

# Stabilité et instabilité des systèmes quantiques à petit nombre de corps, applications en physique atomique, nucléaire et hadronique\*

Jean-Marc Richard

Laboratoire de Physique Subatomique et Cosmologie  
 Université Joseph Fourier–CNRS-IN2P3–INPG  
 53, avenue des Martyrs, 38026 Grenoble, France<sup>†</sup>

(Dated: Version du 19 octobre 2011)

Ces notes sont une version préliminaire du cours donné en 2008-09 à l'École Doctorale de Grenoble. Il traite de la stabilité critique de systèmes quantiques dans différents domaines : ions et molécules très peu liées, halos de neutrons, systèmes borroméens, etc.

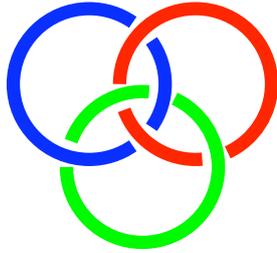


FIGURE 1. Anneaux borroméens

## CONTENTS

I. Introduction et historique	2	1. Absence de dégénérescence	11
II. Rappels de mécanique quantique	3	2. Onde S à $d$ dimensions	11
A. Principe variationnel	3	3. Séparation du centre de masse	11
1. État fondamental	3	4. Lois d'échelle	11
2. États excités	3	5. Fonction de phase	11
B. Brisures de symétrie	3	IV. L'ion hydrogène négatif	12
C. Lois d'échelle	3	A. $H^-$ et les autres	12
D. Coordonnées de Jacobi	4	B. Le fondamental de l'Hélium	12
III. Stabilité critique de deux corps	5	1. Théorie des perturbations	12
A. Exemples	5	2. Méthode variationnelle	12
B. Digression sur la force tenseur	5	C. De l'Hélium à l'ion Hydrogène négatif	13
C. Le rôle de la dimension de l'espace	6	D. Généralisations et derniers commentaires	13
D. Seuil de couplage	7	E. Les états de parité non naturelle	14
E. États liés et diffusion	7	F. Exercices	14
1. Longueur de diffusion	7	1. Atomes heliumoïdes	14
2. Longueur de diffusion et énergie de l'état lié proche	8	2. Brisure de symétrie	14
3. Portée effective	8	3. Éléments de matrice	14
4. Théorème de Levinson	8	V. Systèmes de trois charges	14
5. Diffusion de basse énergie à deux dimensions	9	A. Panorama	14
F. Réarrangement des niveaux	10	B. Allure du domaine de stabilité	15
G. Exercices	11	C. Exemple d'application	16
		D. Généralisation à des charges quelconques	16
		1. Cas de $(+q_1, -1, -1)$	16
		2. Cas où $q_2 \neq q_3$	17
		E. Exercices	17
		1. Stabilité sur l'axe	17
		2. Étoilement	18
		3. Convexité	18
		4. Largeur minimale de la bande	18
		5. État de parité non naturelle	18
		VI. Systèmes de quatre charges	18
		A. Motivation	18
		B. La méthode de Born–Oppenheimer	18
		C. La molécule de positronium	19
		D. L'hydride positronium	19
		E. Molécules à deux électrons identiques	20
		F. Hydrogène–antihydrogène	20
		G. Le domaine de stabilité	20
		H. Exercices	21
		1. Théorème du viriel	21
		2. Inégalité de BMN	21
		3. Hydrogène lourd	21
		4. Marge de stabilité	21

\*Cours à l'École Doctorale de Grenoble, 2008-09

<sup>†</sup>jean-marc.richard@lpsc.in2p3.fr

5. Écrantage de Debye et stabilité	21
6. Règle de Schwinger	21
VII. Inégalités de Hall et Post	21
A. Recherche de bornes inférieures	21
B. Cas simple : 3 bosons vs. 2 bosons	22
1. Borne naïve	22
2. Première applications aux mésons et baryons	22
3. Borne améliorée	22
C. Quarks et antiquarks top liés par le boson de Higgs	23
D. Borne optimisée	24
E. Exercices	24
1. Somme des énergies	24
2. Borne inférieure	24
3. Précautions	24
4. Inégalités de Hall–Post pour un potentiel linéaire	24
VIII. Liaisons borroméennes	24
A. Définition	24
B. Limite rigoureuse au rapport de couplages	25
C. La limite confrontée aux observations	25
D. Le cas des fermions	25
E. Liaisons borroméennes avec un potentiel coulombien	25
F. Problème inverse de la liaison borroméenne	26
IX. Stabilité critique en physique nucléaire	26
A. Considérations générales	26
B. Forces nucléaires et criticalité	26
1. L'isospin	27
2. Le spin	27
3. Le danger des compensations	27
4. Le cœur plus ou moins dur	27
5. Forces nucléaires et théories effectives	27
6. Forces à trois et quatre corps	27
C. Quelques noyaux légers	28
1. Le deutérium	28
2. $^3\text{H}$ et $^3\text{He}$	28
3. $^4\text{He}$	28
4. $^5\text{He}$	28
5. $^6\text{He}$	28
6. $^7\text{H}$	28
7. $^7\text{He}$	28
8. $^8\text{He}$	28
X. Stabilité critique des hadrons	29
A. Confinement, stabilité et règle de Zweig	29
B. Existe-t-il des multiquarks stables ?	30
C. Spéculations sur une liaison chromomagnétique des multiquarks	30
D. Liaison chromoélectrique	30
Références	32

## I. INTRODUCTION ET HISTORIQUE

Dans ce cours, nous passerons en revue quelques problèmes liés aux systèmes quantiques à petit nombre de corps, en insistant sur les cas où le système est à la limite entre stabilité et instabilité.

Les exemples seront empruntés à différents domaines : physique atomique, physique nucléaire et aussi physique des quarks, illustrant le caractère interdisciplinaire.

Un exemple important pour l'histoire et les méthodes est l'ion hydrogène négatif  $\text{H}^- = (p, e^-, e^-)$ . Son existence a d'abord suscité des doutes, mais on en fait aujourd'hui des faisceaux ! Nous consacrerons un chapitre à l'ion  $\text{H}^-$ , puis deux autres à la systématique des configurations à petit nombre de charges, en fonction de la masse des constituants.

La physique moléculaire décrit des interactions assez faibles, car du fait de leur neutralité, les atomes n'ont entre eux que des forces résiduelles. Dans le cas d'atomes d'Hélium, la liaison binaire est tellement faible qu'on a longtemps cru qu'elle n'existait pas. Mais quand on passe de deux à trois atomes ou plus, la liaison par atome augmente considérablement. Nous verrons pour les atomes de l'isotope  $^3\text{He}$  un phénomène encore plus spectaculaire de liaison "borroméenne", avec un état lié d'une trentaine d'atomes, avec des sous-systèmes non liés.

Un chapitre sera consacré à ces liaisons borroméennes, qui ne résultent pas de forces collectives qui n'apparaîtraient que pour un grand nombre de constituants. Des modèles de mécanique quantique avec seulement des forces à deux corps donnent lieu à des liaisons borroméennes.

La physique nucléaire contribue notablement à ce domaine, et nous parlerons des noyaux à halo de neutrons. Mais le deutérium, déjà, est lié un peu miraculeusement par la force tenseur, car le potentiel central ne peut à lui seul unir le proton et le neutron. Il suffirait d'ailleurs d'une décroissance minimale de la constante de couplage du pion aux nucléons pour que le deutérium disparaisse.

Avant de commencer, nous ferons quelques rappels de mécanique quantique, réduits au minimum utile pour suivre les chapitres suivants.

Quelques repères :

- Preuve de la stabilité de l'ion  $\text{H}^-$  par Bethe, Hylleraas, Chandrasekar, ... (1929 ...)
- Wheeler propose la stabilité des ions  $\text{Ps}^-$  et de la molécule  $\text{Ps}_2$  (1945)
- Ore réfute la stabilité de  $\text{Ps}_2$  (1946),
- Hylleraas et Ore démontrent la stabilité de  $\text{Ps}_2$  (1947),
- La stabilité de la molécule d'hydrogène,  $\text{H}_2$ , est une conséquence de celle de  $\text{Ps}_2$  (1993),
- Thomas, en cherchant une limite à la masse du méson de Yukawa, compare les énergies à deux corps et trois corps. Écroulement de Thomas (1935),
- Découverte de l'isotope  $^6\text{He}$  (???) ,
- Effet Efimov (1970)
- Zhukov et al. proposent le terme "borroméen" pour qualifier certains noyaux à deux neutrons en halo (1993, Physics Reports)
- Nature borroméenne cachée des systèmes coulombiens

(Bressanini, 2001),

- Liaisons borroméennes avec des forces de longue portée, en jouant sur les masses des constituants (2003),

Comme préliminaire, une bonne lecture est celle du livre de Pauling [1]. On est surpris combien la mécanique quantique y est déjà mature et riche en applications, si peu de temps après sa fondation.

## II. RAPPELS DE MÉCANIQUE QUANTIQUE

Nous énonçons quelques rappels sans introduction.

### A. Principe variationnel

#### 1. État fondamental

Soit  $E_0$  l'état fondamental d'un Hamiltonien  $H$ , et  $\psi_0$  la fonction d'onde correspondante. On peut dire que  $E_0$  est le minimum de  $H$ , dans le sens que

$$E_0 \leq \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (2.1)$$

pour tout état *normalisé*  $\psi$ .

L'idée des méthodes variationnelles est de chercher des états  $\psi$  s'approchant de mieux en mieux de  $\psi_0$ . Il est intéressant de noter que si  $\psi = \psi_0 + \epsilon\chi$ , avec  $\chi \perp \psi_0$ , si bien que la normalisation est bonne à l'ordre deux près,  $E - E_0 = \epsilon^2 \langle \chi | H | \chi \rangle$ , si bien que l'énergie est bonne, elle-aussi, à l'ordre 2 près.

On peut vérifier que (2.1) implique que dans la théorie ordinaire des perturbations, l'approximation à l'ordre 1 de l'énergie est une borne supérieure pour le fondamental.

#### 2. États excités

Si  $H$  possède des symétries (parité, rotation, ...), alors il existe un "fondamental" pour chaque secteur, et le principe variationnel ci-dessus s'applique, par exemple pour le premier état de parité négative, ou le premier état de moment angulaire,  $\ell = 2$ , etc.

La difficulté vient pour les états ayant les mêmes nombres quantiques que le fondamental, par exemple, les excitations radiales de moment angulaire donné dans un potentiel central. Le principe variationnel se généralise en le principe du *minimax*. On parle aussi de la méthode de Hylleraas et Undheim [2]. Énonçons-le pour le premier excité. Soit  $p = \{\psi, \psi'\}$  une paire d'états linéairement indépendants et orthogonaux.

$$E_1 = \min_p [\max\{\langle \psi | H | \psi \rangle, \langle \psi' | H | \psi' \rangle\}]. \quad (2.2)$$

En particulier, pour un choix initial, on gagne en cherchant la meilleure recombinaison de ces états. Si  $\psi$  et  $\psi'$  ne sont pas orthogonaux, on diagonalise la restriction de  $H$  à l'espace formé par  $\psi$  et  $\psi'$  et la plus grande des deux valeurs propres de cette restriction est une borne supérieure à  $E_1$ .

### B. Brisures de symétrie

Un résultat très général est qu'un terme brisant la symétrie d'un hamiltonien symétrique  $H_0$  abaisse l'énergie de l'état fondamental.

Un exemple bien connu est l'oscillateur harmonique à une dimension, modifié par un terme linéaire, soit

$$H = p^2 + x^2 + \lambda x = H_0 + \lambda H_1, \quad (2.3)$$

dont l'énergie du fondamental, dans des unités où  $\hbar = m = \omega = 1$  est  $E(\lambda) = 1 - \lambda^2/4$ , plus basse que si  $\lambda = 0$ . Le résultat est plus général :

$$H = H_0 + \lambda H_1, \implies E(\lambda) \leq \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle, \quad (2.4)$$

si  $\psi(0)$ , état fondamental de  $H_0$  est pris comme fonction d'onde d'essai à la place de la vraie solution  $\psi(\lambda)$ . En effet, si par exemple  $H_0$  est pair et  $H_1$  impair, alors

$$\langle \psi(0) | H_1 | \psi(0) \rangle = 0. \quad (2.5)$$

mais le résultat s'applique à d'autres symétries, comme les permutations.

Nous verrons que les conséquences ne sont pas évidentes pour un système à petit nombre de corps. Avec une brisure de symétrie, l'énergie baisse, mais il arrive souvent que l'énergie des sous-systèmes constituant le seuil de dissociation le plus bas décroisse davantage et donc que la stabilité se détériore.

### C. Lois d'échelle

Nous avons déjà utilisé des simplifications. La plus spectaculaire est pour un potentiel de Coulomb ou un potentiel harmonique. Pour le premier

$$H = \frac{\hbar^2}{m} \left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] - \frac{e^2}{r} = \frac{me^4}{\hbar^2} \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} - \frac{1}{x} \right] \quad (2.6)$$

si bien qu'on se ramène au cas où  $m = \hbar = e^2 = 1$  par le simple changement de longueur  $r \rightarrow x\hbar^2/(me^2)$ .

Pour un oscillateur harmonique

$$H = \frac{\hbar^2}{m} \left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + Kr^2 = \sqrt{\frac{K\hbar^2}{m}} \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} + x^2 \right] \quad (2.7)$$

avec  $r \rightarrow x(Km/\hbar^2)^{1/4}$ . On généralise facilement à toute puissance  $\pm r^n$ , le signe étant adapté à obtenir une force attractive. Voir exercice.

Mais les simplifications ne se limitent pas aux potentiels en puissance. Par exemple, pour un potentiel de Yukawa, il est clair que les propriétés spectrales de

$$H = -\frac{\hbar^2}{m} \Delta_r - g \frac{\exp(-\mu r)}{r}, \quad (2.8)$$

ne dépendent pas de quatre paramètres ( $\hbar$ ,  $m$ ,  $g$ ,  $\mu$ ). Par exemple si on prend  $1/\mu$  comme unité de longueurs on se ramène facilement à

$$H = \frac{\hbar^3 \mu^2}{m} \left[ -\Delta_x - G \frac{\exp(-x)}{x} \right], \quad (2.9)$$

qui ne dépend que d'un seul paramètre  $G = mg/\mu$ . Blatt et Jackson [3] ont montré que la liaison requiert  $G \gtrsim 1.68$ .

Les lois d'échelle établies ici pour des hamiltoniens à deux corps s'appliquent sans difficulté, *mutatis mutandis* aux systèmes à plusieurs corps. Par exemple la stabilité de l'ion positonium, ( $e^+$ ,  $e^-$ ,  $e^-$ ) vis-à-vis d'une dissociation en un atome et un électron implique immédiatement celle de ( $\mu^+$ ,  $\mu^-$ ,  $\mu^-$ ).

#### D. Coordonnées de Jacobi

Pour étudier un système à petit nombre de corps, on *peut* introduire des coordonnées de Jacobi et éliminer le mouvement du centre de masse.

Petite parenthèse. Ne pas dire : « il faut ». Je me souviens qu'un béotien commentant le superbe papier d'Hylleraas et Ore sur la molécule de positronium [4] leur reprochait de ne pas avoir éliminé le mouvement du centre de masse et mettait en doute la validité de leur preuve de la stabilité. D'une part, s'il subsistait une énergie de centre de masse, cela ne ferait que remonter l'énergie et donc *a fortiori* renforcer la stabilité. D'autre part, si l'on calcule une énergie variationnelle  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  avec une fonction d'onde *invariante par translation*, le centre de masse est éliminé *ipso facto* lors de la minimisation. De même, quand on cherche à estimer l'effet d'une masse finie pour les noyaux, il est commode de placer l'origine en ce noyau, et d'évaluer le terme dit « de polarisation de masse », plutôt que de travailler avec des coordonnées de Jacobi.

Pour deux corps, il est familier de remplacer les coordonnées individuelles,  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  par

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (2.10)$$

et d'introduire les moments conjugués  $\mathbf{p}$  et  $\mathbf{P}$ , ce qui permet de réécrire l'énergie cinétique

$$T = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{\mathbf{P}^2}{m_1 + m_2}, \quad (2.11)$$

Pour  $N$  corps, on peut itérer l'opération et définir

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \\ \mathbf{x}_2 &= \mathbf{r}_3 - \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \\ &\dots\dots \\ \mathbf{x}_N &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + \dots + m_N \mathbf{r}_N}{m_1 + \dots + m_N}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

(voir Fig. 2) mais, outre le changement de l'ordre des parti-

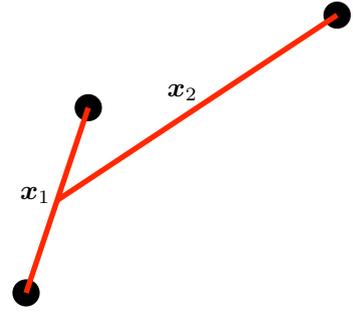


FIGURE 2. Coordonnées de Jacobi pour trois corps

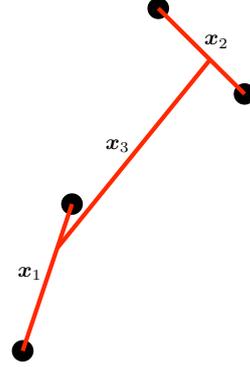


FIGURE 3. Coordonnées "haltères" pour quatre corps

cules, il y a d'innombrables variations, par exemple pour 4 particules, les coordonnées dites « haltères » (voir Fig. 3)

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_1 &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, & \mathbf{y}_2 &= \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3, & \mathbf{y}_4 &= \mathbf{x}_4, \\ \mathbf{y}_3 &= \frac{m_3 \mathbf{r}_3 + m_4 \mathbf{r}_4}{m_3 + m_4} - \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

ou encore pour quatre particules identiques, les surprenantes (je les tiens de mon collègue Fabre de la Ripelle)

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_1 &= \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4, \\ \mathbf{z}_2 &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4, \\ \mathbf{z}_3 &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4, & \mathbf{z}_4 &= \mathbf{x}_4, \end{aligned} \quad (2.14)$$

grâce auxquelles toute permutation se traduit par  $\mathbf{z}_i \leftrightarrow \pm \mathbf{z}_j$ .

Dans les expressions précédentes, la normalisation peut être variée *ad libitum*, en jouant sur les masses réduites. Il est parfois utile de considérer des transformations orthogonales. On peut alors, dans une première étape, absorber la masse par  $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}'_i = \sqrt{m_i} \mathbf{r}_i$ , si bien que l'énergie cinétique  $T$  devient telle que  $2T = \sum \mathbf{p}'_i{}^2$ . Alors le choix de coordonnées de Jacobi le plus général est la rotation  $\{\mathbf{r}'_i\} \rightarrow \{\mathbf{x}_j\}$  telle que le dernier vecteur est imposé comme proportionnel au centre de masse

$$\mathbf{x}_N = \frac{\sqrt{m_1} \mathbf{r}'_1 + \dots + \sqrt{m_N} \mathbf{r}'_N}{m_1 + \dots + m_N}. \quad (2.15)$$

Comme application, considérons le problème, pas si connu qu'on pourrait le soupçonner, d'un oscillateur harmonique

avec des masses et intensités quelconques (avec des conditions de positivité supposées satisfaites qui imposent le confinement dans toutes les directions)

$$H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i < j} a_{ij} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2, \quad (2.16)$$

Après la transformation précédente et mise à l'écart du terme de centre de masse ( $H \rightarrow H'$ ), tout ensemble de coordonnées de Jacobi donne ( $\mathbf{q}_i$  est conjugué de  $\mathbf{x}_i$ )

$$2H' = \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{q}_i^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq N-1} b_{ij} \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j, \quad (2.17)$$

et il suffit de diagonaliser la matrice  $B = \{b_{ij}\}$ .

Les coordonnées de Jacobi qui diagonalisent l'énergie cinétique sont un outil puissant pour les développements variationnels systématiques et un préalable à la méthode des harmoniques hypersphériques. Mais on y renonce souvent pour profiter de la souplesse de variables indépendantes mais non orthogonales. Voir par exemple le traitement du terme dit de Hughes–Eckart pour le recul du noyau des atomes diatomiques, ou dans les chapitres ultérieurs de ce cours les inégalités de Hall–Post avec masses inégales ou la démonstration de la liaison de systèmes non-fermioniques dont certains sous-systèmes sont liés.

### III. STABILITÉ CRITIQUE DE DEUX CORPS

#### A. 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  $n > 2$ .

Le deutéron n'est pas très lié, avec seulement  $E = -2.2$  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<sup>1</sup> 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<sup>2</sup>  ${}^1\text{S}_0$  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 triple (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

$$V = V_C + V_{SS} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + V_T [3\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}} \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}} - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2] + \dots, \quad (3.1)$$

on peut montrer à la suite de Rarita et Schwinger [5, 6] que la fonction d'onde du deutéron s'écrit

$$\psi = \frac{u(r)}{r} |{}^3\text{S}_1\rangle + \frac{w(r)}{r} |{}^3\text{D}_1\rangle, \quad (3.2)$$

et que l'équation de Schrödinger se projette en les équations couplées<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} -\frac{u''}{m} + V_0 u - E u &= -2\sqrt{2} V_T w \\ -\frac{w''}{m} + \frac{6}{mr^2} w + V_0 w - 2V_T w - E w &= -2\sqrt{2} V_T u, \end{aligned} \quad (3.3)$$

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 quadrupolaire assez bien mesuré. Si vous voulez améliorer la précision sur ce moment quadrupolaire, 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.

#### B. Digression sur la force tenseur

En étudiant les états liés du système nucléon–antinucleon dans le cas limite (irréaliste) où l'annihilation est négligée, on retrouve les équations (3.3) 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  $6/(mr^2)$  pour l'onde D, est remplacée par celle de l'opérateur tenseur, qui peut être diagonalisé, soit

$$V_T \begin{pmatrix} 0 & 2\sqrt{2} \\ 2\sqrt{2} & -2 \end{pmatrix} \rightarrow V_T \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

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

$$\frac{z(r)}{r} \left[ -\sqrt{\frac{1}{3}} |{}^3\text{S}_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |{}^3\text{D}_1\rangle \right], \quad (3.5)$$

1. Dans la décomposition habituelle, c'est la combinaison  $V_C + V_{SS}$  des termes central et spin–spin

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

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

qui obéit à

$$-\frac{z''}{m} + \frac{4}{mr^2}z + V_0 z - 4V_T z = E z, \quad (3.6)$$

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 potentiel<sup>4</sup>, on retrouve des équations analogues à celles du deutérium. La force tenseur se manifeste aussi dans les états P de spin triplet et continuent à la structure fine.

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

$$\begin{aligned} \Psi' &= \cos\theta|^3S_1\rangle + \sin\theta|^3D_1\rangle, \\ \Psi'' &= -\sin\theta|^3S_1\rangle + \cos\theta|^3D_1\rangle, \end{aligned} \quad (3.7)$$

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  $\Psi''$  n'a pas de nœud 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 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 muonium<sup>5</sup>,  $(\mu^+, e^-)$ , 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

$$w_1(r) = -2\sqrt{2} \sum_n w_{n,0}(r) \frac{\int_0^\infty V_T u_{0,0} w_{n,0} dr}{E_{1S} - E_{nD}}, \quad (3.8)$$

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 [7]).

4. Les modèles plus raffinés introduisent aussi le couplage aux voies réelles ou virtuelles méson-méson, essentiellement  $DD$  qui est le seul le plus proche

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

Il est ici plus simple de partir l'équation de Sternheimer [8], appelée parfois Dalgarno et Lewis [9],

$$-\frac{w_1''}{m} - \frac{6}{mr^2}w_1 - V_0 w - E_{0,0}w_1 = 2\sqrt{2}V_T u_{0,0}, \quad (3.9)$$

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

### C. 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 cruciallement 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

$$\int d^{(d)}\mathbf{r} V(\mathbf{r}) < 0. \quad (3.10)$$

Voir par ex. [10, 11].

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 œuvre 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  $\epsilon$  avec avoir mis  $1/m$  en facteur)

$$\psi''(r) + (d-1)\frac{\psi'(r)}{r} + \epsilon\delta(r-1) = 0, \quad (3.11)$$

et une solution est

$$\psi = \begin{cases} 1 & \text{pour } r < 1, \\ 1 - \epsilon(r^{2-d} - 1)/(2-d) & \text{pour } r > 1, d \neq 2, \\ 1 - \epsilon \ln r & \text{pour } r > 1, d = 2, \end{cases} \quad (3.12)$$

où l'on part d'une constante, modifiée vers le 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  $\epsilon$ . Par contre, si  $d > 2$ , il faudra une intensité minimale pour  $\epsilon$ .

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.

### D. 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

$$H = \frac{1}{m} [\mathbf{p}^2 + mgV(r)] . \quad (3.13)$$

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 [12, 13] que l'énergie correspondante se comporte comme

$$E_0(g) \propto -(g - g_0)^2 . \quad (3.14)$$

Avec une telle énergie évanescente 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 [11].

### E. 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 de ce dernier entraîne une modification visible du premier. 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.

#### 1. Longueur de diffusion

L'équation radiale de l'onde S est

$$-u''(r) + \lambda V(r)u(r) = k^2 u(r) , \quad (3.15)$$

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  $\pi$ .

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

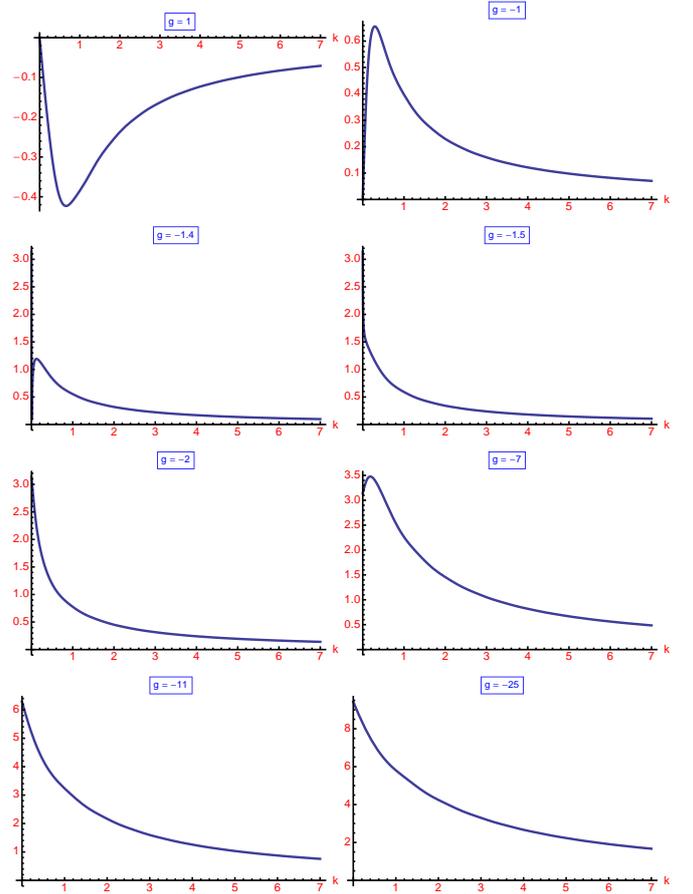


FIGURE 4. Déphasage en fonction de  $k$  pour un potentiel  $V = g \exp(-r)$  et différentes valeurs de  $g$ .

d'un état lié. Par exemple, le déphasage proton-neutron  ${}^3S_1$  est négatif à basse énergie (modulo  $\pi$ ).

À basse énergie

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \dots , \quad (3.16)$$

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.

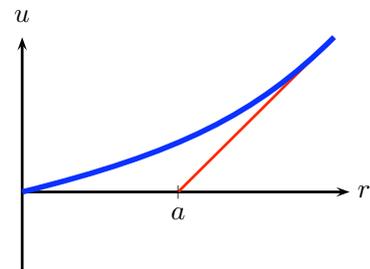


FIGURE 5. Allure de la fonction d'onde  $u(r)$  à énergie nulle pour un potentiel répulsif.

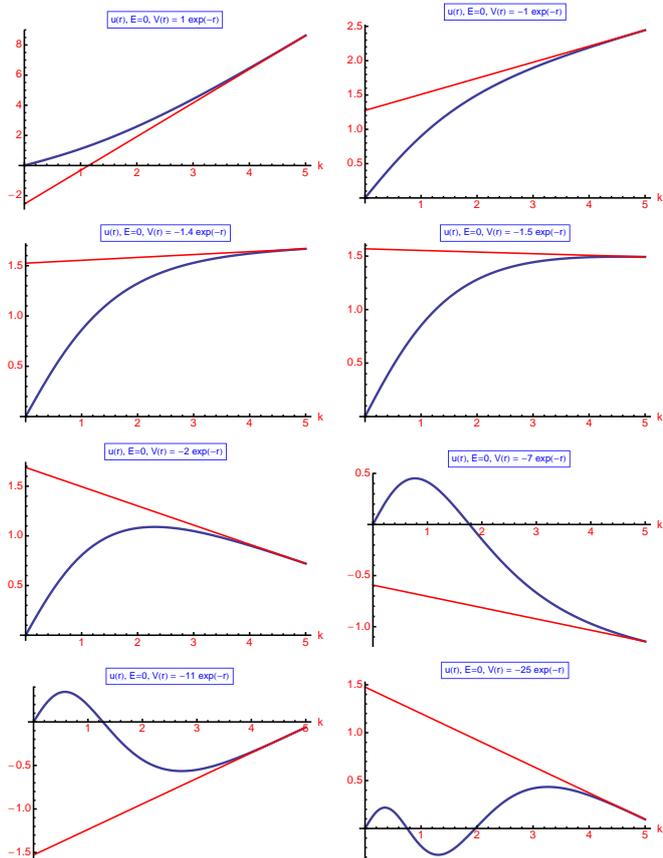


FIGURE 6. Fonction d'onde  $u(r)$  à énergie nulle pour un potentiel  $V(r) = g \exp(-r)$ .

## 2. Longueur de diffusion et énergie de l'état lié proche

Dans l'onde S, la matrice de diffusion est

$$S = \exp(2i\delta) = \frac{\cot \delta + i}{\cot \delta - i}, \quad (3.17)$$

et a donc un pôle pour  $\cot \delta = i$ , ce qui correspond d'après (3.16) à  $k = i/a$ , soit

$$E \simeq -\frac{1}{ma^2}, \quad (3.18)$$

où l'on voit qu'à un état très peu lié correspond une très grande longueur de diffusion. Quand l'intensité  $\lambda$  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  $\pi$ , ressemble à celui d'un potentiel répulsif.

## 3. Portée effective

La première correction à (3.16) est la *portée effective*, de Bethe, Blatt et Jackson, etc. [3, 14]. Voir par exemple le livre

de Joachaim [15] pour un exposé pédagogique. Le résultat est

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 + \dots, \quad (3.19)$$

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

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  $u_0 \rightarrow v_0 = 1 - r/a$ .

## 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. 4.

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  $\pi$ . En fait on observera une décroissance régulière de  $\pi$  à 0 (voir Fig. 4). Pour un potentiel plus attractif, l'état lié est plus profond, et la longueur d'onde positive. Le déphasage croît d'abord, depuis  $\pi$ , puis revient à  $\delta(k) \rightarrow 0$  quand  $k \rightarrow \infty$ .

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

$$\delta(0) - \delta(\infty) = n\pi, \quad (3.20)$$

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. 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. 7 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  $\pi$  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 potentiel, avant d'entamer les oscillations lentes quand elle devient libre.

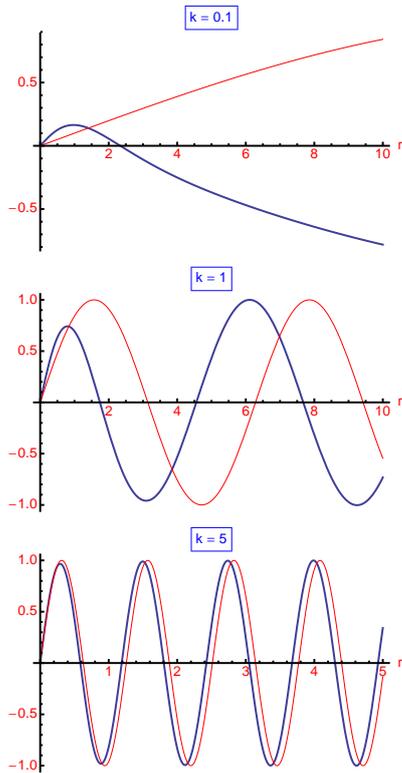


FIGURE 7. Fonction d'onde  $u(r)$  à diverses énergies pour un potentiel  $V(r) = -5 \exp(-r)$ , comparée à la solution libre  $\sin(kr)$ .

### 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 exapl l'étude de Averbuch [16], et pour plus de références l'article récent de Khuri et al. [17].

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*

$$\delta(k) \simeq \frac{\pi}{2 \ln k}, \quad (3.21)$$

à basse énergie, indépendant de l'intensité  $\lambda$  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

$$\delta(k) \simeq n\pi + \frac{\pi}{2 \ln k}, \quad (3.22)$$

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  $n\pi$ ),

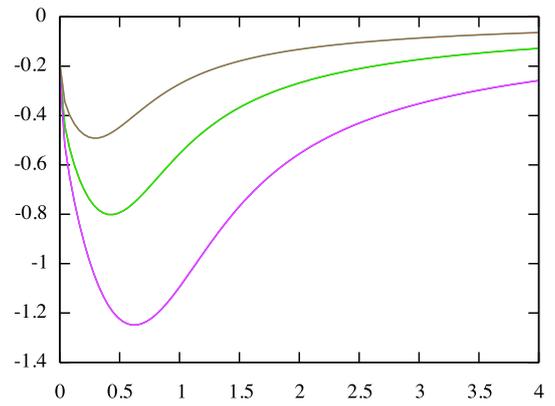


FIGURE 8.  $\delta(k)$  pour  $V = g \exp(-r)$ , et  $g = 1/2, 1, 2$ . Chaque déphasage est calculé par deux méthodes, mais on ne peut distinguer les courbes.

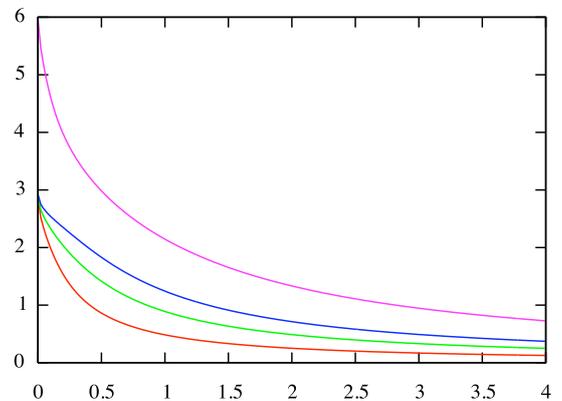
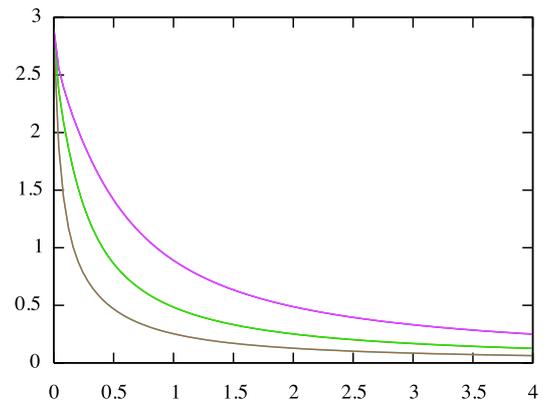


FIGURE 9.  $\delta(k)$  pour  $V = -g \exp(-r)$ , and  $g = 1/2, 1, 2$  et  $g = 1, 2, 3$  and  $6$ .

voir [17],

$$\delta(k) \simeq \frac{\pi/2}{\ln(ka) + \gamma}, \quad (3.23)$$

où  $\gamma$  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

$$u''(r) + \frac{u(r)}{4r^2} + [k^2 - gV(r)]u(r) = 0, \quad (3.24)$$

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

$$u_{\text{as}}(r) = \sqrt{r} \ln(r/a), \quad (3.25)$$

qui s'annule en  $r = a$ , comme la solution asymptotique  $u_{\text{as}}(r) = 1 - r/a$  à trois dimensions. Voir [17] pour les conditions de décroissance du potentiel et la généralisation de la portée effective à deux dimensions.

### F. Réarrangement des niveaux

Dans l'exemple précédent, le plus simple, le potentiel de courte portée supporte ou non des états liés, dont le spectre discret s'ajoute au spectre continu des états de diffusion.

Il existe une autre situation, celle des atomes exotiques (un hadron chargé négativement en orbite autour d'un noyau) et celle des trappes, où ce même potentiel de courte portée s'ajoute à une interaction de longue portée qui a de toute façon des états liés. Comment caractériser l'effet du terme de courte portée ?

Dans le cas des atomes exotiques, supposons que l'interaction forte, de courte portée, entre le hadron et le noyau, puisse être décrite par un potentiel  $\lambda v(r)$ , dont on varie l'intensité pour mettre en valeur sa montée en régime. Il s'agit d'étudier la partie basse du spectre de

$$H = -\frac{1}{m}\Delta - \frac{1}{r} + \lambda v(r), \quad (3.26)$$

tandis que pour une trappe, on peut considérer pour le mouvement relatif

$$H = -\frac{1}{m}\Delta + V(r) + \lambda v(r), \quad (3.27)$$

avec par exemple,  $V(r) = K r^2$ , sans parler des situations plus délicates où le confinement est assuré par un potentiel agissant séparément,  $W(r_1) + W(r_2)$ , tandis que l'interaction résiduelle dépend de la distance relative, soit  $\lambda v(r_{12})$ .

Le cas de (3.26) a été étudié par Zel'dovich et redécouvert par Shapiro et beaucoup d'autres. Pour une revue récente, voir [18]. Supposons  $v(r)$  à dominante négative. Pour  $\lambda < 0$ , on ajoute une répulsion, et les niveaux coulombiens sont décalés vers le haut. La surprise est que, même si  $v(r)$  est très intense, l'effet est très petit. Soit  $E_n - E_{n,0} \ll -E_{n,0}$ . Et pourtant, la théorie des perturbations *ne s'applique pas* ! Si on prend le cas d'un puits infini de rayon  $a$  très petit par rapport au rayon de Bohr  $B$ , l'effet est petit, mais on premier ordre, on aurait  $E_{n,1} = \lambda \int v(r) |\psi_0|^2 d^{(3)}r = \infty$ . On voit que le paramètre de développement n'est plus  $\lambda$ , comme dans la théorie habituelle

des perturbations, mais le rapport  $a/B$  de la portée de  $v(r)$  au rayon caractéristique du potentiel extérieur  $V(r)$ . Pour le cas où  $V(r) = -e^2/r$ , la correction à l'énergie est donnée par la formule de Truemann–Deser

$$\frac{E_n - E_{n,0}}{E_n} \simeq -\frac{4}{n} \frac{a}{B}, \quad (3.28)$$

La généralisation est

$$E_n - E_{n,0} = a |\psi_{n,0}(0)|^2, \quad (3.29)$$

où  $\psi_{n,0}$  est la fonction d'onde non perturbée dans le potentiel extérieur  $V(r)$ , et  $a$  la longueur de diffusion dans  $v(r)$  seul. On voit les approximations faites : on remplace  $v(r)$  par un potentiel équivalent de portée nulle. Pour le démarrage de l'intégration de l'équation de Schrödinger, là où  $v(r)$  domine, on néglige  $V(r)$  et l'énergie  $E$  : on se retrouve avec l'équation pour  $v(r)$  seul à énergie nulle, d'où l'apparition de la longueur de diffusion.

Il y a pas mal de discussions dans la littérature sur la validité de la formule de Truemann (3.28), et même un peu de confusion. Si  $a$  et  $E_n$  sont bien calculés, l'accord est en général satisfaisant. Comme l'a montré Dalitz, on obtient une amélioration significative en remplaçant  $a$  pour le potentiel  $v(r)$  nu par la longueur de diffusion dite « corrigée de Coulomb » obtenue en raccordant la fonction d'onde pour  $v(r)$  à basse énergie non pas aux fonctions de Bessel, mais aux fonctions de Coulomb. On trouve aussi des corrections d'ordre supérieur. Pour l'ébauche d'une systématique, voir l'article de Mandelzweig [19].

Signalons enfin la possibilité d'une solution analytique, quand  $v(r)$  est pris comme « point interaction », c'est à dire une fonction  $\delta(r)$  proprement interprétée. Voir le livre de Alberverio et al. [20], ainsi que [18]. On peut aussi généraliser les formules ci-dessus au cas d'ondes partielles  $\ell > 0$ .

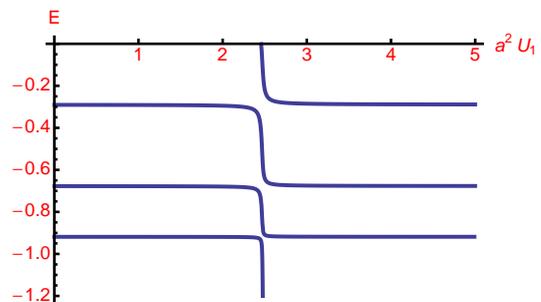


FIGURE 10. Réarrangement des niveaux pour la somme d'un potentiel de longue portée et d'un potentiel de courte portée d'intensité  $U_1$  croissante. Ici  $V(r) = -U_1$  pour  $0 < r < a$ , puis  $-U_2$  pour  $a < r < b$  et 0 pour  $b < r$ , avec  $a = 0.01$ ,  $b = 1$  et  $U_2 = 1$ .

Mais le plus surprenant reste à venir, avec le cas attractif, soit  $\lambda > 0$  avec nos conventions. Pour  $\lambda$  petit, on retrouve un décalage petit, avec la formule de Truemann (3.28) ou (3.29) valable, mais ici  $a < 0$ . Quand  $\lambda$  augmente, on se rapproche du point  $\lambda = g_0$  où  $v(r)$  seul commencerait à avoir un état lié.

La situation est décrite sur la figure (.). D'une part, l'état fondamental, essentiellement "atomique" si on s'en tient au langage des atomes exotiques, avec une liaison de l'ordre du keV, plonge vers la région "nucléaire", où les énergies se mesurent en MeV. D'autre part, et c'est ce qui étonné Zel'dovich et les autres, le second niveau atomique, 2S, plonge vers la région de l'ancien 1S et prend sa place. De même le 3S se substitue au 2S, etc. D'où le nom de réarrangement. Le phénomène est très général. Le caractère coulombien de la partie externe importe peu. Il faut un terme de courte portée s'ajoutant à un potentiel de plus grande portée. Plus le rapport des portée est grand, plus la transition est abrupte [18]. Dans d'autres contextes, on parlerait de « répulsion de niveaux » ou en anglais de "avoided crossing". Un état ne peut venir du continu directement dans la région nucléaire sans croiser les niveaux atomiques. Au point de croisement, on aurait deux états à la même énergie, ce qui est interdit pour une équation radiale du second ordre à une seule variable (voir exercice #III G 1).

En fait, la formule de Trueman cesse d'être valable pour  $\lambda \sim g_0$  car  $a \rightarrow \infty$ . En général, quand la validité d'une approximation est perdue, c'est pour toujours. Mais quand  $\lambda$  augmente et dépasse la zone dangereuse, on a de nouveau  $a$  petit comparé à  $B$ , mais  $a > 0$ , et on retrouve donc un niveau près de la valeur non perturbée  $E_0$ , mais un peu au-dessus. Comme le 1S est perdu dans les profondeurs, c'est l'ancien 2S qui prend cette place. Quelqu'un qui mesure le spectre atomique et n'a pas accès aux énergies profondes constate que le premier niveau de Bohr est décalé vers le haut, et a tendance à conclure que la correction hadronique vient d'une interaction répulsive.

Quand  $\lambda$  augmente encore, on aura d'abord  $a < 0$ , et donc une correction vers le bas des niveaux, puis, pour  $\lambda \sim g_1$ , un nouvel effondrement vers la région nucléaire, et un réarrangement des niveaux, etc.

Si on part d'un puits extérieur coulombien ou harmonique, on dispose d'un réservoir infini d'états liés du potentiel extérieur qui vont plonger l'un après l'autre dans la région nucléaire. Si on part d'un puits carré très large, par exemple, chaque fois qu'un nouvel état nucléaire apparaît, un état du continuum des états de diffusion vient "réalimenter" le stock des niveaux faiblement liés. C'est la différence entre les Figs. ?? et 11.

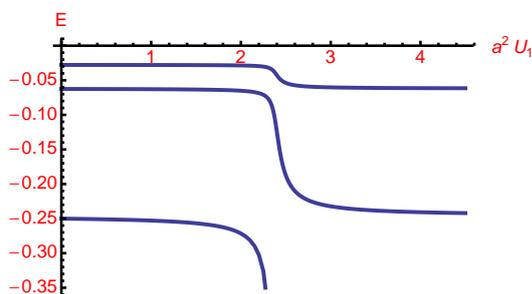


FIGURE 11. Réarrangement des niveaux pour la somme d'un potentiel coulombien et d'un potentiel de courte portée d'intensité  $g$  croissante.

## G. Exercices

### 1. 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 ?

### 2. 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  $\ell$  dont on donnera l'expression en fonction de  $d$ .

### 3. Séparation du centre de masse

Soit

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} - \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (3.30)$$

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

### 4. 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  $g/[1 + \exp[(r - R)/a]]$  ?

### 5. Fonction de phase

Montrer qu'au lieu de résoudre l'équation linéaire du second ordre (3.15) 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

$$d'(r) = -\lambda V(r) \sin^2[kr + d(r)]/k, \quad (3.31)$$

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  $\alpha(r)$ .

## IV. L'ION HYDROGÈNE NÉGATIF

### A. $H^-$ et les autres

Nous abordons ici un premier système à plus que deux particules, dont la stabilité est vraiment critique : historiquement, on a eu un peu de mal à la démontrer ; elle ne résisterait pas à des petits changements de paramètres comme par exemple abaisser la charge centrale ou donner aux électrons des masses légèrement différentes. En comparaison, l'atome He est beaucoup plus robuste.

Les livres de mécanique quantique s'accumulent sur les rayons, mais ne font pas preuve de beaucoup d'originalité sur les atomes à deux électrons comme sur d'autres chapitres. À quelques exceptions notables [21–23], très peu abordent le cas de  $H^-$  après avoir bien recopié les auteurs précédents sur He. Pourtant, nous avons des faisceaux de  $H^-$ , et cet ion est d'importance en astrophysique, à en juger par exemple par tous les articles que lui a consacré Chandrasekhar [24]. Pour nous,  $H^-$  est un bon exemple de stabilité critique, avec l'échec de la méthode de Hartree pour le décrire. Il anticipe les halos de neutrons de la physique nucléaire que les modèles à champ moyen ne peuvent prédire.

Historiquement, la difficulté à traiter les systèmes à trois corps comme on le fait pour l'atome d'hydrogène, par quantification empirique de trajectoires classiques, a fait un temps douter de la nouvelle théorie quantique. Il a fallu les travaux de pionniers comme Unsöld, Kellner, Hylleraas, Bethe, puis Chandrasekhar, parmi d'autres, pour surmonter les difficultés. De nos jours, des calculs *ab initio* très perfectionnés permettent d'évaluer les propriétés de systèmes complexes avec une grande précision.

### B. Le fondamental de l'Hélium

Nous prenons ici la limite  $m_\alpha = \infty$ , et des unités telles que  $m = e = 1$ , et une charge centrale  $Z = 2$  que nous ferons varier un peu plus tard. Ce qui correspond à l'hamiltonien

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (4.1)$$

#### 1. Théorie des perturbations

Si on néglige le terme de répulsion, on part d'une solution normalisée  $\psi_0 = \phi_0(r_1)\phi_0(r_2)$ , avec  $\phi_0(r) = u_0(r)/(r\sqrt{4\pi})$ , et  $u_0(r) = 2rZ^{3/2}\exp(-Zr)$ . L'énergie non perturbée est  $E_{0,0} = -Z^2$ . La correction au premier ordre

$$E_{0,1} = \langle \psi_0 | r_{12}^{-1} | \psi_0 \rangle, \quad (4.2)$$

est assez rituellement évaluée par un développement en ondes partielles de  $r_{12}^{-1}$ . Il semble plus simple dans ce cas particu-

lier<sup>6</sup> d'invoquer le théorème de Gauss : une couche  $\delta q = [u_0(r')]^2 dr'$  de rayon  $r'$  crée en  $r$  un potentiel  $\delta q/r$  si  $r' < r$  et  $\delta q/r'$  si  $r' > r$ . Ce qui donne :

$$E_{0,1} = \int_0^\infty u_0^2(r) dr \left[ \int_0^r \frac{u_0^2(r')}{r} dr' + \int_r^\infty \frac{u_0^2(r')}{r'} dr' \right] = \frac{5Z}{8}, \quad (4.3)$$

et donc<sup>7</sup>

$$E_0 \leq E_{0,0} + E_{0,1} = -2.75 \quad \text{pour } Z = 2, \quad (4.4)$$

à comparer à  $E_0 = -2.90372\dots$  par des calculs très sophistiqués.

Pour pousser plus loin la théorie des perturbations, on a l'habitude d'effectuer au préalable un changement d'échelle  $(Z, -1, -1) \rightarrow (\sqrt{Z}, -1/\sqrt{Z}, -1/\sqrt{Z})$ , de récrire l'hamiltonien

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{Z r_{12}}, \quad (4.5)$$

pour considérer développement systématique en  $1/Z$ . La littérature est abondante. Les premiers termes sont [25–27]

$$E = -Z^2 \left( 1 - \frac{5}{8Z} + \frac{0.157666428}{Z^2} - \frac{0.008699029}{Z^3} + \frac{0.000888705}{Z^4} + \dots \right). \quad (4.6)$$

Les deux résultats principaux sont que la convergence de la série correspond à un état lié sous le seuil de dissociation spontanée en hydrogène et électron, et que cette convergence requiert  $1/Z \lesssim 1.098$

#### 2. Méthode variationnelle

Une amélioration du calcul perturbatif au premier ordre – autre que de pousser aux ordres plus élevés – est de généraliser la fonction d'onde à

$$\Psi_\alpha = (\alpha^3/\pi) \exp[-\alpha(r_1 + r_2)], \quad (4.7)$$

qui donne une énergie variationnelle (les calculs sont les mêmes)

$$\tilde{E}(\alpha) = \alpha^2 - 2Z\alpha + 5\alpha/8, \quad (4.8)$$

dont le minimum est

$$\tilde{E}(\alpha_0) = -(Z - 5/16)^2, \quad \text{pour } \alpha_0 = Z - 5/16, \quad (4.9)$$

6. Le développement en ondes partielles peut s'avérer nécessaire pour des niveaux avec des orbitales de moment angulaire non nul.

7. L'énergie au premier ordre est une approximation variationnelle pour le fondamental

soit pour  $Z = 2$ , la valeur  $\alpha_0 = 1.6875$ , ce qui donne une idée de l'écrantage moyen, et  $\tilde{E}(\alpha_0) = -2.847\dots$  sensiblement meilleur que le précédent. On vérifie facilement que cette méthode garantit la stabilité pour  $Z \gtrsim 1.067$ , et donc pas pour  $Z = 1$ .

### C. De l'Hélium à l'ion Hydrogène négatif

On voit que l'on a un problème sérieux pour appliquer à  $H^-$  les méthodes qui donnent une bonne approximation de He. En particulier les produits de fonctions d'onde coulombiennes écrantées ne marchent pas. La meilleure fonction d'onde Hartree,  $f(r_1)f(r_2)$  n'améliore guère la situation. Il a fallu une fonction d'onde plus riche pour permettre à Bethe, Hylleraas, Chandrasekhar, etc., de prouver la stabilité de  $H^-$ . On peut par exemple introduire une anticorrélation explicite

$$\Psi \propto \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] \exp(\beta r_{12}), \quad (4.10)$$

qui reste normalisable si  $\beta < \alpha$ , ou des polynômes en  $r_{12}$ . La solution la plus élégante est

$$\Psi = \exp[-a r_1 - b r_2] + \exp[-b r_1 - a r_2], \quad (4.11)$$

(non normalisée) qui consiste à briser la symétrie puis à la restaurer par un contre-terme. Sans compter qu'il n'y a pas de nouvelle intégrale à calculer. On trouve facilement l'énergie variationnelle  $\tilde{E}(a, b)$  à partir des éléments de matrice suivants, en posant  $\Psi = |a, b\rangle + |b, a\rangle$

$$\begin{aligned} \langle a, b | \{ |a, b\rangle, |b, a\rangle \} &= \left\{ \frac{1}{4a^3b^3}, \frac{16}{(a+b)^6} \right\}, \\ \langle a, b | \mathbf{p}_2^2 | \{ |a, b\rangle, |b, a\rangle \} &= \left\{ \frac{1}{4a^3b}, \frac{16ab}{(a+b)^6} \right\}, \\ \langle a, b | r_2^{-1} | \{ |a, b\rangle, |b, a\rangle \} &= \left\{ \frac{1}{4a^3b^2}, \frac{8}{(a+b)^5} \right\}, \\ \langle a, b | r_{23}^{-1} | \{ |a, b\rangle, |b, a\rangle \} &= \left\{ \frac{a^2 + 3ab + b^2}{4a^2b^2(a+b)^3}, \frac{5}{(a+b)^5} \right\}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

et la minimisation se fait facilement, surtout avec les outils modernes, pour trouver

$$\min \tilde{E} \simeq -0.50790, \quad a \simeq 1.039, \quad b \simeq 0.283. \quad (4.13)$$

Noter que  $a$  est proche de 1, car pour cet état très peu lié, le second électron est très extérieur, et le premier voit pratiquement le noyau comme s'il était seul.

Le théorème du viriel permet de réduire d'une unité le nombre de paramètres à faire varier. Pour les gros calculs de chimie quantique *ab initio* avec des centaines ou des milliers de paramètres, le gain n'est pas très significatif, et on se contente de vérifier le théorème du viriel *a posteriori* comme test de la minimisation. Pour notre cas, passer de 2 à 1 est une économie substantielle.

Il faut d'abord remarquer (Hylleraas, et, indépendamment Fock, en 1929-30, voir exercice) que le théorème du viriel, comme la plupart des propriétés générales des solutions

exactes, sont valables pour la meilleure solution variationnelle. La restriction, bénigne, est que l'ensemble des fonctions d'onde d'essai soit globalement invariant par dilatation des coordonnées.

Donc avec des notations évidentes, on peut remplacer  $\min_{a,b}(T+V)/N$  par  $\min_{b/a} -V^2/(4TN)$ , qui est invariante d'échelle. Autrement dit, on peut écrire  $a = \bar{a}(1+x)$ ,  $b = \bar{a}(1-x)$ , on sait d'avance que le théorème du viriel reviendra à optimiser  $\bar{a}$  de sorte que l'énergie cinétique et l'énergie potentielle soient dans le bon rapport  $-1/2$ , et que que le résultat de cette première minimisation revient à remplacer  $(T+V)/N$  par  $-V^2/(4TN)$  qui ne dépend que de  $x$ . Évidemment, comme  $a$  et  $b$  jouent des rôles symétriques, si  $x$  est solution,  $-x$  le sera aussi.

### D. Généralisations et derniers commentaires

- On verra d'autres applications de cette brisure de symétrie de permutation, suivie d'une restauration par contre terme. Voir par exemple la molécule de positronium.
- On peut combiner anticorrélation explicite et anticorrélation implicite par brisure de symétrie, avec

$$\Psi = N \exp(-c r_{12} - a r_{23} - b r_{31}) + 1 \leftrightarrow 2, \quad (4.14)$$

et même superposer les termes de ce type. Frolov, par exemple, a publié de nombreux articles en exploitant cette méthode [28]. Avec un seul terme, on obtient les résultats du tableau ci-dessous

- On cherche aussi  $a$  et  $b$  complexes ! Avec des contre-terme, qui restaurent une fonction d'onde réelle (à une phase globale près). Voir Korobov [29]. Il semble cependant que l'amélioration n'apparaisse que si on superpose plusieurs termes de type (4.14). Pour un seul terme, l'optimisation choisit de laisser  $a, b$  et  $c$  réels.

TABLE I. Énergies de  $H^-$  ( $Z = 1$ ) et He ( $Z = 2$ ) avec un noyau infiniment massif, à partir de la fonction d'onde (4.14). Pour He, sont aussi présentées les deux premières excitations scalaires,  $He^*(\text{para})$  avec le même spin  $S = 0$  que le fondamental, et  $He^*(\text{ortho})$  avec un spin symétrique  $S = 1$  et donc une fonction d'onde spatiale antisymétrique.

$N$	$a_i, b_i, c_i$	$H^-$	He	$He^*(\text{para})$	$He^*(\text{ortho})$
1	$a = b = Z, c = 0$	-0.375	-2.75		
1	$a = b, c = 0$	-0.47266	-2.8477		
1	$a = b, c \neq 0$	-0.50790	-2.88962		
1	$a \neq b, c = 0$	-0.51330	-2.87566		-2.16064
1	$a \neq b, c \neq 0$	-0.52387	-2.89953		-2.16153
2	$a \neq b, c \neq 0$	-0.52496	-2.90185	-2.14461	-2.17512
3	$a \neq b, c \neq 0$	-0.52767	-2.90328	-2.14538	-2.17521
4	$a \neq b, c \neq 0$	-0.52771	-2.90347	-2.14551	-2.17522
	"Exact"[30]	-0.52775	-2.90372	-2.14597	-2.17523

## E. Les états de parité non naturelle

Oublions les spins des noyaux et ceux des électrons. Ces derniers, si on néglige les forces spin-orbite, ne servent qu'à assurer l'antisymétrisation. L'état fondamental de l'hydrogène,  $H(1s)$ , a pour moment angulaire et parité  $0^+$ . Dans une dissociation de  $H^-$  en  $H(1s) + e^-$ , l'état final a donc un moment angulaire  $\ell$  et une parité naturelle  $(1)^\ell$ . Une telle dissociation est donc impossible pour un état de parité *non naturelle* comme  $1^+$ , que l'on peut obtenir en mettant chaque électron dans un état  $2p$  et en couplant à  $J = 1$ . Pour un tel état, le seuil de dissociation est  $H(2p) + e^-$ , à  $E_{\text{th}} = -0.125$  dans nos unités. Il ne peut atteindre  $H(1s)$  qu'avec radiation.

Drake et d'autres ont montré que l'état de parité non naturelle le plus bas, noté parfois  $(2p)^2\ ^3P$ , est très légèrement lié, avec une énergie  $E \simeq -0.1253$  [31, 32]. C'est le seul état lié de  $H^-$  de parité non naturelle [33]. Cet état existe bien-sûr pour  $H_2^+$ , mais semble-t-il, pas pour le positonium [34].

Reste à savoir quelle serait la fonction d'onde la plus économique qui démontre la stabilité de cet état? Jáuregui et Bunge [35] ont montré qu'une fonction d'onde de type  $(2p)^2$  ou une somme de termes de ce type, ne donne pas la liaison, et qu'il faut un peu de configurations de type  $(3d)^2$ . Ce qui suggère d'introduire une dépendance angulaire, via  $r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta$ , soit

$$\psi = r_1 r_2 [Y_1(\hat{r}_1) Y_1(\hat{r}_2)]_{1^+} \times [\exp(-ar_1 - br_2 - cr_{12}) + a \leftrightarrow b] . \quad (4.15)$$

Avec quelques termes de ce type, on arrive en effet à démontrer la liaison et à retrouver la valeur de l'énergie,  $E \simeq -0.1253$ . On peut confirmer aussi que le même calcul ne donne pas de liaison pour l'état de parité non naturelle de l'ion positonium.

## F. Exercices

### 1. Atomes heliumoïdes

Démontrer les expressions (4.12). Retrouver les résultats du tableau ci-dessus. Compléter pour  $Z = 3$  (ion Lithium), et comparer avec les valeurs obtenues sur internet ou dans les tables de toute bonne bibliothèque.

### 2. Brisure de symétrie

Le meilleur résultat avec la fonction d'onde (4.14) est  $E = -0.52771$ . En déduire une valeur minimale du rapport  $m_3/m_2$  (on suppose la numérotation telle que  $1 \leq m_3/m_2$  qui assure la stabilité de la configuration de masses et charges  $(\infty^+, m_2^-, m_3^-)$ ).

## 3. Éléments de matrice

Montrer que tous les éléments de matrice des fonctions d'onde (4.14) et (4.15) peuvent se ramener à des intégrales de type

$$\iiint_{(\Delta)} Q(x, y, z) \exp[-\alpha x - \beta y - \gamma z] dx dy dz , \quad (4.16)$$

où  $(\Delta)$  dénote l'inégalité triangulaire sur les distances  $x, y$  et  $z$  et  $Q(x, y, z)$  est un polynôme. Montrer que par dérivation et sommation, ces intégrales se déduisent de la fonction génératrice

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = \iiint_{(\Delta)} \exp[-\alpha x - \beta y - \gamma z] dx dy dz , \quad (4.17)$$

Calculer cette fonction génératrice.

## V. SYSTÈMES DE TROIS CHARGES

### A. Panorama

On vient de voir que  $H^-$  est stable, de justesse, ainsi que  $Ps^-$ . Hill [36] a démontré que la stabilité s'étendait à toute configuration avec des électrons identiques, soit  $(M^+, m^-, m^-)$ . D'un autre côté, on démontre difficilement que  $(e^-, p, e^+)$  est instable<sup>8</sup>. Autrement dit un atome d'hydrogène ne peut fixer un positon. Il est plus intuitif que  $(p, \bar{p}, e^-)$  est instable, car on ne voit pas l'atome de protonium, très compact, se polariser suffisamment pour capturer l'électron.

Dans son livre de mécanique quantique [...], dense mais riche, Thirring suggère comme un travail intéressant de tracer la frontière entre stabilité et instabilité, en fonction des masses, pour les configurations  $\pm(+, -, -)$ . C'est ce qui été fait par une série de travaux. Certains d'entre eux ont été inspirés par la physique des quarks. Là aussi, en première approximation, le même potentiel lie les quarks  $s, c$  ou  $b$  (c'est l'*indépendance de saveur*) et des études ont essayé de comprendre comment les propriétés des hadrons évoluent quand on remplace un quarks par un autre.

Bien-sûr, il n'y a pas trois variables indépendantes, car si on multiplie toutes les masses par un même facteur  $\mu$ , l'énergie à trois corps, et l'énergie à deux corps qui détermine le seuil de dissociation, sont multipliées par le même  $\mu$ , ce qui ne change pas les propriétés de stabilité.

Dans ce chapitre, nous adopterons deux normalisations, qui sont reliées par un projections conique assez simple. D'une part, si on convient que  $m_2 < m_3$ , il est commode de considérer des systèmes tels que  $\alpha_1 + \alpha_3 = 1$ , avec  $\alpha_i = 1/m_i$ , car on peut laisser évoluer l'énergie à trois corps  $E_3$

8. Ce n'est pas trop facile, un calcul Faddeev dont j'ai oublié la référence avait démontré la stabilité !



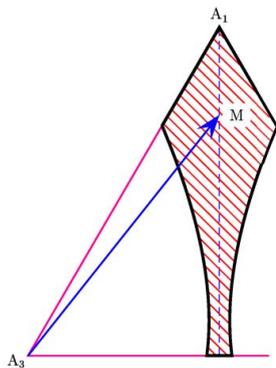


FIGURE 16. Star-shape behaviour : the line  $A_3M$  issued crossed at most the stability border between the vertex  $A_3$  and the intersection  $M$  with the axis. Once one enters the stability region, the binding energy with respect to threshold increases.

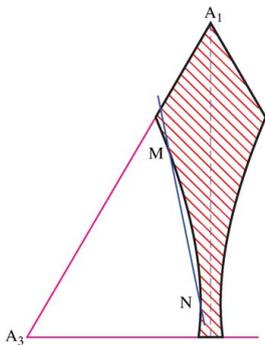


FIGURE 17. Convexité : si les points  $M$  et  $N$  sont à la frontière de stabilité, où dans le domaine d'instabilité, tout point du segment  $MN$  appartient au domaine d'instabilité.

3. Chaque domaine d'instabilité est convexe. Voir Fig.

### C. Exemple d'application

Il y a une littérature très abondante sur ces systèmes, mais souvent spécialisée. On a ainsi établi que  $H^-$  supportait au plus un trop grand écart entre les masses des deux électrons. La limite est le point  $\alpha$  (ou  $\alpha'$  sur la Fig. 18). Une limite assez grossière, mais rigoureuse (Glaser et al.), démontre l'instabilité pour  $m_1 = \infty$ ,  $m_2 = 1$  et  $m_3 \geq 1.57$ , ou  $m_2 \leftrightarrow m_3$ .

De même, on a montré que la masse minimale pour  $e^+$  stabilisant ( $e^-, p_\infty, e^+$ ) (pour  $m(e^+) \rightarrow \infty$ , on retrouve  $H_2^+$ , mais pour  $m(e^+) = m(e^-)$ , c'est instable) était  $m \simeq 1.51$ , d'où les points  $\beta$  et  $\beta'$ . Les segments  $\alpha\beta$  et  $\alpha'\beta'$  sont donc entièrement dans la zone d'instabilité. Ce qui permet de montrer que  $M^+, M^-, m^-$  (qui va de  $Ps^-$  à  $(\bar{p}, p, e^+)$ ) est certainement instable pour  $M/m \leq 0.44$ , ainsi que pour  $M/m \geq 4.6$ , ce qui améliore en fait la meilleure borne connue à ce jour, et montre qu'une vision globale du problème peut compléter les efforts locaux.

Ces bornes peuvent être comparées au résultat de Mitroy [37], qui a montré par une méthode variationnelle très puissante que le système  $(e^+, m^-, e^-)$  est stable pour

$$0,69778 \leq m/m_e \leq 1.6343. \quad (5.3)$$

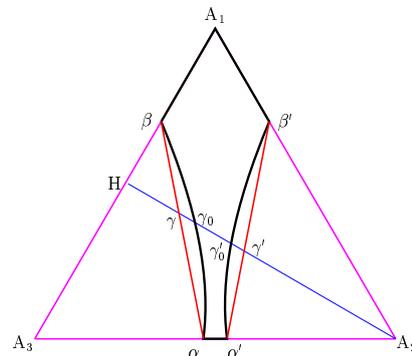


FIGURE 18. Une limite sûre sur  $\alpha$  et  $\beta$  donne une limite  $\gamma$  à gauche du point exact  $\gamma_0$ , compte-tenu de la convexité du domaine d'instabilité.

### D. Généralisation à des charges quelconques

Il s'agit de remplacer  $(+, -, -)$  par des charges quelconques  $(+q_1, -q_2, -q_3)$ . De nouveau, par invariance d'échelle, il n'y a que deux rapports de charges indépendants, mais ajoutés à deux rapports de masse, ce qui revient à étudier le domaine de stabilité dans un espace à quatre dimensions. Nous nous contenterons de quelques résultats généraux. Le plus important est que la liaison est souvent possible dans des conditions où la première impression serait de renoncer.

La figure 19 correspond à des masses électroniques  $m_2 = m_3$  (on peut fixer l'échelle à  $m_2 = 1$ ). Si on prend  $m \neq m_3$ , on a toujours un pic de stabilité, non plus le long de l'axe de symétrie, mais le long de la droite de séparation des seuils, qui a pour équation  $m_2 q_2^2 = m_3 q_3^2$ . Voir un exemple sur la Fig. 20. On retrouve l'accumulation de stabilité lorsque deux seuils coïncident : *grosso-modo*, on peut décrire le système comme  $\psi_A \psi_B f_{AB}$  avec un groupe  $A$  et un groupe  $B$  et une fonction d'onde relative. Si la configuration  $\phi_C \phi_D g_{CD}$  correspond à un autre seuil, la vraie fonction d'onde sera une superposition de ces deux termes (et d'autres configurations). En général un des deux termes domine, mais si les seuils ont la même énergie, les deux termes ont des poids comparables et interfèrent de manière optimale pour abaisser l'énergie du composé  $(A, B) = (C, D)$ .

#### 1. Cas de $(+q_1, -1, -1)$

Si  $q_1 > 1$ , on a stabilité dans tout le triangle, car  $(m_1, m_3)$  a une charge résiduelle qui attire la charge  $q_2$  et forme un état lié.

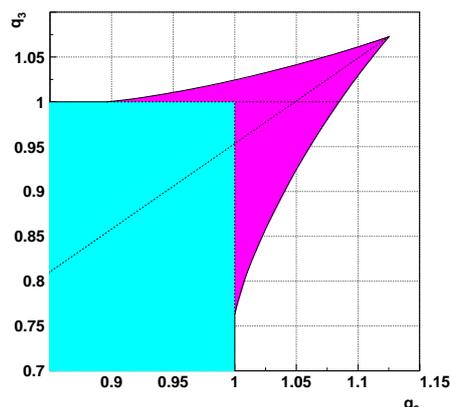
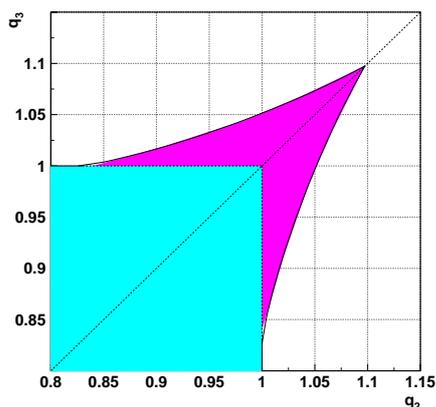
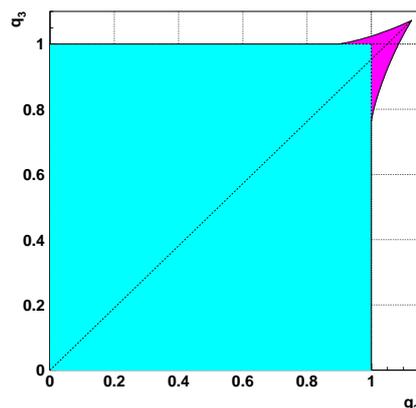
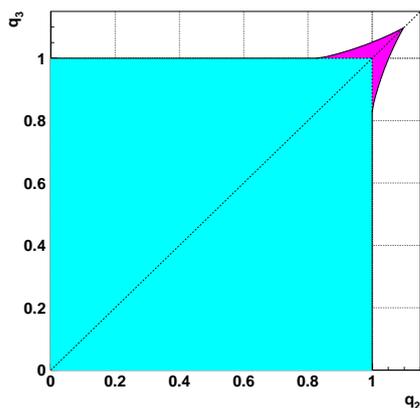


FIGURE 19. Allure du domaine de stabilité dans le plan  $(q_2, q_3)$  à la limite Born–Oppenheimer de masses  $(\infty, 1, 1)$  et charges  $(+1, -q_2, -q_3)$ .

FIGURE 20. Allure du domaine de stabilité dans le plan  $(q_2, q_3)$  à la limite Born–Oppenheimer de masses  $(\infty, 1, 1, 1)$  et charges  $(+1, -q_2, -q_3)$ .

SI  $q_1 = 1$ , on a les résultats précédents.

Si  $q_1 \searrow$ , on a d’abord un domaine similaire, mais plus mince. Les théorèmes d’étoilement et de convexité subsistent, mais celui de Hill est le premier à disparaître. Le domaine garde quelque temps un petit îlot de stabilité près de  $H^-$ , et un autre plus important près de  $H_2^+$ . Le premier disparaît très vite, et  $H_2^+$  résiste jusqu’à  $q_1 \simeq \dots$

D’autres exemples sont donnés par Kriek et al. [...]; basés sur des calculs numériques qui ne sont pas vraiment faciles.

## 2. Cas où $q_2 \neq q_3$

La modification la plus visible est que le diagramme triangulaire n’est plus symétrique. Mais à la place de l’axe de symétrie, un rôle important est joué par la droite d’égalité des seuils

$$\frac{q_2}{\alpha_1 + \alpha_2} = \frac{q_3}{\alpha_1 + \alpha_3}, \quad (5.4)$$

où apparaît un regroupement des zones de stabilité. Voir figures.

Une autre coupe du domaine consiste à regarder la stabilité pour des masses données, en fonction des charges. Quelques exemples ont été étudiés, notamment pour la limite Born–Oppenheimer, soit  $\{\alpha_I\} = \{1, 0, 0\}$ . Fixons  $q_1 = 1$ . Si  $q_2 < 1$  et  $q_3 < 1$ , la stabilité est évidente. Il est remarquable que la stabilité persiste jusque vers  $q_2 = q_3 \simeq 1.4??$  Voir fig.

## E. Exercices

### 1. Stabilité sur l’axe

Montrer la stabilité de  $(M^+, m^-, m^-)$  à l’aide de (4.11). Comment évolue l’anticorrélation  $b/a$  en fonction de  $M/m$  ? et le rapport de l’énergie variationnelle au seuil de dissociation ?

## 2. Étoilement

Démontrer la propriété d'étoilement. Aide : se placer à seuil constant.

## 3. Convexité

Démontrer la propriété de convexité. Aide : se placer à seuil constant. Utiliser (et justifier) la propriété que si hamiltonien dépend linéairement d'un paramètre  $\lambda$ , le fondamental est une fonction concave de  $\lambda$ .

## 4. Largeur minimale de la bande

Soit, dans le cas de charges unités,  $\delta(\alpha_1)$  la largeur de la bande correspondant à une masse inverse normalisée ( $\sum \alpha_i = 1$ )  $\alpha_1$  pour la particule positive. Montrer qu'une connaissance de la liaison sur l'axe, caractérisée par le rapport  $r$  de (5.2), donne une limite inférieure à  $\delta(\alpha_1)$ .

## 5. État de parité non naturelle

Trace l'allure du domaine de stabilité dans le triangle des masses inverses pour l'état de parité non naturelle discuté au chapitre précédent.

# VI. SYSTÈMES DE QUATRE CHARGES

## A. Motivation

On touche là à la frontière de la chimie, avec en particulier la molécule d'hydrogène. Mais la physique des positrons, des muons et des hadrons chargés permet d'envisager beaucoup d'autres combinaisons des masses ( $m_1^+, m_2^+, m_3^-, m_4^-$ ). Le domaine physique est tri-dimensionnel (il y a trois rapports de masse indépendants). Il contient de larges zones de stabilité, avec la molécule  $H_2$  déjà mentionnée, la molécule de positronium qui reviendra souvent dans la discussion, l'hydride positronium,  $PsH$ , qui contient pourtant un sous-système instable ( $p, e^+, e^-$ ) que le second électron vient stabiliser<sup>9</sup>, et plus généralement tous les systèmes avec deux particules identiques, soit  $m_1 = m_2$  ou  $m_3 = m_4$  dans notre notation. La règle vue à propos de trois charges se confirme donc, que si deux seuils sont égaux, ils peuvent interférer constructivement pour former un état lié.

Il y a aussi des zones d'instabilité. Par exemple ( $p, e^+, \bar{p}, e^-$ ) : si on part du seuil le plus bas, ( $p, \bar{p}$ ) + ( $e^+, e^-$ ), il est

9.  $PsH$  n'est pas borroméen, car on peut passer par  $Ps^-$  et ajouter le proton. On définira le mot borroméen dans un chapitre ultérieur.

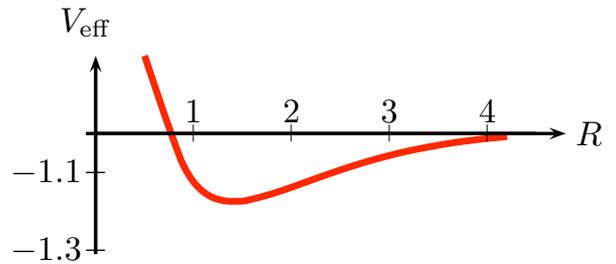


FIGURE 21. Potentiel effectif entre deux protons pour la molécule d'hydrogène à l'approximation de Born–Oppenheimer.

difficile d'imaginer comment le positronium pourrait polariser le protonium, mais la question de la métastabilité pourrait être posée d'un système  $H\bar{H}$  qui ne s'apercevrait pas très vite de sa possibilité de se recombiner en ( $p, \bar{p}$ ) + ( $e^+, e^-$ ).

## B. La méthode de Born–Oppenheimer

Pour la molécule d'hydrogène avec des protons très lourds, la méthode la plus connue est celle de Born–Oppenheimer (Heitler, London, etc.). Pour une distance  $x$  donnée entre les deux protons, on calcule l'énergie  $E_e(x)$  des deux électrons dans ce champ. L'allure est donnée sur la Fig. (.). Pour  $x \rightarrow \infty$ , chaque électron est attaché à un proton, et on retrouve l'énergie du seuil,  $E_e(\infty) = -1$ . Pour  $x = 0$ , on retrouve l'atome He, et donc  $E_e(0) = -2.90372\dots$  Quand on ajoute l'interaction directe entre les deux protons,  $1/x$ , on obtient le potentiel effectif  $V_{\text{eff}}(x) = E_e(x) + 1/x$ , voir Fig. SQ :fig :adia régissant le mouvement des deux protons. L'état fondamental est très en dessous du seuil ( $E = -1$ ), et il y a un riche spectre d'excitations radiales et orbitales dans ce potentiel. On peut simplifier leur description en approchant le minimum par une parabole

$$V_{\text{eff}}(x) \simeq V_{\text{eff}}(x_0) + K(x - x_0)^2, \quad (6.1)$$

et en appliquant les résultats de l'oscillateur harmonique. Voir par exemple [38] pour essayer de comprendre le nombre d'états excités d'une molécule diatomique.

On a aussi d'autres séries d'excitations, correspondant aux niveaux excités  $E_e^*(x), \dots$  des électrons.

Quelques commentaires sur cette méthode.

1. Il y a d'innombrables corrections. La plus importante est de tenir compte du recul des noyaux. Si la séparation  $x$  entre les protons est complétée par  $y$  et  $z$  pour le mouvement relatif et  $R$  pour le centre de masse, l'hamiltonien intrinsèque s'écrit

$$\begin{aligned} H &= \frac{\mathbf{p}_x^2}{M} + \frac{1}{x} + \frac{\mathbf{p}_y^2}{m} + \frac{1}{y} + \frac{\mathbf{p}_z^2}{4\mu} - \sum_{\pm, \pm} \frac{1}{|z \pm x/2 \pm y/2|}, \\ &= \frac{\mathbf{p}_x^2}{M} + \frac{1}{x} + h(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z), \\ &\lesssim \frac{\mathbf{p}_x^2}{M} + \frac{1}{x} + E_e(x), \end{aligned} \quad (6.2)$$

où  $\mu$  est la masse réduite électron–proton. On voit que l’approximation consiste à remplacer l’hamiltonien électronique par son *minimum* avec l’espoir – qui se réalise très bien – que quand les protons bougent lentement, les électrons s’ajustent à leur nouvel état fondamental.

2. On voit également que l’approximation sous-estime l’énergie algébrique, c’est-à-dire surestime la liaison.

3. À la limite adiabatique, le potentiel effectif est universel, en particulier le même pour HH, HD et DD. En utilisant l’inégalité de Bertlmann, Martin et Nussinov (peut-être inventée avant ou redécouverte indépendamment par d’autres) proposée en exercice, on en déduit pour les états fondamentaux

$$HH + DD \leq 2HD, \quad (6.3)$$

et en équilibre thermodynamique, on retrouvera des proportions de HH, HD et DD qui seront fixées par ces différences d’énergie. Voir exercice.

4. Toujours à la limite adiabatique où  $M \gg m$ , la masse réduite de l’atome est proche de  $m$ , donc le seuil reste à peu près constant si  $M \nearrow$ . Mais on voit que la molécule est de mieux en mieux liée. On verra plus loin une démonstration plus rigoureuse.

### C. La molécule de positronium

C’est une grande page de cette physique. En 1945, Wheeler proposa qu’à la limite où l’on néglige l’annihilation et ne tient compte que de la force coulombienne, les positrons puissent former des états liés comme  $\text{Ps}^-$  ou  $\text{Ps}_2$ . Le premier a été évoqué dans le chapitre précédent, et sa stabilité n’a pas posé de problème à ceux qui avaient déjà terrassé  $\text{H}^-$ . La molécule  $\text{Ps}_2$  fut plus coriace. En 1946, le norvégien Ore, alors à Yale, se saisit de ce qui faisait de mieux à l’époque pour le problème à quatre corps, et l’appliqua, *mutatis mutandis*, à  $\text{Ps}_2$ . Il conclut que

Although the evidence here presented against the stability of the polyelectron composed of two electrons and two positrons is not conclusive in a strict mathematical sense, it counsels against the assumption that clusters of this (or even of higher) complexity can be formed.

De nos jours, quelqu’un qui douterait de ce résultat publierait le lendemain un commentaire cinglant sur “ArXiv” et se ferait rapidement un ennemi de plus. À l’époque, il y avait encore un peu de savoir-vivre. Hylleraas convainquit Ore de se joindre à lui, et ils publièrent en 1947 une magnifique preuve analytique de la stabilité de  $\text{Ps}_2$ . Leur fonction d’onde est

$$\begin{aligned} \Psi &= \exp(-ar_{13} - br_{14} - ar_{24} - br_{23}) + \{a \leftrightarrow b\}, \\ &= \exp[-(a+b)(r_{13} + r_{14} + r_{23} + r_{24})/2] \times \\ &\quad \cosh[(a-b)(r_{13} - r_{14} - r_{23} + r_{24})/2]. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Il n’y a pas de dépendance explicite en  $r_{12}$  ni en  $r_{34}$  qui pourrait mieux tenir compte de l’anticorrélation, mais comme pour  $\text{H}^-$ , la possibilité de deux portées différentes,  $a \neq b$ , suffit à donner une énergie  $E = -0.5\dots$  en dessous du seuil de dissociation en deux Ps.

De très nombreux auteurs, à commencer par Ore lui-même, se sont efforcés d’améliorer ce calcul, et on obtient une énergie égale à  $E \simeq -0.516$ . Il a fallu assez longtemps, et la méthode de Varga, un peu barbare (on développe sur des gaussiennes, alors qu’on sait bien que le comportement asymptotique est exponentiel !) mais redoutablement efficace pour découvrir un état excité stable [39]. D’où la proposition de ces auteurs de rechercher les transitions entre ce niveau excité et le fondamental, pour identifier  $\text{Ps}_2$ . En effet, avec si peu de liaison, l’annihilation de  $\text{Ps}_2$  diffère peu de celle de deux atomes Ps, et on obtient des photons d’énergie très proche de  $mc^2$ .

La molécule  $\text{Ps}_2$  a été découverte par Cassidy et Mills [40], celui-là même qui découvrit l’ion  $\text{Ps}^-$ . Plusieurs édifices atomiques contenant des positons sont prédits comme stables. Voir par exemple les travaux de Mitroy pour des résultats récents et des références.

Un mot encore sur cette molécule de positronium et d’autres composés contenant des positrons. Un enjeu des calculs *ab initio* est de calculer la largeur due à l’annihilation, laquelle est proportionnelle au coefficient de corrélation  $C = \langle \delta^{(3)}(r_{ij}) \rangle$  entre un électron et un positron. Dans les calculs variationnels, on constate qu’il est beaucoup plus difficile de faire converger  $C$  que l’énergie  $E$ . C’est un problème récurrent. Par exemple, quand on a voulu évaluer les effets de violation de parité dans les atomes, qui sont proportionnels à  $\langle \delta^{(3)}(r_{ij}) \rangle$ , car l’échange du  $Z_0$  est de portée nulle, on s’est aperçu que les fonctions d’onde atomiques disponibles ne garantissaient pas une excellente précision sur ce coefficient. Plutôt que de tout recalculer, certains physiciens astucieux [41] ont utilisé une généralisation de la règle de Schwinger, qui remplace la fonction d’onde en un point précis par une intégrale. Pour deux corps, voir exercice, cette règle est

$$C = |\Psi(0)|^2 = \frac{|u'(0)|^2}{4\pi} = \frac{m}{4\pi} \int_0^\infty |u(r)|^2 V'(r) dr, \quad (6.5)$$

dont l’application la plus spectaculaire est pour un potentiel linéaire : toute approximation, même grossière, donne le résultat exact pour  $C$ , pourvu qu’elle soit normalisée. Pour des systèmes coulombiens, Fleck et al. [42] ont calculé  $C$  dans les molécules bosoniques  $(\pi^+\pi^-)^n$  et montré qu’une fonction d’onde même assez simple donnait pour  $C$  la même qualité de résultat à partir de la généralisation de (6.5) que la lecture directe de  $\langle \delta^{(3)}(r_{ij}) \rangle$  sur des fonctions d’onde beaucoup plus raffinées.

### D. L’hydride positronium

La notation est  $\text{PsH}(p, e^+, e^-, e^-)$ . Le seuil le plus bas est  $\text{H}(p, e^-) + \text{Ps}(e^+, e^-)$ . La stabilité ne saute pas aux yeux. Il est clair que  $\text{Ps}^-$ , qui est stable, arrive à attirer le proton, mais il n’est pas évident que l’énergie sera inférieure au seuil. Si on part de  $(p, e^+, e^-)$ , c’est pire, car cet ion est instable. Le miracle, c’est qu’il est stabilisé par l’électron supplémentaire.

Ore a démontré la stabilité par le moyen d’une fonction d’onde analogue à (6.4), adaptée à ce problème. La meilleure

énergie est 5,2% en dessous du seuil par des fonctions d'onde plus élaborées.

Comme pour l'ion  $H^-$  il y a des états excités qui de par leurs nombres quantiques, ont un seuil de dissociation plus élevé que  $H(1s) + Ps(1s)$  [43?].

### E. Molécules à deux électrons identiques

Le résultat de Ore pour  $PsH$  a inspiré Varga et al., qui ont montré que toute molécule avec  $m_3 = m_4$  est stable,  $\forall m_1, m_2$ . Bien-sûr on peut intervertir le rôle des charges positives et négatives. La preuve n'est pas 100% mathématique, mais les auteurs utilisent des fonctions d'onde de type Hylle- raas et Ore ou gaussiennes dont les éléments de matrice sont analytiques. L'incertitude ne vient que de l'évaluation d'expressions bien identifiées, mais il n'y a pas d'erreur venant d'intégrales évaluées numériquement.

### F. Hydrogène-antihydrogène

Il s'agit de  $(M^+, m^-, M^-, m^-)$  dont le seuil le plus bas est  $(M^+, M^-) + (m^+, m^-)$ , comme on peut le vérifier directement, ou comme exemple de l'inégalité BMN proposée comme exercice. Si  $M \gg m$ , on peut être tenté par une approximation de Born– Oppenheimer, mais cette approche a des limites prohibitives. En effet, pour  $x$  grand, si  $x$  est la séparation des deux lourds, comme pour la molécule d'hydrogène, on a une énergie  $-m$ , avec  $H$  à un bout et  $\bar{H}$  à l'autre. Mais pour  $r \rightarrow 0$ , l'électron comme le positron voient une charge de plus en plus faible et la liaison est perdue. Voir Armour (Erica) et les références. Comme mentionné dans l'introduction à ce chapitre, l'étude du potentiel de Born– Oppenheimer, dans la région où il existe, pourrait révéler des minima locaux correspondant à des états métastables.

Le point de vue de Bressanini et al. (voir aussi Varga) est différent. Partant du cas  $M = m$  qui est  $Ps_2$ , ou une réplique à une autre échelle de masse, ils ont fait varier le rapport  $M/m$  et montré, avec une méthode très puissante, que la stabilité ne subsistait que pour

$$\frac{1}{2.2} \lesssim \frac{M}{m} \lesssim 2.2. \quad (6.6)$$

### G. Le domaine de stabilité

On a beaucoup moins de résultats rigoureux que pour trois corps. Néanmoins, on peut esquisser l'allure du domaine dans le tétraèdre  $\sum m_i = 1$  ou  $\sum \alpha_i = 1$  avec  $\alpha_i = 1/m_i$ . Nous ferons ce dernier choix. Récapitulons :

- Le domaine respecte les symétries d'échange entre 1 et 2, ou 2 et 3 ou de conjugaison de charge ( $\{1, 2\} \leftrightarrow \{3, 4\}$ )
- Le domaine de stabilité contient le centre  $\alpha_i = 1/4 \forall i$ , qui est  $Ps_2$ , et les plans  $\alpha_1 = \alpha_2$  et  $\alpha_3 = \alpha_4$ .
- Les sommets sont tous du type  $(e^+, p, \bar{p}, \bar{p})$  avec  $\alpha_1 = 1$  et  $\alpha_i = 0$  pour  $i \geq 2$ . Dans ce cas,  $(p, \bar{p}, \bar{p})$  est stable,

car c'est une variante de  $Ps^-$ . Son énergie est proportionnelle à  $M$  et, en comparaison, les termes électroniques sont négligeables. Le seuil est donc  $(p, \bar{p}, \bar{p}) + e^+$ . Mais dans tous les cas où le seuil le plus bas est de type 3+1, on a une attraction entre les deux protagonistes de ce seuil, et donc stabilité.

- Plus généralement, les coins sont du type  $(m^+, M_2^+, M_3^-, M_4^-)$  avec  $m \ll M_i$ . Si on coupe le tétraèdre par un plan horizontal proche du sommet supérieur, on verra en coupe une réplique du domaine de stabilité à trois corps. Tout dépendra en effet de si  $(M_2^+, M_3^-, M_4^-)$  est lié ou non. Voir Fig. 22

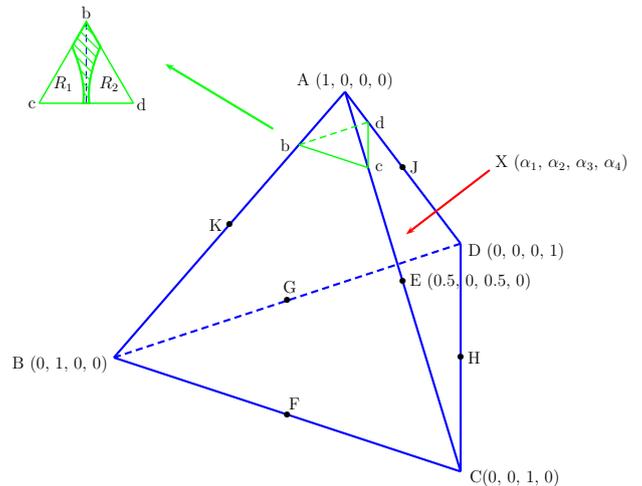


FIGURE 22. Définition du tétraèdre pour représenter quatre charges et détail des coins.

L'allure très schématique du domaine de stabilité est donnée dans la Fig. 23.

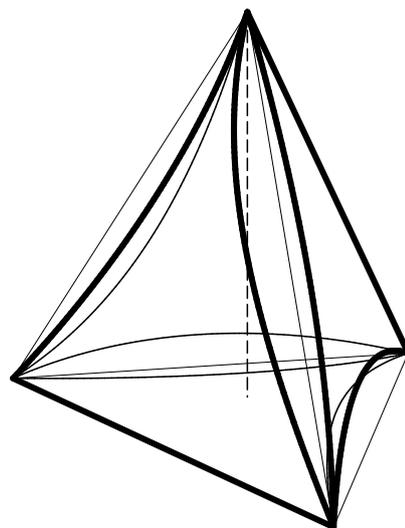


FIGURE 23. Allure du domaine de stabilité dans le tétraèdre des masses inverses normalisées.

## H. Exercices

### 1. Théorème du viriel

Soit  $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots)$  la fonction d'onde de mouvement relatif décrivant un état lié d'un système coulombien, d'énergie  $E$ . On considère la transformation

$$\psi \rightarrow \psi_\lambda = \lambda^{3(N-1)/2} \psi(\lambda \mathbf{x}_1, \lambda \mathbf{x}_2, \dots),$$

où le facteur maintient la normalisation, et note  $E(\lambda)$  la valeur moyenne de l'hamiltonien sur  $\psi_\lambda$ . Expliquer pourquoi  $E(\lambda)$  est stationnaire au voisinage de  $\lambda = 1$ . En déduire le théorème du viriel. Montrer que la relation entre parties cinétique et potentielle reste en général valable pour une approximation variationnelle. Généraliser l'expression du théorème du viriel à un potentiel non coulombien.

### 2. Inégalité de BMN

Soit  $V(r)$  un potentiel à deux corps, suffisamment attractif pour lier  $(m, m)$ . Montrer que  $(M, m)$  et  $(M, M)$  seront *a fortiori* liés si  $m \leq M$ . Montrer l'inégalité de Bertlmann et Martin [44], et de Nussinov [45, 46]

$$E(m, m) + E(M, M) \leq 2E(M, m),$$

Appliquer aux mésons  $\phi(1020)$ ,  $J/\psi(3095)$  et  $D_s^*(2112)$ . Quel est le seuil le plus bas pour  $(M^+, m^+, M^-, m^-)$ .

### 3. Hydrogène lourd

Dans un gaz d'hydrogène moléculaire à température  $T$ , il y a  $p = 1\%$  de deutériums parmi les noyaux, et le reste en protons. Calculer les proportions  $p_1$  de molécules  $D^2$  et  $p_2$  de molécules  $HD$ , avec  $p_1 + p_2 = p$  en fonction des différences entre les énergies  $\epsilon_0$  de  $H_2$ ,  $\epsilon_1$  de  $HD$  et  $\epsilon_2$  de  $D_2$ .

### 4. Marge de stabilité

On suppose que  $(M^+, M^+, m^-, m^-)$ , dont le seuil est  $E_{th} = -Mm/(M+m)$  possède une énergie au moins inférieure à  $E - \epsilon$ , avec  $\epsilon > 0$ , connue par un calcul variationnel. En déduire une extension minimale du domaine de stabilité pour des configurations  $(M^+, M^+, m_3^-, m_4^-)$ .

### 5. Écrantage de Debye et stabilité

On imagine que par un effet de milieu, tous les potentiels  $\pm 1/r_{ij}$  soient remplacés par un potentiel écranté  $\pm \exp(-\lambda r_{ij})/r_{ij}$  où  $\lambda$  est le même pour toutes les paires. Pour  $\lambda = 0$ , on retrouve les résultats habituels, avec pour les énergies de liaison (comptées positivement)

$$E_B(H) < E_B(H^-) < E_B(H_2^+) < E(H_2),$$

Pour  $\lambda \rightarrow \infty$  aucun de ces systèmes n'est lié : on a une complète dissociation. Dans les ordres les différents états liés disparaissent-ils ? Peut-on imaginer en particulier que  $H_2$  soit lié sans que  $H$  ne le soit ? Dites votre pronostic et vérifiez par une recherche bibliographique sur internet.

### 6. Règle de Schwinger

Montrer que si  $-u''(r) + mV(r)u(r) = mEu(r)$  régit un état lié à deux corps dans l'onde  $S$ ,

$$|u'(0)|^2 = m \int_0^\infty V'(r) |u(r)|^2 dr.$$

Vérifier cette règle pour  $mV(r) = -1/r$  avec  $u(r)$  exact et  $u(r) \propto r \exp(-ar^2)$  correspondant à la meilleure gaussienne (on varie  $a$  pour obtenir le minimum de l'énergie).

## VII. INÉGALITÉS DE HALL ET POST

### A. Recherche de bornes inférieures

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, d'abord 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

$$H = H_1 + H_2 + \dots \quad (7.1)$$

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

$$E(H) \leq E(H_1) + E(H_2) + \dots \quad (7.2)$$

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  $H = 2p^2 + r^2 - 1/r$  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  $H_1 = p^2 + r^2$  et  $H_2 = p^2 - 1/r$ , ce qui donne un assez grossier  $E \geq 3 - 1/4 = 2.75$ . Une amélioration peu coûteuse consiste en  $H_1 = (1+x)p^2 + r^2$  et  $H_2 = (1-x)p^2 - 1/r$ , conduisant au bien meilleur

$$E(H) \geq \max_x \left[ 3\sqrt{1+x} - \frac{1}{4(1-x)} \right] \simeq 3.179 \dots, \quad (7.3)$$

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 (nucl-th/0506069) pour une autre approche.

## B. Cas simple : 3 bosons vs. 2 bosons

### 1. Borne naïve

Soit l'hamiltonien très simple, symétrique par permutations,

$$H_3 = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{3m} + V_{12} + V_{23} + V_{31}. \quad (7.4)$$

La décomposition

$$H_3 = \left[ \frac{\mathbf{p}_1^2}{4m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{4m} + V_{12} \right] + \left[ \frac{\mathbf{p}_2^2}{4m} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{4m} + V_{23} \right] + \dots, \quad (7.5)$$

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

$$E_3(m) \geq 3E_2(2m), \quad (7.6)$$

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,

$$H_2(m, g) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + gV_{12}, \quad (7.7)$$

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

$$E_3(m, g) \geq \frac{3}{2}E_2(m, 2g), \quad (7.8)$$

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

### 2. Première applications 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

$$V(qqq) \geq [v(r_{12}) + v(r_{23}) + v(r_{31})]/2, \quad (7.9)$$

ce qui donne pour les énergies l'inégalité (7.8) et en ajoutant les masses constituantes

$$\frac{\mathcal{M}(qqq)}{3} \geq \frac{\mathcal{M}(q\bar{q})}{2} \quad (7.10)$$

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.

### 3. Borne améliorée

La borne (7.6), ou sa forme équivalente (7.8), 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 (7.5), 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 le mouvement 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

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2(m, g) &= H_2(m, g) - \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2}{4m} = \frac{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)^2}{4m} + gV_{12}, \\ \tilde{H}_3(m, g) &= H_3(m, g) - \frac{(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3)^2}{6m}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

La décomposition est maintenant

$$\tilde{H}_3(m, g) = \sum_i \tilde{H}_2^{(i)}(3m/2, g), \quad (7.12)$$

donnant ce que nous appellerons une inégalité *améliorée*

$$E_3(m, g) \geq 3E_2(3m/2, g) = \frac{3}{2}E_2(3m/4, 2g). \quad (7.13)$$

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  $V_{ij} = r_{ij}^2 = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2$ , en effet,  $E_2(m, g) = 3\sqrt{g/m}$  pour le deux corps, tandis que pour les trois corps, les coordonnées de Jacobi habituelles

$$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \boldsymbol{\lambda} = \frac{2\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{\sqrt{3}}, \quad (7.14)$$

permettent d'écrire la partie intrinsèque comme

$$\tilde{H}_3 = \frac{\mathbf{p}_\rho^2}{m} + \frac{3}{2}\rho^2 + \frac{\mathbf{p}_\lambda^2}{m} + \frac{3}{2}\lambda^2, \quad (7.15)$$

soit  $E_3 = 3\sqrt{6}\sqrt{g/m}$ , c'est-à-dire (7.13) 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  $\alpha$  est optimisé, et si l'énergie à 3 corps est estimée en variant  $\beta$  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,

### C. Quarks et antiquarks top liés par le boson de Higgs

Un problème récemment soulevé est celui de la formation d'amas de quarks antiquarks top liés par le boson de Higgs. L'idée est de bénéficier de deux effets : d'une part le boson de Higgs se couple plus fortement aux fermions les plus lourds, et de manière cohérente, explique leur masse plus élevée. D'autre part les particules lourdes bénéficient plus d'un potentiel attractif que les particules légères.

Un calcul complet devrait tenir compte des forces de couplage, celles-là même qui assurent la liaison du quarkonium et dont la généralisation aux systèmes plus complexes sera discutée plus loin. Si la liaison était prononcée, il faudrait tenir compte des effets relativistes, etc.

Mais pour une première investigation, on peut n'examiner que l'effet de l'échange du boson de Higgs, à l'approximation non-relativiste. Jusqu'à 6 quarks (ou antiquarks) le spin et la couleur peuvent endosser les contraintes de l'antisymétrie, et on peut traiter la fonction d'onde spatiale comme celle de bosons.

On est donc amené à résoudre le problème de  $N$  bosons, avec  $N \leq 12$ , interagissant par un potentiel de Yukawa scalaire (sans dépendance en spin) et attractif. On va voir qu'en utilisant les lois d'échelle et les inégalités de Hall et Post, la question de la stabilité peut être réglée rapidement.

La possibilité d'amas de quarks et antiquarks top a été proposée par Nielsen et al. [47], qui, avec son remarquable optimisme, a négligé le facteur de Debye  $\exp(-\mu r_{ij})$  et ramené le problème à une interaction de type gravitationnel  $-\sum r_{ij}^{-1}$ . Autant dire que ce n'est pas très réaliste comme l'ont souligné les commentaires de Shuryak et al. [48] et de Richard [49]. Mais en fait, le problème de  $N$  bosons en interaction de

Yukawa avait déjà été traité précédemment par Pacheco et al. [50, 51].

Considérons donc l'hamiltonien

$$H_N = \sum_i^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_t} - \alpha_H \sum_{i < j} \frac{\exp(-\mu r_{ij})}{r_{ij}}, \quad (7.16)$$

avec un couplage  $\alpha_H = g_t^2/(4\pi)$  selon les notations de la physique du Higgs, et  $g_t \sim 1$ . On peut donc considérer  $\alpha_H = 1/(4\pi)$  comme une valeur de référence, mais bien-sûr la faire varier dans l'étude des propriétés spectrales de  $H$ .

Par changement d'échelle

$$E_N(m_t, \alpha_H, \mu) = \frac{\mu}{m_t} \epsilon_N(G), \quad G = \frac{m_t \alpha_H}{\mu}, \quad (7.17)$$

on voit comme cela a déjà été dit, qu'il s'agit d'un problème à un seul paramètre. Avec  $m_t = 172.6$  GeV, et une masse de Higgs raisonnable près de  $\mu = 140$  GeV, on obtient  $G \sim 0.1$  comme ordre de grandeur de ce couplage sans dimension. Pour le cas à deux corps, il faut résoudre le problème à une variable

$$h_2 = -\Delta - G \exp(-r)/r, \quad (7.18)$$

qui possède un état lié pour  $G \geq G_2 \simeq 1.68$  [3]. La Fig. 24 donne l'énergie  $\epsilon_2$  du fondamental, ainsi que la limite supérieure  $\tilde{\epsilon}_2 = \min_a [t(a) - G p(a)]$  obtenue avec une fonction d'onde d'essai  $\psi_a(\mathbf{r}) \propto \exp(-ar^2/2)$ , dont la portée  $a$  est optimisée. Les éléments de matrice font appel à la fonction erreur :

$$\begin{aligned} t(a) &= \langle -\Delta \rangle = \frac{3a}{2}, \\ p(a) &= \langle v(r) \rangle = \frac{2\sqrt{a}}{\sqrt{\pi}} - \exp\left[\frac{1}{4a}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{1}{2\sqrt{a}}\right]. \end{aligned} \quad (7.19)$$

Noter que l'approximation variationnelle ne démontre la liaison que pour  $G \gtrsim 2.71$ . Dans la limite de faible liaison, il est essentiel de reproduire le bon comportement asymptotique !

Le miracle est que tout est dans ces deux courbes, même pour  $N > 2$ . Si on choisit des coordonnées de Jacobi (2.10), l'hamiltonien débarrassé du mouvement du centre de masse s'écrira

$$-\sum_{i=1}^{N-1} \Delta_i - G \sum_{i < j} v(r_{ij}). \quad (7.20)$$

La fonction d'onde d'essai  $\prod_{i=1}^{N-1} \Psi_a(\mathbf{x}_i)$  qui généralise la gaussienne unique précédente donnera une borne supérieure

$$\tilde{\epsilon}_N = \min_a [(N-1)t(a) - N(N-1)Gp(a)/2], \quad (7.21)$$

qui sera d'autant meilleur que  $N$  est grand et vérifie

$$\tilde{\epsilon}_N(G) = (N-1)\tilde{\epsilon}_2(NG/2), \quad (7.22)$$

Par ailleurs, avec le même facteur  $(N-1)$  pour l'énergie et  $N/2$  pour le couplage, l'énergie exacte devient une borne inférieure

$$\epsilon_N(G) \geq \frac{N}{2} \epsilon_2[(N-1)G], \quad (7.23)$$

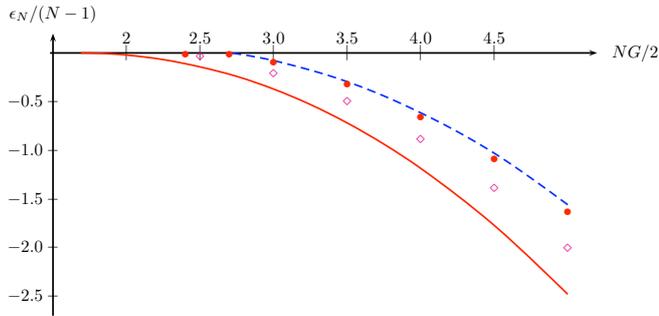


FIGURE 24.  $\epsilon_N/(N-1)$ , where  $\epsilon_N$  is the  $N$ -body energy problem as a function of  $GN/2$ , where  $G$  is the coupling. Solid curve : exact 2-body energy  $\epsilon_2$  which is also a lower bound to  $\epsilon_N/(N-1)$  for  $N > 2$ . Dashed curve : Gaussian variational approximation  $\tilde{\epsilon}_N/(N-1)$ , valid for any  $N$ .  $\diamond$  : variational hyperscalar approximation  $\bar{\epsilon}_3/2$  for the 3-body case.  $\bullet$  : hyperscalar approximation  $\bar{\epsilon}_{12}/11$  for the 12-body case.

On voit l'encadrement de l'énergie sur la Fig. 24

Sur la figure sont aussi portés les résultats de l'approximation dite « hyperscalaire » : on cherche la meilleure fonction  $F(\rho)$  de l'hyperrayon défini comme

$$\rho^2 = \mathbf{x}_1^2 + \dots + \mathbf{x}_{N-1}^2, \quad (7.24)$$

première étape d'un développement systématique en ondes partielles dans un espace de dimension  $3(N-1)$  où la variable  $\boldsymbol{\xi} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1}\}$  est décrit en coordonnées sphériques.

Si  $F(\rho) \propto \exp(-a\rho^2)$ , on retrouve le produit de gaussiennes précédent. En optimisant  $F$ , on améliore forcément la borne supérieure.

On peut montrer que  $u(r) = r^{L+1}F(r)$  vérifie l'équation différentielle

$$u''(r) + \left[ \bar{\epsilon} - \frac{L(L+1)}{r^2} + G \frac{N(N-1)}{2} v_{00}(r) \right] u(r) = 0, \quad (7.25)$$

avec  $L = 3(N-2)/2$  qui est un moment orbital effectif, et la projection du potentiel

$$v_{00}(r) = \frac{\int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin^n \theta v(r \cos \theta) d\theta}{\int_0^{\pi/2} \cos^2 \theta \sin^n \theta d\theta}, \quad (7.26)$$

où  $n = 3N - 7$ .

#### D. Borne optimisée

#### E. Exercices

##### 1. Somme des énergies

Généraliser (7.2) à la somme des  $n$  premiers niveaux de nombres quantiques donnés.

#### 2. Borne inférieure

Trouver une borne inférieure au premier niveau impair de  $H = 2\mathbf{p}^2 + r^2 - 1/r$ .

#### 3. Précautions

Essayer de trouver une formulation mathématique plus rigoureuse de  $H_3(m) = \sum H_2(2m) \Rightarrow E_3(m) \geq 3E_2(2m)$  en termes d'espace de Hilbert pour les différents hamiltoniens.

#### 4. Inégalités de Hall–Post pour un potentiel linéaire

Trouver une limite supérieure et une limite inférieure au fondamental de

$$\sum_{i=1}^3 \mathbf{p}_i^2/2 + \sum_{i<j} r_{ij}. \quad (7.27)$$

## VIII. LIAISONS BORROMÉENNES

### A. Définition

Les princes Borromée avaient pour symbole les anneaux de la Fig. 1, un classique des cours de topologie. Ils se signifiaient entre eux et surtout aux autres si chacun n'avait qu'une autorité limitée, leur union les rendaient très puissants. Le terme de « liaison borroméenne » a été utilisé en physique nucléaire pour désigner les noyaux à sous-systèmes instables et a été ensuite étendu à d'autres domaines.

Le cas le plus simple est  ${}^6\text{He}$ , qu'on peut considérer en bonne approximation comme  $\alpha - n - n$  : ni le dineutron  $(n, n)$ , ni  ${}^5\text{He}$  ( $\alpha, n$ ) ne sont liés, mais  ${}^6\text{He}$  l'est. Il y d'autres exemples.

En physique quantique, la possibilité de telle liaison est connue depuis le célèbre travail de Thomas sur la portée des forces de Yukawa. En 1935, Thomas considère différents modèles et compare l'énergies à deux corps,  $E_2$  et celle à trois corps,  $E_3$ , constate que pour une portée  $\mu^{-1} \rightarrow 0$ ,  $E_3/E_2 \rightarrow \infty$ , et conclut que le méson de Yukawa doit avoir une masse qui ne peut excéder 200 MeV !

Si on raisonne en couplage, à portée donnée, le raisonnement de Thomas se traduit ainsi : à grand couplage  $g$ ,  $E_2$  et  $E_3$  existent, mais si  $g \searrow$ , on se rapproche du seuil  $g_2$  de liaison à deux corps (3.14) tandis que  $E_3$  est finie. On a donc  $E_3/E_2 \rightarrow \infty$ , Mais pour  $g < g_2$ , pendant un certain temps la liaison à trois corps subsiste, parce que son seuil  $g_3$  est tel que  $g_3 < g_2$  !

Prenons l'exemple de  $v(r) = -g \exp(-r)$ , avec des masses  $m = 1$ . On calcule rapidement  $g_2 \simeq \dots$ . Un premier calcul variationnel à trois corps peut reposer sur une fonction d'onde

$$\psi = \exp[-a(r_{12} + r_{23} + r_{31})], \quad (8.1)$$

dont les éléments de matrice sont déjà connus, voir (4.12). On trouve facilement  $g_3 \leq 1\dots$ , qu'on pourrait abaisser avec une fonction d'onde plus raffinée.

Le phénomène se poursuit, si on compare le couplage  $g_4$  requis pour lier 4 bosons, on trouve  $g_4 < g_3$ , et plus généralement  $g_N < g_{N-1}$ .

### B. Limite rigoureuse au rapport de couplages

Fleck et al. [52, 53] ont utilisé la décomposition de Hall et Post, non pas pour en déduire des inégalités entre énergies à  $g$  données, mais des inégalités entre couplages limites  $g_N$  à énergie  $E \rightarrow 0$  donnée. Le plus simple est qu'à partir de (7.12)

$$\begin{aligned}\tilde{H}_N(m, g) &= \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + g \sum_{i < j} V(r_{ij}), \\ \tilde{H}_3(m, g) &= \sum_i \tilde{H}_2^{(i)}(3m/2, g),\end{aligned}\quad (8.2)$$

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

$$g_3 \geq \frac{3}{2} g_2, \quad (8.3)$$

qu'on généralise facilement en

$$2g_2 \leq 3g_3 \leq 4g_4 \dots \leq N g_N \dots \quad (8.4)$$

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

### C. La limite confrontée aux observations

Le domaine de liaison borroméenne a été étudié en particulier par Goy et al. [53], et par Moszkowski et al. [54]. 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.

### D. Le cas des fermions

Comme pour les inégalités de Hall et Post, la difficulté est d'interpréter des identités comme

$$\tilde{H}_N(m, g) = \sum_i \tilde{H}_{N-1}^{(i)} \left( m \frac{N(N-2)}{N-1}, \frac{g}{N-2} \right) \quad (8.5)$$

pour des fermions. Si on connaît le spectre fermionique de  $\tilde{H}_{N-1}$ , les fonctions d'onde correspondantes sont assez éloignées de celles de  $\tilde{H}_N$ , qui subissent beaucoup plus de contraintes. Voir cependant les contributions [55].

Il est donc difficile de prédire de manière très générale des inégalités entre constantes de couplage critiques pour des fermions. Mais les fermions donnent lieu à des liaisons borroméennes. D'abord, pour de petits nombres, les degrés de liberté de spin, isospin ou couleur, etc., peuvent endosser l'antisymétrie et permettre à la fonction d'onde d'espace de se comporter comme pour des bosons sans spin.

D'autre part, des gens courageux ont calculé des états liés de fermions, en tenant compte des contraintes d'antisymétrisation, en particulier pour  ${}^3\text{He}_n$ . Nous savons déjà que le trimère bosonique  ${}^4\text{He}_3$  est presque borroméen, avec un dimère  ${}^4\text{He}_2$  à peine lié. Mais pour  ${}^3\text{He}$ , c'est plus difficile. À cause de leur masse plus légère, deux  ${}^3\text{He}$  ne peuvent se lier (avec spin singlet) dans le même potentiel qui lie à peine deux  ${}^3\text{He}$ . On a calculé le fondamental de  ${}^4\text{He}_n$  pour  $n = 3, 4, \dots, 12, \dots, 25, \dots$ , sans trouver d'état lié. Toute personne censée aurait arrêté bien avant, mais des physiciens audacieux ont flairé que l'histoire ne s'arrêtait pas là, ils ont continué et obtenu la liaison pour  $n \geq 29$  ! Voir par exemple [56–62] pour l'étude des systèmes  ${}^3\text{He}_n$  isolés ou mélangés à de  ${}^4\text{He}$ .

### E. Liaisons borroméennes avec un potentiel coulombien

Le titre de cette sous-section peut sembler paradoxal. Avec un potentiel coulombien ou similaire, il n'y a pas de couplage critique. Pour  $v = -\alpha/r$ , les énergies sont toutes proportionnelles à  $\alpha^2$ . On ne peut donc parler de seuil de couplage, ni a fortiori distinguer un seuil de couplage à trois corps d'un seuil de couplage à deux corps. On bien l'attraction domine, et on a une liaison  $\forall \alpha$ , ou bien on n'a pas de liaison.

Mais, comme le raconte Daudet aux enfants, (« Il ferma la porte à double tour. Malheureusement, il avait oublié la fenêtre. . . »), il y a parfois une autre solution. Ici, puisqu'on ne peut pas jouer sur les couplages, on peut essayer les rapports de masse ! Considérons  $(M^+, m^-, m^-)$ . On démontre [37] que la liaison requiert

$$0.698 \lesssim \frac{M}{m} \lesssim 1.634. \quad (8.6)$$

D'un autre côté, la molécule  $(M^+, m^+, M^-, m^-)$  reste stable [63, 64] si

$$\frac{1}{2.2} \lesssim \frac{M}{m} \lesssim 2.2, \quad (8.7)$$

(les deux limites sont inverses l'une de l'autre par conjugaison de charge), et on constate l'existence d'une zone borroméenne près de  $M/m = 2$  [65], où la molécule est liée sans qu'aucun sous-système à trois corps ne le soit. Autrement dit, on ne peut pas fabriquer la molécule en apportant les constituants un à un. En principe, on devrait pouvoir envisager de fabriquer cette molécule en mélangeant dans un trappe des protons, des antiprotons, des deutérons et des antideutérons.

## F. Problème inverse de la liaison borroméenne

Si trois particules peuvent se lier sans que les paires ne le soient, on peut se demander si, inversement, un système dont toutes les paires sont liées donne automatiquement un état lié.

Des résultats non publiés ont été obtenus par J.L. Basdevant. Gridnev a obtenu le résultat suivant : Avec des forces binaires attractives  $v_{ij}(r_{ij}) < 0$ , si un système est fait de deux sous-ensembles  $A$  et  $B$ , si  $A$  et  $B$  sont liés, avec les énergies de liaison (comptées positivement)  $E_A$  et  $E_B$ , et s'il existe au moins un élément  $i \in A$  et un élément  $j \in B$  qui forme un état lié  $(i, j)$ , avec une énergie  $\epsilon_{ij}$ , alors le système est stable par rapport à une dissociation complète, avec une énergie de liaison

$$E \geq E_A + E_B + \epsilon_{ij} . \quad (8.8)$$

Ce qui signifie que la dissociation spontanée en  $A + B$  est énergiquement interdite. Noter que ce résultat ne garantit pas la stabilité par rapport à toute autre type de décomposition  $A' + B'$  qui pourrait constituer un seuil plus bas que  $A + B$ .

Prenons le cas de quatre particules différentes mais de même masse prise comme unité. Soit  $A = \{1, 2\}$  et  $B = \{3, 4\}$ . Les potentiels  $v_{ij}$  sont tous attractifs, mais on impose seulement la liaison des paires  $A$ ,  $B$  et  $\{3, 4\}$ . On va voir que le résultat n'est pas tout-à-fait immédiat. Les coordonnées de Jacobi, et les moments conjugués qui viennent d'abord à l'esprit sont

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 , & \mathbf{p}_x &= \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{2} , \\ \mathbf{y} &= \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3 , & \mathbf{p}_y &= \frac{\mathbf{p}_4 - \mathbf{p}_3}{2} , \\ \mathbf{z} &= \frac{\mathbf{r}_3 + \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{2} , & \mathbf{p}_z &= \frac{\mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2}{2} , \end{aligned} \quad (8.9)$$

qui permettent d'écrire

$$H = H_A + H_B + \frac{\mathbf{p}_z^2}{2} + v_{13} + v_{14} + v_{23} + v_{24} . \quad (8.10)$$

à revoir On remarque que  $\mathbf{p}_z$  est conjugué de  $\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1$ , mais le groupement  $h = \mathbf{p}_z^2/2 + v_{13}$  a des énergies plus hautes que  $h_{13} = \mathbf{p}^2 + v_{13}(r)$  qui a pour niveau fondamental  $\epsilon_{13}$ , parce que la masse est plus élevée (d'un facteur 2).

Donc

$$H \leq H_A + H_B + h_{13} , \quad (8.11)$$

mais ce genre d'inégalité entre opérateurs sert plutôt à établir des bornes inférieures, comme nous l'avons fait pour les

inégalités de Hall et Post. La méthode de Gridnev consiste plutôt à prendre comme fonction d'onde d'essai

$$\Psi = \psi_A(\mathbf{r}_{12})\psi_B(\mathbf{r}_{34})\phi(\mathbf{r}_{12}) , \quad (8.12)$$

produit des trois fonctions d'onde des systèmes que l'on sait liés. L'énergie cinétique est écrite à revoir

## IX. STABILITÉ CRITIQUE EN PHYSIQUE NUCLÉAIRE

### A. Considérations générales

On observe clairement deux régimes dans les noyaux. D'une part les systèmes assez bien liés, comme le Fer ou la matière nucléaire, avec une énergie de plusieurs MeV par nucléon. Ces états sont assez bien décrits par des modèles de type Hartree–Fock, et ses développements (Brückner–HF, HF–Bogolioubov, etc.)

Il y a aussi, au départ et aux marges du spectre, des systèmes à la limite extérieure de la liaison (paire neutron–neutron) ou bien très peu liés. Le deutéron n'a que 2,2 MeV de liaison,  $^{11}\text{Be}$  seulement 0,5 MeV par rapport au seuil  $^{10}\text{Be} + n$ . Ces systèmes s'étudient avec des méthodes différentes. Par exemple, le noyau  $^6\text{He}$  peut être décrit par des équations de Faddeev avec un cœur  $\alpha$  figé.

Ne concluons pas trop vite qu'il y a deux sortes de physiciens nucléaires : les soutiers, avec leurs gros programmes Hartree–Fock et leur langage technique pour les noyaux bien liés, et d'une autre côté les artistes qui s'occupent des états à liaison évanescence. De nouvelles approches de la structure des noyaux essaient de décrire les deux sortes de situation dans un formalisme unifié.

### B. Forces nucléaires et criticalité

Dès le départ, construire une théorie des forces nucléaires qui assure à la fois la cohésion des noyaux et leur désintégration était une entreprise délicate. Il faut de l'attraction, mais une attraction modérée, car dans les noyaux les plus liés, la liaison n'excède pas quelques MeV par nucléon. Cette attraction doit aussi être sélective, car si le système proton–neutron donne lieu à une faible liaison ( $E \simeq -2.2$  MeV pour le deutéron, mais le système proton–proton n'est pas lié. Il n'est étonnant dès lors que des états liés de façon très critique apparaissent.

Entre les premiers travaux de Yukawa et la découverte des mésons  $\pi$ , bien des questions ont été soulevées : quels sont les états de charge du pion, quelle est la masse du pion, etc. ?

Sur ce dernier point, la contribution de Thomas [66] a été remarquable, surtout quant au sujet de ce cours. Thomas étudia comment variait le rapport de l'énergie à deux corps,  $E_2$  et de l'énergie à trois corps  $E_3$ , en fonction de la portée de l'interaction. Il observa l'augmentation spectaculaire de  $E_3/E_2$  quand la portée devient plus courte, et conclut que la masse du pion ne devait probablement pas dépasser 200 MeV. Ce travail anticipe la découverte des liaisons borroméennes.

### 1. L'isospin

Très tôt, on a cherché à faire l'économie de trois potentiels : proton–proton, proton–neutron et neutron–neutron. Une des suggestions les plus intéressantes était de n'attribuer de force nucléaire qu'au système proton–neutron. On comprend ainsi le rôle essentiel des neutrons pour lier les noyaux. Malheureusement, les expériences de diffusion montrent bien que l'interaction proton–proton dévie du potentiel coulombien à courte distance. Le formalisme de l'isospin n'introduit que deux potentiels, un pour  $I = 0$  et un autre pour  $I = 1$ , si bien que

$$\begin{aligned} V(pp) &= V(nn) = V(I = 1) \\ V(pn \rightarrow pn) &= \frac{V(I = 1) + V(I = 0)}{2}, \\ V(pn \rightarrow np) &= \frac{V(I = 1) - V(I = 0)}{2}. \end{aligned} \quad (9.1)$$

La théorie conventionnelle des forces nucléaires, en termes d'échanges de mésons, mélange subtilement les échanges isoscalaires, qui donnent la même contribution à  $V(I = 1)$  et  $V(I = 0)$ , et les échanges isovectoriels ( $\pi$ ,  $\rho$ , ...) qui y contribuent avec des signes et intensités différents. Ainsi une interaction peut-elle être suffisamment attractive pour produire un état lié, mais d'autres configurations d'isospin ne seront pas liés.

### 2. Le spin

Un autre levier qui permet aux forces nucléaires de ne pas être universellement attractive est leur dépendance en spin. Par exemple, le potentiel d'onde S dû à l'échange du pion contient un facteur  $\sigma_1 \cdot \sigma_2$  qui vaut  $-3$  pour un état singlet de spin  $S = 0$  et  $+1$  pour  $S = 1$ .

### 3. Le danger des compensations

Si on décortique un potentiel nucléon–nucléon du marché, au moins sa partie de longue portée, on observe beaucoup de compensations entre termes attractifs et répulsifs, qui résultent en une interaction assez modérée. Une conséquence est que des dosages différents arrivent sensiblement à la même description des données. Il faut aller chercher des observables de spin subtiles pour distinguer des potentiels à peu près équivalents.

Une autre conséquence est que les extrapolations de ces potentiels donnent des résultats assez différents. Les mêmes échanges de mésons décrivent aussi des interactions nucléon–hypéron ou l'interaction nucléon–nucléon. Mais certains couplages sont modifiés par des facteurs d'isospin généralisés ou changeant carrément de signe, et les compensations deviennent parfois des cohérences, avec la prédiction d'interactions très fortes pour certains systèmes, qu'on a l'impression de ne pas contrôler.

### 4. Le cœur plus ou moins dur

Alors que les échanges de mésons, dans la théorie de Yukawa généralisée, arrivent assez bien à reproduire la partie de longue et moyenne portée de l'interaction, il faut pour  $r \lesssim 0.8$  fm introduire une modification brutale pour tenir compte de la répulsion. Dans certains modèles historiques [67], un cœur dur était introduit. Plus récemment, par exemple dans [68] le cœur a une hauteur fini et est raccordé continûment à la longue portée.

Ce cœur a une importance en physique nucléaire : il assure la saturation, et par exemple, la distance moyenne entre nucléons est à peu près la même dans les petits et les gros noyaux. Il empêche une fusion des nucléons, qui entraînerait une mise en commun de leurs quarks.

Du point de vue théorique, les modèles à échange de mésons ont du mal à reproduire cette répulsion. L'échange du méson vectoriel neutre  $\omega$  donne bien une répulsion. Mais il faudrait un couplage irréaliste pour que le cœur soit décrit de façon satisfaisante. Dans les années 70–80, des études (qui impliquent des calculs assez longs) ont permis de décrire le cœur à partir de quarks. L'idée est que si les nucléons tente de se pénétrer, les quarks de l'un occupent les mêmes positions et nombres quantiques que ceux de l'autre, et que le principe d'exclusion provoque une répulsion.

Le problème est quand dans l'hypothèse optimiste où la description de la longue et moyenne portée en termes de mésons échangés, et celle du cœur en termes de quarks, seraient toutes les deux satisfaisantes, on se retrouverait avec une théorie hybride, et surtout mal contrôlée dans la région de transition, qui est la plus importante pour les noyaux.

### 5. Forces nucléaires et théories effectives

Les potentiels de Bonn ou de Paris (du nom des villes où les groupes travaillaient) dans les années 70 correspondaient à un certain aboutissement, avec le maximum d'effort sur les échanges légers qui donnent la partie périphérique du potentiel et un traitement purement phénoménologique de la partie de courte portée.

La compétition s'est développée dans deux directions. D'une part des potentiels beaucoup plus phénoménologiques (seul l'échange du pion est imposé pour la queue du potentiel), mais qui décrivent très bien les données de la diffusion. Un exemple est le potentiel d'Argonne AV18 [69].

Une autre direction est la construction de théories effective pour décrire les interactions hadroniques à basse énergie. Pour l'application aux forces nucléaires, voir, par exemple, [70]. Sommairement ... (développer un peu ici).

### 6. Forces à trois et quatre corps

C'est un problème récurrent que les potentiels nucléon–nucléon, si réalistes soient-ils, ne parviennent pas à décrire de manière satisfaisante les noyaux légers. Il faut introduire des forces à trois corps, voire à quatre corps. Il y a des modèles

théoriques. Par exemple, le nucléon #1 échange un pion avec le nucléon #2, qui est promu en résonance  $\Delta$ , puis se désexcite en émettant un pion en direction du nucléon #3. Voir, par exemple, [71, 72]. On trouve aussi des modèles plus empiriques.

Mais la phénoménologie est un peu délicate. Pour une revue, voir par exemple (Erice 08). Si on ajuste la force à trois corps pour reproduire la liaison de  ${}^3\text{H}$  ou de  ${}^3\text{He}$ , il manque encore de la liaison pour  $\alpha = {}^4\text{He}$ . De plus, certains effets de spin de la diffusion de nucléons sur noyaux légers sont mal reproduits (Erice 08), ce qui suggère une dépendance en spin de ces forces à trois ou quatre corps.

Il faut noter cependant [70] que les théories effectives traitent simultanément les forces à deux corps et les forces à plusieurs corps. On comprend pourquoi ces dernières ne sont dominantes, mais pas non plus vraiment négligeables.

### C. Quelques noyaux légers

#### 1. Le deutérium

Voir sous-section III A.

#### 2. ${}^3\text{H}$ et ${}^3\text{He}$

Ces noyaux ne sont pas borroméens, car  $(p, n)$  est lié. Mais ils sont “Samba” ou “Tango” (voir la définition par Frederico) dans le sens que les deux protons de  ${}^3\text{He}$  ne peuvent aligner simultanément leur spin avec celui du neutron, et que la paire  $(p, p)$  n’est pas liée.

#### 3. ${}^4\text{He}$

La particule  $\alpha$  correspond à un optimum, avec deux paires  $(p, n)$  qui peuvent anti-aligner leurs spins et pour faire un spin total  $J = 0$ , les deux protons d’un part et les deux neutrons peuvent être souvent dans l’état singlet qui leur est favorable.

Cette stabilité exceptionnelle, de plus de 7 MeV/nucléon, a des conséquences : dans les réactions de fission, c’est souvent une particule  $\alpha$  qui est éjectée ; certains noyaux pairs-pair, comme  ${}^8\text{Be}$ ,  ${}^{12}\text{C}$  ou  ${}^{16}\text{O}$  sont parfois décrits en première approximation comme une collection d’un petit nombre de particules  $\alpha$ . Le potentiel  $\alpha - \alpha$  comporte un cœur dur, car quand les deux  $\alpha$  tentent de se pénétrer, le principe de Pauli entre leurs constituants entre en œuvre.

#### 4. ${}^5\text{He}$

Cette stabilité exceptionnelle de  $\alpha$  a pour contrepartie que le potentiel exercé à longue distance sur un nucléon est assez faible. Par exemple un terme “élémentaire”  $v(r) \sigma_1 \cdot \sigma_2$  devient  $v(r_{1A}) \sigma_1 \cdot (\sum_{i \in A} \sigma_i)$  pour le potentiel  $1 - A$ , et il y a annulation pour un noyau de spin  $J_A = 0$ . La voie de sortie est de polariser le noyau, et de faire que la sommation

précédente ne s’applique plus, car les  $v(r_{1i})$  sont différents. Mais un noyau compact et bien lié est difficile à polariser. C’est ce qui explique que la particule  $\alpha$  n’arrive pas à lier un neutron. Autrement dit  ${}^5\text{He}$  est instable.

#### 5. ${}^6\text{He}$

C’est le plus connu des systèmes borroméens. Dans l’approximation justifiée d’une structure  $\alpha - n - n$ , aucun des sous-systèmes à deux corps n’est lié, mais  ${}^6\text{He}$  est lié.

Si on veut des données précises, il faut apprendre à lire les tables de physique nucléaire, où sont indiquées les valeurs de l’excès de masse par rapport à une référence où  ${}^{12}\text{C} = 12$ . On a  $\delta(n) = 8071$  (en keV), et  $\delta(\alpha) = 2425$ , soit un seuil  $\alpha + n + n = 18\,567$  keV tandis que  $\delta({}^6\text{He}) = 17595$ , soit une liaison

$$B({}^6\text{He}) = 0,972 \text{ MeV} , \quad (9.2)$$

assez faible.

#### 6. ${}^7\text{H}$

Le dernier venu des noyaux légers à excédent de neutrons. Le plus exotique de tous si on évalue le rapport neutron/proton. En fait, il s’agit d’une résonance, située 0,57 MeV au-dessus du seuil de dissociation en  ${}^3\text{H}$  et quatre neutrons. Il a été observé en bombardant une cible de  ${}^{12}\text{C}$  par du  ${}^8\text{He}$ , un succès pour la stratégie des faisceaux radioactifs.

#### 7. ${}^7\text{He}$

Le seuil  ${}^6\text{He} + n = 25666$  est plus bas que le fondamental de  ${}^7\text{He}$  à 26101, qui est donc instable par dissociation spontanée.

#### 8. ${}^8\text{He}$

Par contre, le seuil  ${}^6\text{He} + n + n = 33737$  est plus haut que le fondamental de  ${}^8\text{He}$  à 31598, qui est donc stable, avec une liaison non négligeable

$$B({}^8\text{He}) = 2,139 \text{ MeV} . \quad (9.3)$$

Quand ce noyau a été découvert (ce serait à Los Alamos, et il s’agirait peut-être du  ${}^9\text{He}$ ), Bethe se serait écrié<sup>10</sup> : « A drop of neutron star ». Récemment, il y a eu des indications à GANIL de l’existence d’un tétraneutron, malheureusement non confirmée. On voit que l’existence du  ${}^8\text{He}$  laisse ouverte la possibilité d’une telle liaison de quatre neutrons, même si des calculs poussés, avec des potentiels nucléaires réalistes, ne confinent pas [73].

10. Kaml Seth, communication privée

## X. STABILITÉ CRITIQUE DES HADRONS

### A. Confinement, stabilité et règle de Zweig

On se peut évidemment parler de stabilité critique pour une paire quark–antiquark soumise à un confinement linéaire, pas plus que de régime critique pour une particule placée dans un puits d’oscillateur harmonique. Les quarks ne peuvent se séparer.

Mais le potentiel croissant linéairement n’est qu’une description approchée de la dynamique. Quand on tire sur la « corde » qui schématise ce potentiel (voir Fig. 25), l’énergie peut devenir suffisante pour créer une paire  $q\bar{q}$  de quarks légers, et le méson initial peut se dissocier en deux mésons légers. Pour un quarkonium lourd initial,  $(Q\bar{Q})$  où  $Q$  désigne un quark  $c$  ou  $b$ , le processus  $(Q\bar{Q}) \rightarrow (Q\bar{q}) + (\bar{Q}q)$  respecte la règle de Zweig, et est donc assez facile. À espace de phase équivalent, ce processus s’effectue avec la durée de vie typique des interactions fortes, c’est à dire très facilement. Par contre les processus du genre  $(Q\bar{Q}) \rightarrow (q\bar{q}) + (\bar{q}q)$ , où les quarks lourds s’annihilent et des quarks légers sont créés, sont fortement supprimés et ne donnent que des largeurs étroites.



FIGURE 25. Représentation schématique du confinement d’un quark et d’un antiquark dans un méson.

L’observation que la désintégration  $\phi \rightarrow K + \bar{K}$  est beaucoup plus facile que  $\phi \rightarrow \pi + \pi + \pi$ , alors que les pions sont beaucoup plus légers, a été cruciale pour l’élaboration du modèle des quarks. Zweig (qui parlait d’« aces ») a imaginé que le  $\phi$  contenait de l’étrangeté cachée (étrangeté  $S = -1$  et  $S = +1$ ). Ce que personne n’avait vraiment anticipé, c’est que la règle de Zweig marcherait aussi strictement pour des quarkonia plus lourds : quand le charmonium a été découvert en 1974, tout le monde a été surpris par sa très petite largeur de désintégration.



FIGURE 26. Désintégration du  $\phi$  en  $\pi\rho$  (suivie de  $\rho \rightarrow \pi\pi$ ) vs.  $K\bar{K}$

On peut donc parler pour les quarkonia lourds d’un seuil d’éclatement en deux mésons à saveurs lourdes opposées, et de stabilité selon que ce seuil est ou non permis par la conservation de l’énergie. De ce point de vue, on constate une évolution quand on passe du charmonium, découvert en 1974 au bottomonium découvert en 1977. Dans le second cas, il y a plus d’états sous le seuil  $(Q\bar{q}) + (\bar{Q}q)$ . On peut le comprendre facilement en s’appuyant sur l’hypothèse d’indépendance de saveur et sur les propriétés simple des spectres de type Schrödinger.

Un mot de l’indépendance de saveur. Elle stipule que le couplage des quarks aux gluons se fait par la couleur, et non par une propriété liée à la masse. Donc en première approximation (on néglige les effets de spin, les corrections de reculs indépendantes du spin comme les termes de Darwin, etc.), le potentiel est le même quand on remplace un quark par un autre, de même qu’en physique des atomes exotiques, le même potentiel coulombien s’applique quand on remplace un électron par un muon  $\mu^-$ , un kaon  $K^-$  ou un antiproton.

Pour les mésons de type « lourd–léger »,  $(Q\bar{q})$ , la masse réduite qui gouverne la dynamique interne est dominée par le léger, et change très peu du charme à la beauté. De même, les niveaux électroniques de H et D sont très proches. Abstraction faite des masses constituantes, les énergies de seuil sont presque égales pour  $(c\bar{c})$  et  $(b\bar{b})$ . Mais le Upsilon,  $(b\bar{b})$  est lié plus profondément que le  $J/\psi$ ,  $(c\bar{c})$ , et possède plus d’excitations stables. On le voit sur la Fig. 27.

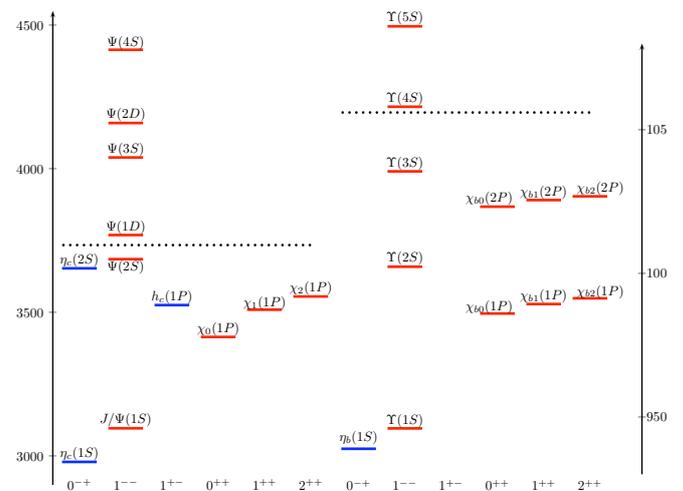


FIGURE 27. Comparaison des spectres du charmonium et du bottomonium.

C’est un exercice qu’il a fallu résoudre d’urgence en 1977 entre la découverte du  $\Upsilon$  et sa présentation aux conférences de l’été (Budapest, etc.) : quel serait le potentiel qui donnerait exactement les mêmes espacements de niveaux pour  $(c\bar{c})$  et  $(b\bar{b})$ . En fait c’est un potentiel logarithmique, comme on peut le vérifier à titre d’exercice.

La cruauté, c’est que des physiciens, essayant d’anticiper sur la découverte de  $(b\bar{b})$ <sup>11</sup>, avaient essayé le potentiel logarithmique, ajusté les constantes  $A$  et  $a$  de  $V(r) = A \ln(r/a)$  au charmonium et appliqué à des masses plus lourdes sans se rendre compte que le spectre était exactement décalé par une constante !

Noter que pour  $(b\bar{c})$  et pour les baryons lourds  $(QQQ)$  la

11. L’existence d’un doublet de quarks  $(b, t)$  est une exigence de nombre de théories pour avoir le même nombre de quarks que de leptons. Le lepton  $\tau$  avait clairement été identifié en 1977, et tout portait à croire qu’il était associé à un neutrino  $\nu_\tau$  différent des autres neutrinos.

stabilité est absolue (à part les interactions faibles) en dessous des seuils respectifs  $(b\bar{q}) + (\bar{c}q)$  et  $(QQq) + (\bar{q}Q)$ .

### B. Existe-t-il des multiquarks stables ?

La question a été posée depuis le début du modèle des quarks, et est soulevée régulièrement. La situation expérimentale a connu des hauts et des bas, avec l'annonce de candidats, qui n'ont pas été confirmés. Il y eut la vague du baryonium, et plus récemment celle du pentaquark, avec une floraison de spéculations théoriques trop hâtives. Finalement, ce domaine de la physique hadronique souffre d'un certain discrédit.

Pourtant il s'agit d'un problème fondamental. Imaginons la physique atomique s'arrêtant à l'Hélium, la physique moléculaire restreinte aux systèmes mono- et di-atomiques, la physique nucléaire restreinte aux noyaux légers ! Le fait que les quarks sont confinés implique-t-il qu'ils ne se manifestent qu'en structures minimales. De toutes façons, l'existence ou non de multiquarks stables, sous le seuil de dissociation, est l'occasion d'étudier l'interaction hadron-hadron d'un point de vue microscopique, à partir du contenu en quarks.

La physique nucléaire est un peu singulière, avec une floraison de noyaux, mais qui ne sont pas de vrais multiquarks. À cause du cœur dur, les nucléons ne se pénètrent pas et gardent leur contenu en quarks. Il a été souvent remarqué que le mécanisme de Yukawa n'est pas restreint aux nucléons, et que l'échange du pion peut donner des forces attractives entre d'autres hadrons. C'est le cas en particulier du système  $D\bar{D}^* + D^*\bar{D}$ , pour lequel une liaison avait été envisagée par Voloshin, Tôrnqvist, Manohar, Karl, etc. Ce fut donc pour eux une bonne surprise que la découverte du  $X(3872)$  juste aussi de ce seuil. Mais ce modèle dit « moléculaire » pose problème, car il n'y a pas de cœur dur entre  $D$  et  $\bar{D}^*$ . Les forces de courte portée jouent donc un rôle, et celles-ci résultent de l'interaction directe des quarks. C'est pourquoi le problème de la stabilité a aussi été abordé en extrapolant à 4 ou plus de constituants les modèles décrivant les mésons comme paires quark-antiquark et les baryons comme faits de trois quarks.

Le domaine le plus chaud reste celui des mésons scalaires légers, dans la zone de masse 1 – 2 GeV. L'abondance des états (ou du moins des candidats), les propriétés de production et de désintégration, etc., suggèrent une structure  $(q^2\bar{q}^2)$  assez présente, voire dominante. Mais nous sommes là dans un domaine délicat, la dynamique est plus compliquée que pour les quarks lourds, et les données expérimentales sont plus difficiles à interpréter, du fait de la largeur des états. Tout ou presque a commencé dans les années 70 quand Jaffe réalisa qu'au moins dans les modèles des sacs de MIT, il est aussi économique de créer une paire  $(q\bar{q})$  supplémentaire que de promouvoir la paire existante dans un état  $P$ . D'où le choix entre deux type de configuration pour un méson scalaire :  $(q\bar{q})$  avec spin  $s = 1$  et moment orbital  $\ell = 1$ , ou bien  $(q^2\bar{q}^2)$  avec spin  $s = 0$  et tous les quarks dans l'onde S. Ce calcul a été maintes fois raffiné, avec des modèles plus réalistes, mais aucun consensus n'a jamais émergé sur la nature des mésons sca-

lares légers.

### C. Spéculations sur une liaison chromomagnétique des multiquarks

Un papier à peine postérieur de Jaffe a proposé une configuration beaucoup plus intéressante : un « dilambda » H, de contenu  $(uuddss)$  sous le seuil de dissociation  $\Lambda\Lambda$ . Comme les universitaires de MIT sont très influents et le resteront cet état H a été cherché dans une quinzaine d'expériences, mais sans succès.

Dix ans plus tard, Gignoux et ses collaborateurs, et indépendamment, Lipkin, ont montré que le même mécanisme devrait conduire à la liaison d'un état P (le mot « pentaquark » a été inventé à cette occasion, et il sera repris plus tard dans un autre contexte), de contenu  $(\bar{Q}qqqq)$  où  $qqqq$  désigne  $uuds$ ,  $udds$  ou  $udss$ , en dessous du seuil  $(\bar{Q}q) + (qqq)$ . Comme la force de lobbying réunie de Grenoble et du Weizmann Institute est moins convaincante, le P n'a été cherché que dans une seule expérience, à Fermilab, mais l'analyse n'a pu conclure à son existence.

Le mécanisme est le suivant. Depuis les années 70, le modèle chromomagnétique

$$V_{ss} = -A \sum_{ij} \frac{\delta^{(3)}(\mathbf{r}_{ij})}{m_i m_j} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \tilde{\lambda}_i \cdot \tilde{\lambda}_j, \quad (10.1)$$

mêlant les opérateurs de spin de SU(2) et de couleur de SU(3) arrive à reproduire les écarts hyperfins, entre mésons vecteurs  $s = 1$  et pseudoscalaires  $s = 0$ , et entre baryons de spin  $s = 3/2$  et ceux de spin  $s = 1/2$ . On voit l'analogie avec le terme de Breit-Fermi en QED, et d'ailleurs le modèle le plus populaire est basé sur la partie magnétique de l'échange d'un gluon, auquel cas le couple  $A$  est directement relié à la constante de couplage  $\alpha_s$  de la QCD. Mais (10.1) est un peu plus général.

L'observation de [74] est que si les masses sont égales ainsi que les corrélations  $c_{ij} = \langle \delta^{(3)}(\mathbf{r}_{ij}) \rangle$  universelles, c'est-à-dire les effets concentrés sur l'opérateur chromomagnétique, des cohérences attractives sont observées. Pour le H,

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \tilde{\lambda}_i \cdot \tilde{\lambda}_j \rangle_H - 2 \langle \dots \rangle_\Lambda = \frac{1}{2} [\langle \dots \rangle_N - \langle \dots \rangle_\Delta], \quad (10.2)$$

ce qui donnerait pas moins de 150 MeV de liaison pour le H sous le seuil  $\Lambda\Lambda$  et la même chose pour le P avec un antiquark très massif, sous le seuil fait d'un proton et d'un méson lourd.

Malheureusement, la brisure de SU(3)<sub>f</sub> ne bénéficie ni au H ni au P. De plus les coefficients de corrélation,  $c_{ij}$ , sont beaucoup plus faibles pour les multiquarks que pour les hadrons ordinaires, plus compacts.

### D. Liaison chromoélectrique

Si le chromomagnétisme déçoit, pourquoi ne pas chercher à exploiter la chromoélectricité, c'est-à-dire la partie

indépendante du spin de l'interaction et son caractère universel (indépendance de saveur). À l'approximation non-relativiste (certains arguments survivraient à un traitement relativiste de l'énergie cinétique), on aurait à étudier la stabilité de

$$H_4 = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_4), \quad (10.3)$$

où  $V$  est invariant par rotation, translation, échange des quarks ou des antiquarks, et conjugaison de charge (échange global des quarks et des antiquarks). La forme précise importe peu dans un premier temps, s'il s'agit d'identifier les configurations de masses les plus favorables.

On peut tirer la leçon de la physique atomique. Le fait que la molécule  $\text{Ps}_2$  soit moins liée que  $\text{H}_2$  ne tient pas au caractère coulombien de l'interaction, mais à la distribution de masses moins favorable, et au fait que le positon et le proton ressentent la même force, une sorte d'indépendance de saveur.

Partons d'une configurations à masses égales en physique atomique ou en physique des quarks, et brisons la symétrie matière-antimatière, soit  $(M, M, m, m)$  pour  $(+, +, -, -)$  ou pour  $(Q, Q, \bar{q}, \bar{q})$ . On peut écrire l'hamiltonien précédent comme

$$H_4 = \left[ \frac{m^{-1} + M^{-1}}{4} \sum_i p_i^2 + V \right] + \frac{m^{-1} + M^{-1}}{4} (p_1^2 + p_2^2 - p_3^2 - p_4^2), \quad (10.4)$$

où le premier terme est symétrique (par conjugaison de charge) et le second impair. Raisonnons à masse inverse totale,  $m^{-1} + M^{-1}$ , donnée. Le second terme, selon un principe très général, abaisse l'énergie par rapport au premier terme seul. Mais ici, le miracle est que le seuil reste constant, car il ne dépend que de la masse réduite, dont l'inverse est précisément  $m^{-1} + M^{-1}$ .

Donc en physique atomique,  $\text{H}_2$  est plus liée (et même nettement que  $(\mu^+, \mu^+, \mu^-, \mu^-)$ , qui est une copie à une autre échelle de  $\text{Ps}_2$ , avec  $\mu^{-1}$  masse inverse moyenne de l'électron et du proton.

De même en physique des quarks, tout le monde a constaté que sur un tel modèle, la stabilité de  $(Q, Q, \bar{q}, \bar{q})$  apparaissait, pour une valeur suffisamment grande du rapport de masse  $M/m$ . Tout le problème est de savoir si des quarks charmés ou beaux seront assez lourds.

Les premiers calculs, à partir des années 80, ont utilisé une forme additive de l'interaction. Si  $v(r)$  est un potentiel qui décrit la liaison d'un quark et d'un antiquark dans un quarkonium  $(Q\bar{Q})$ , alors le potentiel d'un baryon ou d'un système multiquark est donné par

$$V = -\frac{3}{16} \sum_{i < j} \tilde{\lambda}_i \cdot \tilde{\lambda}_j v(r_{ij}), \quad (10.5)$$

analogue au  $\sum q_i q_j / r_{ij}$  en physique atomique, mais ici l'algèbre des charges est un peu plus compliquée. Avec ce type d'interaction, et les potentiels  $v$  disponibles, on ne trouve en

général pas de liaison pour  $(cc\bar{q}\bar{q})$  sauf dans un calcul slovène particulièrement poussé. Il est vrai que c'est un calcul à quatre corps très difficile.

Depuis, les idées sur le confinement ont évolués, grâce en particulier aux simulations de QCD sur réseau. IL est désormais établis que si la règle additive vaut pour la partie de courte portée du potentiel, elle ne s'applique pas au terme linéaire responsable du confinement.

Ce qui prévaut aujourd'hui c'est la règle du *parcours minimal*. Le potentiel linéaire  $v(r) = \sigma r$  du quarkonium, voir Fig. 25, correspond à un flux de gluons de section constante reliant le quark à l'antiquark. La croissance linéaire reflète la propriété bien connue que la ligne droite est le plus court chemin d'un point à un autre, ce qui minimise l'énergie des gluons.

Pour trois quarks dans un baryons, on minimise l'énergie gluonique en résolvant le fameux problème des Fermat et Torricelli du réseau minimale entre trois points. Voir Fig. 28.

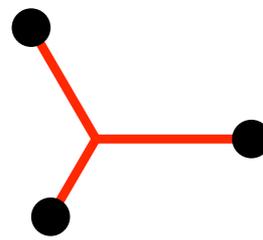


FIGURE 28. Représentation schématique du confinement de trois quarks dans un baryon.

Si le triangle est très aplati, la jonction coïncide avec l'un des sommets. En général, cette jonction est à l'intérieur du triangle et les trois branches font des angles de  $120^\circ$ , même si le triangle n'est équilatéral. Il y a donc une sorte de restauration de symétrie pour l'interaction.

Malheureusement, cet potentiel, appelé parfois « en Y » diffère peu de celui donné par la règle additive (10.5).

Par contre, des différences notables existent dans le secteur des tétraquarks entre cette règle additive et le potentiel de réseau minimal. Ici, ce potentiel s'écrit (en unités où la tension de la corde est 1)

$$U = \min \{ r_{13} + r_{24}, r_{14} + r_{23}, V_4 \}, \quad (10.6)$$

$$V_4 = \min_{a,b} (r_{1a} + r_{2a} + r_{ab} + r_{b3} + r_{b4}),$$

où  $a$  et  $b$  désignent les points de Steiner. Voir figure 29.

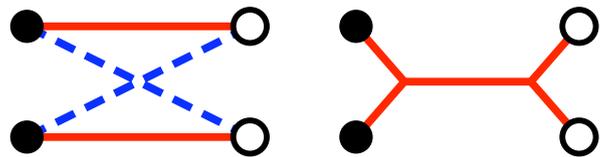


FIGURE 29. Extension du potentiel linéaire à deux quarks et deux antiquarks : flip-flop et arbre de Steiner.

Un premier calcul, par des physiciens nucléaires américains, avait conclu à l'absence d'exotiques avec un tel modèle.

- 
- [1] L. C. Pauling and E. B. Wilson, *Introduction to quantum mechanics : with application to chemistry* (McGraw-Hill, New York, NY, 1935) :104785 :450307 :450307 :450307:450307.
- [2] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Quantum mechanics ; 2nd ed.* (Prentice-Hall, Harlow, 2000) :450307 .
- [3] J. M. Blatt and J. D. Jackson, *Phys. Rev.* **76**, 18 (Jul 1949).
- [4] E. A. Hylleraas and A. Ore, *Phys. Rev.* **71**, 493 (Apr 1947).
- [5] W. Rarita and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **59**, 436 (Mar 1941):113179 :113179 :113179:113179.
- [6] S. De Benedetti, *Nuclear interactions* (Wiley, New York, NY, 1964):113179 :101825 :101825 :101825:101825.
- [7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mécanique quantique : théorie non relativiste*, *Phys. Théor.* (MIR, Moscow, 1967) :101825 .
- [8] R. M. Sternheimer, *Physical Review* **95**, 736 (Aug. 1954).
- [9] A. Dalgarno and J. T. Lewis, *Royal Society of London Proceedings Series A* **233**, 70 (Dec. 1955):85 :85 :85:85.
- [10] K. Yang and M. de Llano, *American Journal of Physics* **57**, 85 (1989), <http://link.aip.org/link/?AJP/57/85/1> :85 :847188 :847188 :847188:847188.
- [11] H. Grosse and A. J. Martin, *Particle Physics and the Schrödinger Equation ; new ed.*, Cambridge monographs on particle physics, nuclear physics, and cosmology (Cambridge Univ., Cambridge, 2005) :847188 .
- [12] M. Klaus and B. Simon, *Annals of Physics* **130**, 251 (Dec. 1980).
- [13] M. Klaus and B. Simon, *Communications in Mathematical Physics* **78**, 153 (Dec. 1980):628052 :628052 :628052:628052.
- [14] J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, *Theoretical nuclear physics* (Springer, New York, NY, 1979) :628052 :104904 :104904 :104904:104904.
- [15] C. J. Joachain, *Quantum collision theory* (North-Holland, Amsterdam, 1975) :104904 .
- [16] P. G. Averbuch, *Journal of Physics A : Mathematical and General* **19**, 2325 (1986), <http://stacks.iop.org/0305-4470/19/2325:2008> :2008 :2008:2008.
- [17] N. N. Khuri, A. Martin, J.-M. Richard, and T. T. Wu, *Journal of Mathematical Physics* **50**, 072105 (2009), <http://link.aip.org/link/?JMP/50/072105/1> :2008 :2007ki :2007ki :2007ki:2007ki.
- [18] M. Combescure, A. Khare, A. Raina, J.-M. Richard, and C. Weydert, *Int. J. Mod. Phys. B* **21**, 3765 (2007), [arXiv:cond-mat/0701006](http://arxiv.org/abs/cond-mat/0701006) :2007ki .
- [19] V. B. Mandelzweig, *Nuclear Physics A* **292**, 333 (Dec. 1977):111931 :111931 :111931:111931.
- [20] S. A. Albeverio, F. Gesztesy, H. Holden, and R. Høegh-Krohn, *Solvable models in quantum mechanics*, Texts and monographs in physics (Springer, New York, NY, 1988) :111931 :885094 :885094 :885094:885094.
- [21] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics ; 2nd ed.* (Pearson, Upper Saddle River, NJ, 2005) :885094 :308811 :308811 :308811:308811.
- [22] F. Mandl, *Quantum mechanics*, Manchester physics series (Wiley, Chichester, 1992) :308811 :308810 :308810 :308810:308810.
- [23] D. Park, *Introduction to quantum theory ; 3rd ed.*, International series in pure and applied physics (McGraw-Hill, New York, NY, 1992) :308810 .
- [24] K. C. Wali, *A quest for perspectives : selected works of S. Chandrasekhar : with commentary* (London : Imperial College Press, 2001 x, 1428 p. In 2 vols. ISBN 1860942016 (set), 2001).
- [25] J. D. Baker, D. E. Freund, R. N. Hill, and J. D. Morgan, *Phys. Rev. A* **41**, 1247 (Feb 1990).
- [26] I. A. Ivanov, *Phys. Rev. A* **51**, 1080 (Feb 1995).
- [27] I. A. Ivanov, *Phys. Rev. A* **52**, 1942 (Sep 1995).
- [28] A. M. Frolov, *Phys. Rev. A* **58**, 4479 (Dec 1998).
- [29] V. I. Korobov, *Phys. Rev. A* **61**, 064503 (Jun. 2000).
- [30] C. D. Lin, *Phys. Rep.* **257**, 1 (Jun. 1995).
- [31] G. W. F. Drake, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 126 (Jan 1970).
- [32] J. Midtdal, *Phys. Rev.* **138**, A1010 (May 1965):1142 :1142 :1142:1142.
- [33] H. Grosse and L. Pittner, *Journal of Mathematical Physics* **24**, 1142 (1983) :1142 .
- [34] A. P. Mills, *Phys. Rev. A* **24**, 3242 (Dec 1981).
- [35] R. Jáuregui and C. F. Bunge, *J. Chem. Phys.* **71**, 4611 (Dec. 1979):2316 :2316 :2316:2316.
- [36] R. N. Hill, *Journal of Mathematical Physics* **18**, 2316 (1977) :2316 .
- [37] J. Mitroy, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **33**, 5307 (2000), <http://stacks.iop.org/0953-4075/33/5307>.
- [38] G. Karl, *Phys. Rev. A* **49**, 799 (Feb 1994).
- [39] K. Varga, J. Usukura, and Y. Suzuki, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1876 (Mar 1998).
- [40] D. B. Cassidy and A. P. Mills, *Nature* **449**, 195 (Sep. 2007).
- [41] J. Hiller, J. Sucher, and G. Feinberg, *Phys. Rev. A* **18**, 2399 (Dec 1978):1995bu :1995bu :1995bu:1995bu.
- [42] S. Fleck and J. M. Richard, *Few Body Syst.* **19**, 19 (1995) :1995bu .
- [43] E. A. G. Armour, J.-M. Richard, and K. Varga, *Phys. Rep.* **413**, 1 (Jul. 2005):1979zs :1979zs :1979zs:1979zs.

- [44] R. A. Bertlmann and A. Martin, Nucl. Phys. **B168**, 111 (1980):1979zs .
- [45] S. Nussinov, Phys. Rev. Lett. **52**, 966 (Mar 1984):1999sx :1999sx :1999sx:1999sx.
- [46] S. Nussinov and M. A. Lampert, Phys. Rept. **362**, 193 (2002), hep-ph/9911532 :1999sx :2008hc :2008hc :2008hc:2008hc.
- [47] C. D. Froggatt and H. B. Nielsen(2008), arXiv:0811.2089[hep-ph] :2008hc :2008fd :2008fd :2008fd:2008fd.
- [48] M. Y. Kuchiev, V. V. Flambaum, and E. Shuryak, Phys. Rev. **D78**, 077502 (2008), arXiv:0808.3632[hep-ph] :2008fd :2008uq :2008uq :2008uq:2008uq.
- [49] J.-M. Richard, Few Body Syst. **45**, 65 (2009), arXiv:0811.2711[hep-ph] :2008uq .
- [50] M. Membrado, A. F. Pacheco, and J. Sañudo, Phys. Rev. A **39**, 4207 (Apr 1989).
- [51] L. Epele, H. Franchiotti, C. García-Canal and A.F. Pacheco, Phys. Lett. **A146** (1990) 507.
- [52] J.-M. Richard and S. Fleck, Phys. Rev. Lett. **73**, 1464 (Sep 1994):1995hr :1995hr :1995hr:1995hr.
- [53] J. Goy, J. M. Richard, and S. Fleck, Phys. Rev. **A52**, 3511 (1995), arXiv:nucl-th/9508024 :1995hr :2000ni :2000ni :2000ni:2000ni.
- [54] S. Moszkowski *et al.*, Phys. Rev. **A62**, 032504 (2000), arXiv:nucl-th/0003026 :2000ni :2000ie :2000ie :2000ie:2000ie.
- [55] O. Juillet, S. Fleck, L. Theußl, J.-M. Richard, and K. Varga, Phys. Rev. B **63**, 073102 (2001), quant-ph/0008048 :2000ie :774002 :774002 :774002:774002.
- [56] D. Bressanini, G. Morosi, L. Bertini, and M. Mella, Few-Body Syst. **31**, 199 (2002) :774002 .
- [57] M. Barranco, J. Navarro, and A. Poves, Phys. Rev. Lett. **78**, 4729 (Jun 1997), <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.4729>.
- [58] R. Guardiola and J. Navarro, Phys. Rev. Lett. **89**, 193401 (Oct 2002), <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.193401>.
- [59] D. Bressanini and G. Morosi, Phys. Rev. Lett. **90**, 133401 (Apr 2003), <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.133401>.
- [60] R. Guardiola and J. Navarro, Phys. Rev. A **71**, 035201 (Mar 2005), <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.71.035201>.
- [61] R. Guardiola and J. Navarro, Phys. Rev. A **68**, 055201 (Nov 2003), <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.68.055201>.
- [62] S. Fantoni, R. Guardiola, and J. Navarro, Phys. Rev. A **70**, 023206 (Aug 2004), <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.70.023206>.
- [63] D. Bressanini, M. Mella, and G. Morosi, Phys. Rev. A **55**, 200 (Jan 1997).
- [64] K. Varga, J. Usukura, and Y. Suzuki, Few-Body Systems Supplement **10**, 11 (1999).
- [65] J.-M. Richard, Phys. Rev. A **67**, 034702 (Mar 2003).
- [66] L. H. Thomas, Phys. Rev. **47**, 903 (Jun 1935):407330 :407330 :407330:407330.
- [67] T. Hamada and I. D. Johnston, Nucl. Phys. **34**, 382 (1962):407330 :1975qr :1975qr :1975qr:1975qr.
- [68] M. Lacombe *et al.*, Phys. Rev. **D12**, 1495 (1975) :1975qr .
- [69] R. B. Wiringa, V. G. J. Stoks, and R. Schiavilla, Phys. Rev. C **51**, 38 (Jan 1995):2007ms :2007ms :2007ms:2007ms.
- [70] R. Machleidt(2007), arXiv:0704.0807[nucl-th] :2007ms :1980es :1980es :1980es:1980es.
- [71] M. Martzolff, B. Loiseau, and P. Grange, Phys. Lett. **B92**, 46 (1980) :1980es :1993aw :1993aw :1993aw:1993aw.
- [72] S. A. Coon and M. T. Pena, Phys. Rev. **C48**, 2559 (1993), arXiv:nucl-th/9305017 :1993aw .
- [73] R. Lazauskas and J. Carbonell, Phys. Rev. C **72**, 034003 (Sep 2005):1976yi :1976yi :1976yi:1976yi.
- [74] R. L. Jaffe, Phys. Rev. Lett. **38**, 195 (1977) :1976yi .