

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2(m, g) &= H_2(m, g) - \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2}{4m} = \frac{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2}{4m} + gV_{12} , \\ \tilde{H}_3(m, g) &= H_3(m, g) - \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3)^2}{6m} . \end{aligned} \quad (91)$$

La décomposition est maintenant

$$\tilde{H}_3(m, g) = \sum_i \tilde{H}_2^{(i)}(3m/2, g), \quad (92)$$

donnant ce que nous appellerons une inégalité *améliorée*

$$E_3(m, g) \geq 3 E_2(3m/2, g) = \frac{3}{2} E_2(3m/4, 2g). \quad (93)$$

Quelques remarques :

- Comme l'énergie cinétique est un opérateur positif, $E_2(3m/2, g) > E_2(2m, g)$, et donc la nouvelle borne est meilleure que la précédente.
- On vérifie que cette nouvelle borne est saturée pour l'oscillateur harmonique. Si $V_{ij} = r_{ij}^2 = (r_i - r_j)^2$, en effet, $E_2(m, g) = 3\sqrt{g/m}$ pour le deux corps, tandis que pour le trois corps, les coordonnées de Jacobi habituelles

$$\rho = r_2 - r_1, \quad \lambda = \frac{2r_3 - r_1 - r_2}{\sqrt{3}}, \quad (94)$$

permettent d'écrire la partie intrinsèque comme

$$\tilde{H}_3 = \frac{p_\rho^2}{m} + \frac{3}{2}\rho^2 + \frac{p_\lambda^2}{m} + \frac{3}{2}\lambda^2, \quad (95)$$

soit $E_3 = 3\sqrt{6}\sqrt{g/m}$, c'est-à-dire (93) devient une égalité.

- En effet, si on teste cette $V(r) = \epsilon(n)r^n$ ($\epsilon(n) = n/|n|$ est la fonction signe) en variant n , l'inégalité de Hall et Post est proche de la saturation pour un potentiel confinant voisin de l'oscillateur harmonique, ou pour des états liés profondément dans un puits dont le fond est presque parabolique. Mais l'approximation est beaucoup moins bonne pour des potentiel coulombiens ($n = -1$) ou similaires.
- L'inégalité vaut aussi pour les *approximations variationnelles*, pourvu que les espaces de fonctions d'essai à 2 et 3 corps soient compatibles, c'est-à-dire que les $\psi_2(1, 2)$ soient faits des $\psi_3(1, 2, 3)$ avec r_3 considéré comme un paramètre, et que ces espaces soient globalement invariants par changement d'échelle. Cf. une remarque précédente à propos du théorème du viriel.
- En particulier, si l'énergie à deux corps est approchée par une gaussienne $\psi_2 \propto \exp(-\alpha r^2)$, où α est optimisé, et si l'énergie à 3 corps est estimée en variant β dans $\psi_3 \propto \exp(-\alpha(\rho^2 + \lambda^2))$, on obtient saturation entre les énergies variationnelles. Le potentiel est approché par un puits harmonique local, pour lequel l'inégalité devient une identité. Une leçon, c'est que les corrections à l'approximation gaussienne affectent plus le 2 corps que le 3 corps,

5.2.5 Limite rigoureuse au rapport des couplages critiques

Fleck et al. [27, 28] ont utilisé la décomposition de Hall et Post, non pas pour en déduire des inégalités entre énergies à g donné, mais des inégalités entre couplages limites g_N à énergie $E \rightarrow 0$ donnée.

Si on part de la décomposition (85), $2H_3(m, g) = \sum H_2(m, 2g)$, on voit que H_3 ne deviendra jamais négatif si $\langle H_2(m, 2g) \rangle \geq 0$, ce qui implique une première borne rigoureuse

$$\frac{g_3}{g_2} \geq \frac{1}{2}. \quad (96)$$

Mais on a vu que cette décomposition est grossière, car elle ne tient pas compte du mouvement global des sous-systèmes. On obtient une amélioration en partant de (92)

$$\begin{aligned} \tilde{H}_N(m, g) &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + g \sum_{i < j} V(r_{ij}), \\ \tilde{H}_3(m, g) &= \sum_i \tilde{H}_2^{(i)}(3m/2, g), \end{aligned} \quad (97)$$

on en peut imaginer $\langle \tilde{H}_3 \rangle < 0$ quelque part si les $\langle \tilde{H}_2 \rangle$ sont systématiquement positifs, autrement dit

$$g_3 \geq \frac{3}{2} g_2, \quad (98)$$

qu'on généralise facilement en

$$2 g_2 \leq 3 g_3 \leq 4 g_4 \dots \leq N g_N \dots \quad (99)$$

Et on peut étendre le résultat à des masses ou des couplages différents si les particules ne sont pas identiques.

La limite confrontée aux observations Le domaine de liaison borroméenne a été étudié en particulier par Goy et al. [28], et par Moszkowski et al. [29]. Pour un potentiel attractif courant, par exemple exponentiel, gaussien ou de Yukawa, bien monotone, on obtient typiquement $g_3/g_2 \simeq 0.8$, plus grand que la borne $2/3$, mais laissant une fenêtre non négligeable d'environ 20% pour une liaison borroméenne. De même $g_4/g_3 \simeq 0.8$ pour ce type de potentiels.

Pour un potentiel à cœur dur interne, la situation se dégrade progressivement, et g_3/g_2 devient plus proche de 1.

À l'inverse, pour un potentiel à barrière externe, on peut se rapprocher de la limite $g_3/g_2 = 2/3$.

La suite $\{g_n\}$ est décroissante, mais peut-on dire que $g_n \rightarrow 0$, c'est-à-dire qu'une collection n bosons devient liée si n est suffisamment grand ? Si la longueur de diffusion est négative quand $g \rightarrow 0$ (dans cette limite, elle est donnée par l'intégrale du potentiel), alors deux bosons dans un gaz dilué exerceront l'un sur l'autre une attraction, et si l'énergie peut être évacuée, on pourra avoir formation d'un état lié, soit $g_\infty = 0$. Au contraire, si l'intégrale du potentiel est positive, il faudra un couplage minimal pour lier la matière bosonique infinie.

5.2.6 Généralisations diverses

Les inégalités de Hall et Post ont été généralisées de différentes manières :

- Le cas des fermions. C'est le plus difficile. Car les contraintes d'antisymétrisation ne se factorisent pas. Il ne suffit pas que les sous-systèmes soient antisymétriques pour que le système le soit.
- Le cas de masses inégales.

6 Résolution du problème à trois corps

C'est un beau chapitre de la physique quantique, avec des méthodes très astucieuses. Nous ne traiterons ici que le cas des états liés avec des masses égales. L'hamiltonien s'écrit donc

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \dots + \frac{\mathbf{p}_3^2}{2m} + gV(r_{12}) + \dots + gV(r_{31}). \quad (100)$$

6.1 Coordonnées de Jacobi

C'est un outil utile mais pas toujours indispensable. Il sert à séparer le mouvement du centre de masse et à écrire l'hamiltonien intrinsèque, qui décrit le mouvement relatif. Par exemple si on cherche le minimum de H à l'aide d'une fonction d'onde invariante par translation, le mouvement du centre de masse sera automatiquement éliminé.

On peut choisir

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \boldsymbol{\lambda} = \frac{2\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{\sqrt{3}}, \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3}{3}. \quad (101)$$

Les coefficients sont négociables. On choisit parfois $(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)/\sqrt{2}$, $(2\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/\sqrt{6}$ et $(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3)/\sqrt{3}$ pour avoir une transformation explicitement orthogonale. Ce qui est le plus important, c'est de

définir les moments conjugués de manière à avoir des relations de commutation canonique. À (101) correspondent

$$\mathbf{p}_\rho = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{2}, \quad \mathbf{p}_\lambda = \frac{2\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2}{2\sqrt{3}}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3. \quad (102)$$

de sorte que

$$[(\mathbf{p}_\rho)_j, (\rho)_k] = i\delta_{jk}, \quad \text{etc.} \quad (103)$$

On peut facilement inverser les relations (101) et (102) (les transformations sont presque orthogonales), et obtenir

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{6m} + \left[\frac{\mathbf{p}_\rho^2}{m} + \frac{\mathbf{p}_\lambda^2}{m} + \dots \right] = H_{\text{cm}} + H_{\text{r}}, \quad (104)$$

c'est-à-dire une séparation entre le mouvement global et le mouvement relatif.

Les coordonnées (101) font jouer un rôle particulier à la particule 3. On les note parfois

$$\boldsymbol{\rho}^{(3)} = \boldsymbol{\rho}, \quad \boldsymbol{\lambda}^{(3)} = \boldsymbol{\lambda}; \quad (105)$$

et on introduit de manière analogue

$$\boldsymbol{\rho}^{(1)} = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2, \quad \boldsymbol{\lambda}^{(1)} = \frac{2\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3}{\sqrt{3}}, \quad (106)$$

et de même $\boldsymbol{\rho}^{(2)}$ et $\boldsymbol{\lambda}^{(2)}$. On passe d'un jeu de coordonnées à l'autre par une simple rotation de $2\pi/3$, soit de manière compacte

$$\boldsymbol{\lambda}^{(2)} + i\boldsymbol{\rho}^{(2)} = j(\boldsymbol{\lambda}^{(1)} + i\boldsymbol{\rho}^{(1)}). \quad (107)$$

6.2 Comportement vis-à-vis des permutations

Les coordonnées de Jacobi donnent des exemples des trois comportements possibles par permutation, qui sont

- un objet symétrique, comme 1 ou $\boldsymbol{\lambda}^2 + \boldsymbol{\rho}^2 = 2(r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2)/3$, invariant par toute permutation,
- un objet antisymétrique, comme le symbole de Levi-Civita $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ ou $\boldsymbol{\lambda} \times \boldsymbol{\rho}$, invariant par permutation circulaire et changeant de signe par transposition de deux particules,
- une paire de symétrie mixte $\{a, b\}$, comme $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\rho}$, qui se transforme $\{a, -b\}$ par échange de 1 et 2, et par permutation circulaire devient telle que $a + ib \rightarrow j(a + ib)$, soit

$$\{a, b\} \rightarrow \{-a/2 - b\sqrt{3}/3, a\sqrt{3}/2 - b/2\}. \quad (108)$$

On voit qu'en combinant deux paires de symétrie mixte, $\{a, b\}$, on peut former

- un objet symétrique $ac + bd$
- un objet antisymétrique (ou nul) $bc - ad$
- un objet de symétrie mixte $\{ac - bd, -bc - ad\}$

C'est plus compliqué que pour deux corps, et au-delà de trois particules, il faut des méthodes encore plus avancées. Mais dans la suite, nous n'aurons besoin que des représentations symétriques.

6.3 Méthode variationnelle

On utilise une fonction d'onde approchée, de la forme $\phi(\alpha, \beta, \dots, \mathbf{x}, \mathbf{y})$, et on optimise les paramètres α, β , etc., pour approcher au mieux la solution exacte.

Il faut se souvenir que l'hamiltonien est stationnaire au voisinage d'une état lié. Si $\phi = \psi + \delta\psi$, où ψ est la fonction d'onde exacte, et $\langle \psi | \delta\psi \rangle = \mathcal{O}(\delta\psi^2)$ si ϕ et ψ sont toutes deux normalisées, on montre facilement que

$$\langle \phi | H_{\text{r}} | \phi \rangle = \langle \psi | H_{\text{r}} | \psi \rangle + \mathcal{O}(\delta\psi^2). \quad (109)$$

Pour le fondamental, on sait que $\langle \phi | H_{\text{r}} | \phi \rangle$ est une approximation par excès. C'est le principe variationnel. Pour approcher le premier excité par excès, on peut utiliser le principe du *minimax*. On considère deux

fonctions d'onde d'essai indépendantes, ϕ_1 et ϕ_2 , et on diagonalise la restriction de H_r au sous-espace formé par ϕ_1 et ϕ_2 , et obtient deux valeurs propres, $e_1 < e_2$ qui dépendent des paramètres contenus dans ces fonctions d'onde d'essai. On peut démontrer (voir exercice) que $e_1 \geq E_2$, où E_2 est le premier excité de H_r . En minimisant e_2 , on approche E_2 par excès. La généralisation est immédiate pour le n^e niveau.

Le choix de ϕ est une question de flair ou de commodité. Nous avons mentionné les fonctions $\phi \propto \exp(-\alpha r_{13} - \beta r_{23})$ de Hylleraas et Chandrasekar pour des systèmes coulombiens, généralisées en $\psi \propto \exp(-\alpha_1 r_1 - \alpha_2 r_2 - \alpha_3 r_3)$ avec les variables dites « périmétriques » $r_1 = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|$, etc. Ces exponentielles sont souvent complétées par des facteurs polynomiaux dans les distances ou des fonctions angulaires pour les états de moment cinétique non nul.

Le développement sur une base de gaussienne a été perfectionné et abondamment utilisé ces dernières années. Il consiste en

$$\phi = \sum_i \alpha_i \exp[-(a_i \rho^2 + 2b_i \rho \cdot \lambda + c_i \lambda^2)/2]. \quad (110)$$

Pour un jeu donné de coefficients de portée $\{a_i, b_i, c_i\}$, les coefficients α_i et les énergies approchées $e_1(\{a_i, b_i, c_i\})$, e_2 , etc., sont donnés une équation aux valeurs et vecteurs propres. ensuite on peut faire varier les portées pour minimiser l'une des énergies. Cette méthode est utilisée en chimie quantique *ab-initio*, et en physique nucléaire. Les variantes concernent les fonctions orbitales à ajouter, et la manière d'optimiser les paramètres, entre la méthode stochastique des hongrois [30] et le choix de formes quadratiques $(a_i \rho^2 + 2b_i \rho \cdot \lambda + c_i \lambda^2)$ diagonales ($b = 0$) mais avec toutes les permutations possibles des particules pour le choix des coordonnées de Jacobi, ce que privilégie l'école japonaise [31].⁶

La méthode des gaussiennes est particulièrement adaptée au cas d'un état bien lié. Avec un seul terme, elle correspond à l'approximation d'un potentiel localement harmonique près de son minimum.

Pour des états à trois corps dont la fonction d'onde est plus diffuse, une base d'exponentielles dans les distances donne une meilleure convergence. On introduit les coordonnées dites « périmétriques » $x = r_{12}$, $y = r_{23}$ et $z = r_{31}$ et la fonction d'onde est écrite

$$\psi = \sum_i \alpha_i \exp[-(a_i x + b_i y + c_i z)/2], \quad (111)$$

qui généralise la fonction d'onde de Chandrasekar pour l'atome d'Hélium. On ajoute parfois des facteurs polynomiaux en x , y et z .

Les solutions variationnelles vérifient en général les mêmes propriétés basiques que les solutions exactes : théorème du viriel, schéma de perturbation, inégalités de Hall et Post entre systèmes et sous-systèmes, etc. La condition, habituellement satisfaite est que l'ensemble des fonctions d'onde d'essai soit invariant par changement d'échelle et englobe les fonctions d'onde utilisées pour les sous-systèmes. Donnons deux exemples.

1) L'hamiltonien coulombien $h = -d^2/dr^2 - 1/r$ a pour fondamental $\epsilon = -1/4$ correspondant à la solution exacte $u(r) = r \exp(-r/2)$. L'énergie cinétique moyenne est $+1/4$, et l'énergie potentielle moyenne $-1/2$. Ce rapport simple entre les deux formes d'énergie, qu'on retrouve aussi pour les états excités, est appelé « théorème du viriel ». Imaginons que l'on cherche une solution approchée comme le meilleur choix de $u_\alpha = r \exp(-\alpha r^2)$. C'est assez inélégant et inefficace, mais les chimistes, en superposant de tels termes, arrivent à calculer des structures très compliquées avec beaucoup de précision. Bref, cette méthode, avec un seul terme, donne une énergie assez médiocre $\tilde{\epsilon} = -2/(3\pi) \simeq -0.212\dots$, mais avec le rapport exact entre les contributions cinétique et potentielle.

2) L'hamiltonien $H = (\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2 + \mathbf{p}_3^2)/2 + r_{12} + r_{23} + r_{31}$ représente très schématiquement le confinement de trois quarks dans un baryon. Il satisfait bien-sûr l'inégalité de Hall et Post (93) pour l'énergie E_3 de son état fondamental, soit

$$E_3(1, 1) \geq 3 E_2(3/2, 1) = 3 \times 2, 33811 \times (3/2)^{-1/3} \simeq 6.128, \quad (112)$$

alors que la valeur exacte est environ $E_3 \simeq 6.13213$. Si on remplace les énergies par leur approximation variationnelle, et si ces approximations sont compatibles, alors $\tilde{E}_3(1, 1) \geq 3 \tilde{E}_2(3/2, 1)$. On constate

6. Le choix (102) correspond à $\rho = \rho^{(3)}$ et $\lambda = \lambda^{(3)}$, car la particule #3 joue un rôle particulier. On définit de même $\rho^{(1)} = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2$ et $\lambda^{(1)} = (2\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r} - 3)/\sqrt{3}$, ainsi que $\rho^{(2)}$ et $\lambda^{(2)}$. Dans la méthode de Nakamura et al., on superpose des gaussiennes de diagonales dans chaque jeu de coordonnées de Jacobi.

d'ailleurs que si on utilise une gaussienne unique $\exp(-\alpha r^2)$ pour les sous-systèmes à deux corps et $\exp[-\beta(\rho^2 + \lambda^2)]$ pour le système global, on a une saturation, soit $\tilde{E}_3(1, 1) = 3 \tilde{E}_2(3/2, 1)$.

6.4 Développement hypersphérique

6.4.1 Présentation

Pour un système à deux corps avec un confinement harmonique ou une interaction invariante par translation, on peut séparer le mouvement collectif et le mouvement relatif, soit $\Psi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$. Si le potentiel d'interaction est invariant par rotation, soit $V(r)$, il est commode de développer $\psi(\mathbf{r})$ en ondes partielles $\sum Y_\ell^m(\theta, \phi) u_\ell(r)/r$, pour aboutir à des équations radiales *découplées*

$$-u_\ell(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_\ell(r) + V(r) u_\ell(r) = E u_\ell(r). \quad (113)$$

Que ce passerait-il pour une particule dans un potentiel non central $V(r, \theta)$ ou $V(r, \theta, \phi)$? On pourrait toujours utiliser un développement en ondes partielles, mais les équations deviendraient couplées. Noter que pour $V(r, \theta)$ sans dépendance en ϕ , le nombre magnétique m resterait conservé, et par exemple, l'état fondamental ne contiendrait que les composantes $m = 0$. Si le potentiel restait pair quoique anisotrope, il y aurait une sélection sur la parité de ℓ . Quelque soit le détail du problème, on pourrait résoudre les équations

$$\begin{aligned} -u_{\ell,m}(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u_{\ell,m}(r) + \sum_{\ell',m'} V_{\ell,m,\ell',m'}(r) u_{\ell,m}(r) &= E u_{\ell,m}(r), \\ V_{\ell,m,\ell',m'}(r) &= \int Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) V(r, \theta, \phi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) d\Omega. \end{aligned} \quad (114)$$

en limitant la sommation à $\ell' \leq L$ et en étudiant la convergence comme fonction de L .

Pour le problème à trois corps invariant par translation, ou plus généralement pour tout système à deux degrés de liberté ρ et λ comme les deux électrons d'un atome héliumöide, on peut considérer la fonction d'onde comme dépendant d'un vecteur $\mathbf{r} = \{\rho, \lambda\}$ à 6 dimensions. En général, le potentiel n'est pas central. Une exception notable est l'oscillateur harmonique symétrique, car

$$V_{\text{HO}} = r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2 = \frac{3}{2} (\rho^2 + \lambda^2) = \frac{3}{2} r^2. \quad (115)$$

On peut développer en ondes partielles généralisées. Le vecteur à six dimensions peut être exprimé en coordonnées sphériques

$$\mathbf{r} = \{r, \Omega_5\}, \quad \Omega_5 = \{\omega_\rho, \omega_\lambda, \alpha\}, \quad (116)$$

où $r = (\rho^2 + \lambda^2)^{1/2}$ est l'*hyperrayon*, et les cinq variables de Ω_5 contiennent la colatitute et la longitude de $\hat{\rho}$ et $\hat{\lambda}$ et un cinquième angle associé au rapport entre ρ et λ ,

$$\rho = r \cos \alpha, \quad \lambda = r \sin \alpha, \quad 0 \leq \alpha \leq \pi/2. \quad (117)$$

L'élément d'intégration sera donc

$$d\tau = r^5 dr d\Omega_5, \quad d\Omega_5 = d\omega_\rho d\omega_\lambda \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha d\alpha, \quad \int d\Omega_5 = \pi^3. \quad (118)$$

6.4.2 Approximation hyperscalaire

Elle donne souvent une très bonne approximation, par exemple pour décrire trois quarks identiques formant un baryon. Elle consiste à utiliser une fonction d'onde isotrope $\psi(r)$. Le laplacien est alors

$$\Delta \psi(r) = \psi''(r) + 5 \frac{\psi'(r)}{r} = r^{-5/2} \frac{d^2}{dr^2} \left[r^{5/2} \psi(r) \right] - \frac{15}{4 r^2} \psi(r), \quad (119)$$

et donc, en notant $Y_0 = \pi^{-3/2}$ l'harmonique normalisée la plus basse, et $\psi(r) = Y_0 u(r)/r^{5/2}$, l'équation radiale de l'approximation hyperscalaire s'écrit

$$-u''(r) + \frac{15}{4r^2} + V_{00}(r)u(r) = Eu(r), \quad (120)$$

où $V_{00}(r)$ est la moyenne du potentiel sur tous les angles

$$V_{00}(r) = \pi^{-3} \int V(r, \Omega_5) d\Omega_5. \quad (121)$$

L'équation (120) ressemble à une équation à un corps, mais pour une onde partielle fictive qui correspondrait à un moment cinétique $\ell = 3/2$.

Si le potentiel V est une somme de trois termes à deux corps, $V = \sum_{i<j} v(r_{ij})$, chacun contribue de la même façon par raison de symétrie, et donc (si $v = 1$ on doit trouver $V_{00} = 3$ ce qui permet de vérifier les facteurs)

$$V_{00}(r) = 3 \frac{16}{\pi} \int_0^{\pi/2} v(r \cos \alpha) \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha d\alpha, \quad (122)$$

Par exemple, pour le potentiel linéaire de (112), on trouve $V_{00}(r) = 32r/(5\pi)$. Si on résout l'équation

$$-u''(r) + \frac{15}{4r^2} + \frac{32r}{5\pi}u(r) = Eu(r), \quad (123)$$

on trouve $E \simeq 6.135$, proche (mais forcément supérieur, car l'approximation est de nature variationnelle) au résultat exact 6.13213 déjà mentionné, et meilleur que la valeur 6.145 obtenue avec une seule gaussienne comme fonction d'onde variationnelle.

6.4.3 Les harmoniques hypersphériques

Elles généralisent les harmoniques sphériques pour $n = 6$ dimensions. On les classe selon leur degré L . La façon la plus naturelle de les construire est

$$\mathcal{Y} = Y_\ell^m(\omega_\rho) Y_{\ell'}^{m'}(\omega_\rho) P_n(\alpha), \quad (124)$$

ou les P_n sont des polynômes de Jacobi, orthogonaux sur $[0, +1]$ si l'intégrale contient un poids $\sin^2 \alpha \cos^2 \alpha$. Le nombre des HH augmente très rapidement avec L , car il y a de plus en plus de façon de combiner $L = \ell + \ell' + n$. Il faut trier les harmoniques, en regroupant selon le couplage physique des moments angulaires ℓ et ℓ' , à l'aide de coefficients de Clebsch-Gordan. Mais il faut aussi recombinaison linéairement les HH pour identifier celles qui ont des propriétés simples par permutations. Pour $\mathbf{J} = \ell + \ell' = 0$, le résultat a été donné par Simonov [32]. On peut sélectionner rapidement les HH symétriques avec $J = 0$ et écrire les équations couplées. Pour $J > 0$, c'est plus délicat.

6.5 Méthode de Born–Oppenheimer

Elle est très utilisée en physique atomique pour l'ion H^+ ou la molécule H_2 qui contient des constituants de masses très différentes. On peut aussi l'utiliser pour décrire les baryons à double charme (QQq).

L'idée est que pour des positions données $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$ des constituants lourds, les particules légères se trouvent dans leur niveau d'énergie minimale, et quand $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$ changent lentement, les particules légères se réajustent presque immédiatement dans leur nouveau minimum. D'où une résolution en deux étapes :

1. pour $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$ donnés, on calcule l'énergie minimale $W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$ des particules légères.
2. Cette énergie, ajoutée à l'interaction directe des particules lourdes entre elles, est interprétée comme le potentiel effectif qui régit le mouvement des particules lourdes.

De façon plus précise, la méthode de Born–Oppenheimer consiste à écrire l'hamiltonien comme

$$H = \left[\frac{\mathbf{p}_1^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2M} + \dots + V_{12} + \dots \right] + \left[\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \dots + V_{ab} + \dots + V_{1a} + \dots \right] = H_1 + h. \quad (125)$$

Pour $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$ donnés,

$$h \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_a, \dots) = W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \phi, \quad (126)$$

est la solution pour les particules légères, et on résoud

$$H_{\text{eff}} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = E \psi, \quad (127)$$

pour calculer les niveaux d'énergie, avec

$$H_{\text{eff}} = \left[\frac{\mathbf{p}_1^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2M} + \dots + V_{12} + \dots \right] + W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = H_1 + W. \quad (128)$$

Remarques :

- pour améliorer la précision, on raisonne en fait sur l'hamiltonien intrinsèque, débarrassé du mouvement du centre de masse. Donc au lieu de séparer les coordonnées en \mathbf{r}_1, \dots , pour les particules lourdes et \mathbf{r}_a, \dots pour les légères, on sépare d'une part les termes en \mathbf{x}_1, \dots , qui décrivent le mouvement relatif des seules particules lourdes, et d'autre part ceux en \mathbf{x}_a, \dots , pour le mouvement des particules légères entre elles ou par rapport aux lourdes,
- dans ces conditions, la précision est excellente,
- comme W est le fondamental de h , on peut dire que $h \geq W$, soit $H \geq H_{\text{eff}}$, ce qui signifie que l'approximation est anti-variationnelle : l'énergie est approchée par défaut,
- la fonction d'onde approchée est $\Psi = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_a, \dots)$. Bien-sûr, si on calcule $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$, on retrouve une approximation variationnelle, dite « adiabatique variationnelle », mais le calcul correspondant est un peu délicat, car il faut dériver $\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_a, \dots)$ par rapport aux variables des particules lourdes.

La méthode de Born–Oppenheimer, dans ses applications historiques aux ions ou molécules, a une interprétation physique limpide, en termes de particules rapides et de particules lentes. Mais il y a toutes sortes d'autres applications.

Par exemple, pour des équations couplées comme celles du deutéron avec mélange S–D, ou celles qui interviennent dans le développement hypersphérique, de façon générique

$$-u_i''(r) + \sum_j V_{ij}(r) u_j(r) = E u_i(r), \quad (129)$$

où les termes diagonaux incluent les contributions centrifuges éventuelles, on peut diagonaliser la matrice V_{ij} pour tout r , et si $\epsilon_1(r)$ est l'énergie la plus basse, résoudre l'équation découlée

$$-u''(r) + \epsilon_0(r) u(r) = \tilde{E} u(r), \quad (130)$$

pour obtenir une très bonne approximation, mais par défaut, de l'énergie exacte E , tandis qu'en tronquant le système d'équation, on obtient une approximation par excès.

En particulier, les différentes variantes de la méthode dite « hypersphérique adiabatique » sont très utilisées en physique atomique.

7 Méthode de Born–Oppenheimer appliquée à l'effet Efimov

L'hamiltonien du système est

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{2m} + V_1 + V_2 + V_3, \quad (131)$$

avec $V_1 = V_{23}(\mathbf{r}_{23})$, etc.

On introduit les variables de Jacobi et leurs moments conjugués

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \frac{M \mathbf{r}_1 + M \mathbf{r}_2 + m \mathbf{r}_3}{2M + m}, & \mathbf{R} &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, & \mathbf{r} &= \mathbf{r}_3 - \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \\ \mathcal{P} &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3, & \mathbf{P} &= \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{2}, & \mathbf{p} &= \frac{2m \mathbf{p}_3 - M \mathbf{p}_1 - M \mathbf{p}_2}{2M + m}. \end{aligned} \quad (132)$$

Ce qui permet d'écrire l'hamiltonien

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{cm}} + H_{\text{r}} , & H_{\text{cm}} &= \frac{\mathcal{P}^2}{2M + m} , \\ H_{\text{r}} &= \frac{\mathbf{P}^2}{M} + V_3(R) + \frac{h}{2m} , & h &= \frac{p^2}{\nu} + 2m V_1(\mathbf{r} - \mathbf{R}/2) + 2m V_2(\mathbf{r} + \mathbf{R}/2) . \end{aligned} \quad (133)$$

et on résoudra l'hamiltonien du mouvement relatif à l'approximation adiabatique

$$\tilde{H}_{\text{r}} = \frac{\mathbf{P}^2}{M} + V_3(R) + \epsilon(R) , \quad (134)$$

où $\epsilon(R)$ est l'énergie la plus basse de h . La masse réduite est

$$\nu = \frac{2M}{m + 2M} . \quad (135)$$

Sans perte de généralité, on peut adopter des unités telles que $2m = 1$.

Le potentiel V_3 n'a pas beaucoup d'importance. C'est un terme de courte portée, qui n'influence pas la systématique des états radialement excités dont la fonction d'onde s'étend très loin. Nous prendrons donc $V_3 = 0$ à titre d'exemple. Un potentiel $V_3 \neq 0$ modifierait les énergies E_n à grand n d'un facteur commun.

Pour le potentiel entre m et M , nous prenons un modèle séparable

$$V_1 = V_2 = -\lambda |g\rangle\langle g| , \quad (136)$$

avec pour g le modèle de Yamaguchi. L'équation régissant le mouvement de m est $h\psi = -\kappa^2 \psi$.

Il est commode d'introduire l'opérateur de translation $D = \exp[i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}/2]$ tel que

$$|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2\rangle = D|\mathbf{r}\rangle , \quad |\mathbf{r} - \mathbf{R}/2\rangle = D^{-1}|\mathbf{r}\rangle , \quad (137)$$

et d'écrire l'équation comme

$$(\kappa^2 + \mathbf{p}^2/\nu) = \lambda (D|g\rangle\langle g|D^{-1} + D^{-1}|g\rangle\langle g|D) . \quad (138)$$

Le raisonnement est le même que pour un potentiel séparable unique. On applique l'équation précédente à $\tilde{\psi}(p)$. Comme ψ sera symétrique, on aura

$$\langle g|D^{-1}|\psi\rangle = \langle g|D|\psi\rangle , \quad (139)$$

qui peut se mettre en facteur. La solution sera proportionnelle à $D|g\rangle + D^{-1}|g\rangle$ divisée par $(\kappa^2 + \mathbf{p}^2/\nu)$. La relation entre couplage et énergie devient

$$\begin{aligned} \lambda \nu \frac{\langle g|D^{-1} + g|D|Dg + D^{-1}\rangle}{\kappa^2 + p^2/\nu} &= 2 , \\ \lambda \nu \frac{\langle g|1 + D^2|g\rangle}{\kappa^2 + p^2/\nu} &= 1 , \end{aligned} \quad (140)$$

L'intégrale est en fait calculable, et donne

$$\lambda \nu \left(\frac{\exp(-\beta R) (-R\beta^2 - 2\beta + \kappa^2 R) + 2\beta \exp(-\kappa R)}{R(\beta^2 - \kappa^2)^2} + \frac{1}{(\beta + \kappa)^2} \right) = 1 . \quad (141)$$

On peut exploiter cette expression dans différents domaines des paramètres. Nous nous contenterons du cas où $\nu \rightarrow 1$, c'est-à-dire une troisième particule beaucoup plus légère que les deux autres, et $\lambda = \lambda_2 = \beta^2$, soit le couplage critique pour les sous-systèmes. On obtient

$$\beta^2 \left(\frac{\exp(-\beta R) (-R\beta^2 - 2\beta + \kappa^2 R) + 2\beta \exp(-\kappa R)}{R(\beta^2 - \kappa^2)^2} + \frac{1}{(\beta + \kappa)^2} \right) = 1 . \quad (142)$$

On peut analyser cette équation par étapes. Pour $R = \infty$, elle est satisfaite pour $\kappa = 0$. Pour R fini mais très grand, on peut négliger les termes en $\exp(-\beta R)$, et on s'aperçoit qu'on obtient une approximation cohérente si

$$\kappa = \frac{A}{R} + \dots, \quad (143)$$

avec

$$A \exp(A) = 1, \quad \text{soit } A \simeq 0.567143. \quad (144)$$

Le mouvement des deux atomes lourds est donc régi par un potentiel effectif $V_{\text{eff}}(R)$ dont le comportement à grand R est (on normalise l'équation pour que l'énergie cinétique soit P^2)

$$V_{\text{eff}} \sim -M \frac{A^2}{R^2} + \dots \quad (145)$$

(M est en unités où $2m = 1$) ce qui donne une série infinie d'états excités, avec, pour n grand,

$$\frac{E_n}{E_{n+1}} = \exp \left[\frac{2\pi}{\sqrt{M A^2 - 1/4}} \right]. \quad (146)$$

Par exemple pour $M = 10$, qui correspond à $M/m = 20$, on obtient $E_n/E_{n+1} \sim 38$.

8 Méthode hypersphérique adiabatique appliquée à l'effet Efimov

Faute de temps, il ne sera pas possible de développer. Disons simplement que le potentiel à deux corps est remplacé par un terme de contact qui réduit la (grande) longueur de diffusion de la diffusion à deux corps. Un traitement astucieux des équations hypersphériques donne un potentiel effectif $V(R)$, où R est l'hyperrayon, qui a juste le bon comportement en R^{-2} quand $R \rightarrow \infty$, avec le bon coefficient, pour donner la série des états de Efimov.

9 Conclusions

La découverte des états de Efimov a suscité une nouvelle vague de travaux. En particulier, beaucoup de progrès ont été accomplis récemment sur les systèmes à quatre corps et plus.

Au début des travaux sur l'effet Efimov, on a cherché des états à 4 corps au point d'apparition d'un état lié à trois corps. Le résultat est négatif. Mais on a trouvé plus tard des états à quatre corps proches des états de Efimov à trois corps, lorsque l'interaction a une longueur de diffusion à deux corps très grande. Plus précisément, il y a une paire d'états à quatre corps. Si a devient positif, ces états disparaissent au profit de deux dimères. Voir la Fig. 18, empruntée à la revue déjà citée de Ferlaino et Grimm.

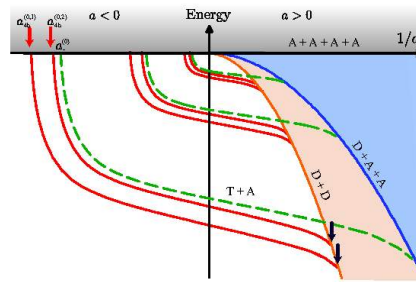


FIGURE 18 – États de Efimov à quatre corps.

10 Exercices

Réduction du couplage ou réduction de la portée On considère le potentiel $-g \exp(-\mu r)/r$. Montrer que l'énergie du fondamental (quand il existe), *a priori* fonction de \hbar , m (la masse des constituants), g et μ , ne dépend que d'un paramètre G et d'une échelle d'énergie ϵ , autrement dit que l'hamiltonien peut s'écrire

$$H = \epsilon \left[-\Delta_x - G \frac{\exp(-x)}{x} \right], \quad (147)$$

où G et x sont sans dimension. Donner l'expressions de G , ϵ et x en fonction des variables et paramètres r , \hbar , m , g et μ de l'hamiltonien initial.

Montrer qu'augmenter μ revient à réduire g sur le diagramme de la figure 5 et donc à se rapprocher du seuil de couplage.

Absence de dégénérescence Pourquoi en mécanique quantique à une dimension, ou dans une onde partielle donnée à, par exemple, trois dimensions, ne peut-on avoir deux états avec la même énergie ?

Onde S à d dimensions Écrire l'équation de Schrödinger radiale à d dimensions. Passer à l'équation réduite, sans dérivée première. L'interpréter comme une onde partielle à 3 dimensions avec un moment angulaire effectif ℓ dont on donnera l'expression en fonction de d .

Séparation du centre de masse Soit

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (148)$$

Chercher la meilleure fonction d'onde $\Psi \propto \exp(-\alpha r_{12})$ en variant α . Est-il nécessaire de séparer au préalable le mouvement du centre de masse ?

Lois d'échelle Quelles seraient les lois d'échelle pour le spectre et les fonctions d'onde d'un système binaire de masse réduite $m/2$ dans un potentiel $\pm g r_{12}^n$? Retrouver les résultats connus pour $n = -1$ et $n = 2$. Que pourrait-on dire pour un potentiel $g/[1 + \exp[(r - R)/a]]$?

Fonction de phase Montrer qu'au lieu de résoudre l'équation linéaire du second ordre (18) et d'identifier asymptotiquement $u(r) \propto \sin(kr + \delta)$, on peut introduire une *fonction de phase* $d(r)$, avec $d(\infty) = \delta$, et $d(0) = 0$, qui vérifie l'équation non linéaire du premier ordre

$$d'(r) = -\lambda V(r) \sin^2[kr + d(r)]/k, \quad (149)$$

Noter que le déphasage $\delta(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} d(r)$ a le bon comportement vis-à-vis du théorème de Levinson, avec $\delta(\infty) = 0$ et $\delta(0) = n\pi$.

Définir une fonction $\alpha(r)$ qui tend vers la longueur de diffusion a quand $r \rightarrow \infty$ et donner l'équation satisfaite par $\alpha(r)$.

Résonance de Feshbach Écrire l'ensemble des équations et des manipulations à effectuer pour obtenir le graphe de la Fig. 16.

Potentiel séparable à deux dimensions Dans le cas de deux dimensions d'espace, écrire la condition donnant l'énergie pour un potentiel séparable. Montrer qu'un état lié existe même pour un couplage infini-tésimal.

Somme de deux potentiels séparables Discuter du spectre et des fonctions d'onde pour $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\lambda f_1(r) f_1'(r') - \mu f_2(r) f_2'(r')$.

Références

- [1] F. Ferlaino, A. Zenesini, M. Berninger, B. Huang, H. Nägerl, and R. Grimm. Efimov resonances in ultracold quantum gases. *Few-Body Systems*, 51 :113–133, 2011. 10.1007/s00601-011-0260-7.
- [2] R. K. Bhaduri, A. Chatterjee, and B. P. van Zyl. An elementary exposition of the Efimov effect. *American Journal of Physics*, 79 :274–281, March 2011.
- [3] E. Braaten and H.-W. Hammer. Universality in few-body systems with large scattering length. *Phys. Rep.*, 428 :259–390, June 2006.
- [4] F. Ferlaino and R. Grimm. Forty years of Efimov physics : How a bizarre prediction turned into a hot topic. *Physcs Online Journal*, 3 :9–+, January 2010.
- [5] L. H. Thomas. The interaction between a neutron and a proton and the structure of h^3 . *Phys. Rev.*, 47(12) :903–909, Jun 1935.
- [6] C. M. G. Lattes, G. P. S. Occhialini, and C. F. Powell. Observations on the Tracks of Slow Mesons in Photographic Emulsions. *Nature*, 160 :453–456, October 1947.
- [7] William Rarita and Julian Schwinger. On the neutron-proton interaction. *Phys. Rev.*, 59(5) :436–452, Mar 1941.
- [8] Sergio De Benedetti. *Nuclear interactions*. Wiley, New York, NY, 1964.
- [9] Lev Davidovich Landau and Evgenii Mikhailovich Lifshitz. *Mécanique quantique : théorie non relativiste*. Phys. Théor. MIR, Moscow, 1967.
- [10] R. M. Sternheimer. Effect of the Atomic Core on the Nuclear Quadrupole Coupling. *Physical Review*, 95 :736–750, August 1954.
- [11] A. Dalgarno and J. T. Lewis. The Exact Calculation of Long-Range Forces between Atoms by Perturbation Theory. *Royal Society of London Proceedings Series A*, 233 :70–74, December 1955.
- [12] K. Yang and M. de Llano. Simple variational proof that any two-dimensional potential well supports at least one bound state. *American Journal of Physics*, 57(1) :85–86, 1989.
- [13] Harald Grosse and André Jean Martin. *Particle Physics and the Schrödinger Equation ; new ed.* Cambridge monographs on particle physics, nuclear physics, and cosmology. Cambridge Univ., Cambridge, 2005.
- [14] M. Klaus and B. Simon. Coupling constant thresholds in nonrelativistic quantum mechanics. I. Short-range two-body case. *Annals of Physics*, 130 :251–281, December 1980.
- [15] M. Klaus and B. Simon. Coupling constant thresholds in nonrelativistic quantum mechanics : II. Two cluster thresholds in N -body systems. *Communications in Mathematical Physics*, 78 :153–168, December 1980.
- [16] John M. Blatt and J. David Jackson. On the interpretation of neutron-proton scattering data by the schwinger variational method. *Phys. Rev.*, 76(1) :18–37, Jul 1949.
- [17] John M Blatt and Victor Frederick Weisskopf. *Theoretical nuclear physics*. Springer, New York, NY, 1979.
- [18] Charles Jean Joachain. *Quantum collision theory*. North-Holland, Amsterdam, 1975.
- [19] R.G. Newton. *Scattering theory of waves and particles*. Dover books on physics. Dover Publications, 2002.
- [20] P G Averbuch. Zero energy divergence of scattering cross sections in two dimensions. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 19(12) :2325–2335, 1986.
- [21] N. N. Khuri, Andre Martin, J.-M. Richard, and Tai Tsun Wu. Low-energy potential scattering in two and three dimensions. *Journal of Mathematical Physics*, 50(7) :072105, 2009.
- [22] Irene A Stegun and Milton Abramowitz. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. Dover books on intermediate advanced mathematics. US. Nat. Bureau Stand., New York, NY, 1964.

- [23] William H. Nichols. Separable nonlocal potentials in quantum mechanics. *American Journal of Physics*, 33(6) :474–480, 1965.
- [24] W. van Dijk. Model analysis of the relationship between 3S_1 scattering length and the root-mean-square radius of the deuteron. *Phys. Rev. C*, 40 :1437–1447, Sep 1989.
- [25] Y. Yamaguchi. Two-Nucleon Problem When the Potential Is Nonlocal but Separable. I. *Physical Review*, 95 :1628–1634, September 1954.
- [26] Amaury Mouchet. Bounding the ground-state energy of a many-body system with the differential method. *Nucl. Phys.*, A765 :319–341, 2006.
- [27] Jean-Marc Richard and Sonia Fleck. Limits on the domain of coupling constants for binding n -body systems with no bound subsystems. *Phys. Rev. Lett.*, 73(11) :1464–1467, Sep 1994.
- [28] Jerome Goy, Jean Marc Richard, and Sonia Fleck. Weakly bound three-body systems with no bound subsystems. *Phys. Rev.*, A52 :3511–3520, 1995.
- [29] Steven Moszkowski et al. Borromean Binding of Three or Four Bosons. *Phys. Rev.*, A62 :032504, 2000.
- [30] Y. Suzuki and K. Varga, *Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems*, Lecture Notes in Physics (Springer-Verlag, Berlin, in press).
- [31] E. Hiyama, Y. Kino, and M. Kamimura. Gaussian expansion method for few-body systems. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 51 :223–307, 2003.
- [32] Yu. A. Simonov. The Three body problem. a complete system of angular functions. *Sov. J. Nucl. Phys.*, 3 :461–466, 1966.