

Forces à longue portée dans les gaz quantiques : le problème à trois corps et l'effet Efimov

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

Cours 2022-23

Introduction

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

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

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

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

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

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

Dans ce cours, nous allons nous intéresser à la transposition du problème à trois corps au domaine quantique. Comme pour le problème lu-

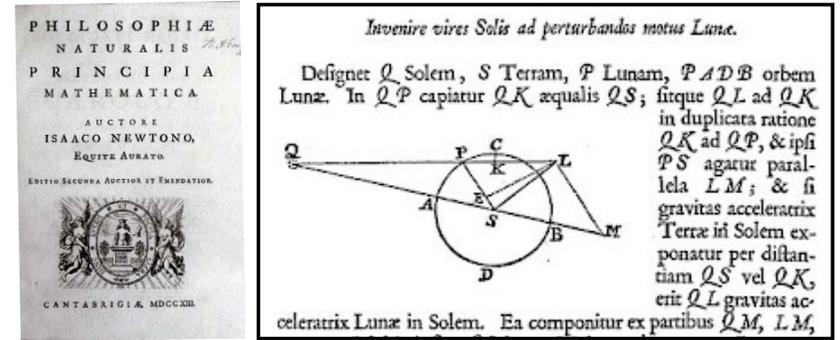


FIGURE 1. Le système soleil-terre-lune décrit par Newton dans ses Principia.

naire, nous allons nous concentrer sur un système dans lequel l'énergie d'interaction peut s'écrire comme une somme de termes binaires :

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

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

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

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

où le symbole $\delta(\mathbf{r})$ représente "presque" une distribution de Dirac. Le point

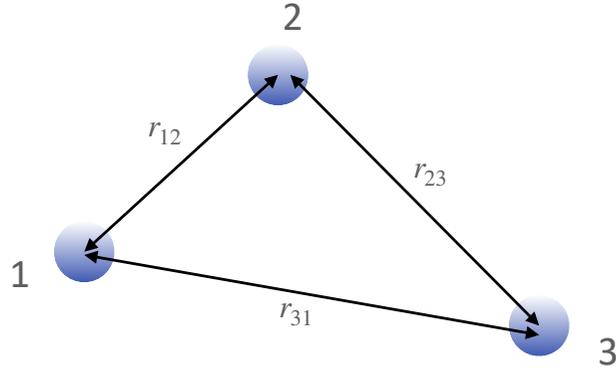


FIGURE 2. Trois corps en interaction. La taille des boules représente la portée du potentiel à deux corps, notée b . Nous nous intéresserons principalement à des situations où la distance entre particules r_{ij} est grande devant b .

central de ce cours portera sur le cas résonnant, c'est-à-dire une combinaison des masses atomiques et de l'intensité g du potentiel telle qu'un état lié à deux corps soit juste au seuil d'apparition pour l'hamiltonien (voir figure 3)

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

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

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

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

La distance R en jeu ici pourra être par exemple l'hyperrayon pour le système à trois corps

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

Cette émergence d'un potentiel attractif en $1/R^2$ a été découverte par Vitaly Efimov dans une série d'articles remarquables (EFIMOV 1970; EFIMOV 1971; EFIMOV 1972; EFIMOV 1973). Insistons sur le fait que ce potentiel à

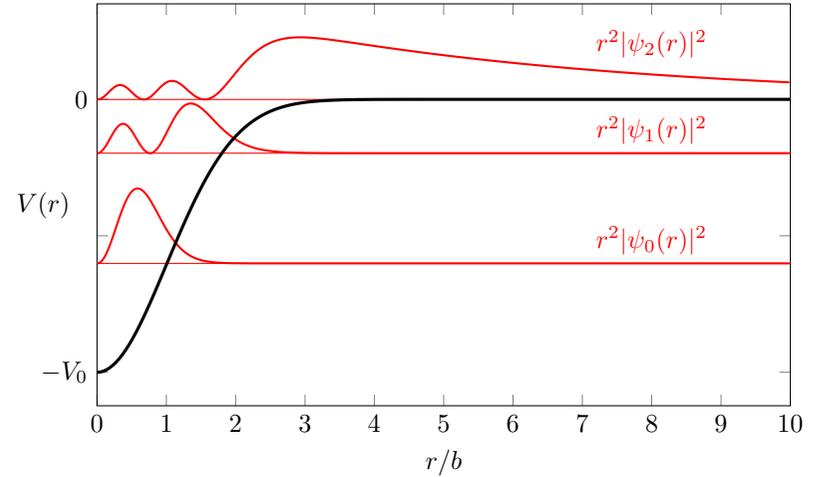


FIGURE 3. Un exemple de résonance de diffusion pour un potentiel gaussien $V(r) = -V_0 \exp(-r^2/2b^2)$, mis en évidence sur la densité de probabilité radiale $r^2|\psi_n(r)|^2$ des états liés pour un moment cinétique nul ($\ell = 0$). On a choisi le couple (V_0, b) de sorte que le dernier état lié $\psi_2(r)$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

longue portée est absent de la physique à deux corps qui, comme nous l'avons écrit, est à courte portée, voire même de portée nulle. C'est pour cette raison qu'on le qualifie de propriété "émergente", qui ne se concrétise que lorsque les trois corps sont simultanément présents.

La particularité du potentiel en $1/R^2$ est son invariance d'échelle qui va nous occuper intensivement dans les premiers chapitres de ce cours. Cette invariance s'illustre de manière simple sur l'hamiltonien à une particule

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

Si une fonction d'onde $\psi(R)$ est état propre de cet hamiltonien pour l'énergie E , on peut alors vérifier que la famille infinie de fonctions $\psi(\lambda R)$ pour λ réel quelconque est également état propre de \hat{H} pour la valeur propre



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

$\lambda^2 E$. Cette propriété du potentiel en $1/R^2$ est unique dans la famille des interactions en loi de puissance !

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

Quand Efimov publia ses prédictions au début des années 1970, il n'y avait que très peu de systèmes dans la nature sur lesquels on pouvait espérer les tester. Efimov s'intéressait essentiellement à des problèmes de physique nucléaire, comme trois particules α pouvant se lier pour former un noyau de carbone ^{12}C ou encore le problème du noyau de tritium formé de deux neutrons et un proton. Mais la théorie d'Efimov était difficilement applicable à ces situations car les interactions binaires n'y étaient pas résonnantes.

La physique atomique, notamment avec les gaz quantiques et leurs résonances de Fano–Feshbach ajustables, est venue enrichir considéra-

ment le paysage en offrant des systèmes où l'invariance d'échelle trouvée par Efimov et l'universalité qui lui est liée pouvaient être testées de manière quantitative. Les expériences sur le trimère He_3 (SCHÖLLKOPF & TOENNIES 1994; KUNITSKI, ZELLER et al. 2015) et celles menées sur un gaz de césium (KRAEMER, MARK et al. 2006) ont ouvert un vaste champ de recherche que nous allons décrire dans les cours qui vont suivre. Compte tenu du temps limité, cette description ne sera bien sûr que partielle et nous renvoyons les lecteurs désireux d'en apprendre plus vers les articles de revue publiés sur le sujet au cours des vingt dernières années, comme NIELSEN, FEDOROV et al. (2001), BRAATEN & HAMMER (2006), BRAATEN & HAMMER (2007), FERLAINO & GRIMM (2010), EFIMOV (2011), PETROV (2012), WANG, JULIENNE et al. (2015), GREENE, GIANNAKEAS et al. (2017), NAIDON & ENDO (2017) et D'INCAO (2018).

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

- Dans les deux premiers chapitres, nous allons nous intéresser au problème à deux corps et montrer pourquoi le potentiel en $1/r^2$ est singulier parmi tous les potentiels en loi de puissance $1/r^\beta$. Nous montrerons que cette particularité du potentiel est liée à son invariance d'échelle, et plus généralement à son invariance conforme qui se manifeste dans la dynamique du problème. Nous illustrerons ces propriétés sur plusieurs exemples, comme l'interaction charge-fil et l'interaction charge-dipôle. Nous décrirons également quelques résultats théoriques remarquables du problème uni-dimensionnel (Calogero-Sutherland-Moser).
- Dans les chapitres 3 et 4, nous aborderons le problème à trois corps dans une version relativement simple, celui de deux particules lourdes de masse M liées par une particule légère de masse $m \ll M$. Nous utiliserons une approche de type Born–Oppenheimer : dans un premier temps, nous supposerons les particules lourdes immobiles à une distance R l'une de l'autre et nous déterminerons l'énergie $E(R)$ de l'état fondamental de la particule légère. Nous verrons ainsi comment une loi $E(R) \propto -1/R^2$ peut émerger. Nous passerons ensuite au mouvement des particules lourdes, avec $E(R)$ jouant le rôle de potentiel effectif d'interaction entre elles. Nous montrerons qu'il apparaît alors une série théoriquement infinie d'états liés pour le système mMM , avec des énergies en progression géométrique, et nous décrirons des expériences menées sur des gaz d'atomes froids ayant mis en évidence

les premiers états de cette suite.

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

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

Remerciements. Je suis très reconnaissant envers Jérôme Beugnon, Raphael Lopes et Sylvain Nascimbene pour leurs commentaires sur une version préliminaire de ces notes de cours.

Références

- BRAATEN, Eric & H.-W. HAMMER (2006), « Universality in few-body systems with large scattering length », in *Physics Reports* **428**, p. 259-390.
- BRAATEN, Eric & H-W HAMMER (2007), « Efimov physics in cold atoms », in *Annals of Physics* **322**, p. 120-163.
- CHENCINER, Alain (2014), « Poincaré and the three-body problem », in *Henri Poincaré, 1912–2012 : Poincaré Seminar 2012*, Springer, , p. 51-149.
- D'INCAO, José P (2018), « Few-body physics in resonantly interacting ultracold quantum gases », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **51**, p. 043001.
- EFIMOV, V. (1970), « Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system », in *Physics Letters B* **33**, p. 563-564.
- (1971), « Weakly-bound states of three resonantly-interacting particles », in *Sov. J. Nucl. Phys* **12**, p. 101.
 - (1972), « Level spectrum of three resonantly interacting particles », in *JETP Lett* **16**, p. 50.
 - (1973), « Energy levels of three resonantly interacting particles », in *Nuclear Physics A* **210**, p. 157-188.
 - (2011), « Large Few-Body Systems. », in *Few-Body Systems* **51**.
- FERLAINO, Francesca & Rudolf GRIMM (2010), « Forty years of Efimov physics : How a bizarre prediction turned into a hot topic », in *Physics* **3**, p. 9.
- GREENE, Chris H, P GIANNAKEAS & J PÉREZ-RÍOS (2017), « Universal few-body physics and cluster formation », in *Reviews of Modern Physics* **89**, p. 035006.
- GUTZWILLER, Martin C (1998), « Moon-Earth-Sun : The oldest three-body problem », in *Reviews of Modern Physics* **70**, p. 589.
- KRAEMER, Tobias, Manfred MARK, Philipp WALDBURGER, Johann G DANZL, Cheng CHIN, Bastian ENGESER, Almar D LANGE, Karl PILCH, Antti JAAKKOLA, H-C NÄGERL et al. (2006), « Evidence for Efimov quantum states in an ultracold gas of caesium atoms », in *Nature* **440**, p. 315-318.
- KUNITSKI, Maksim, Stefan ZELLER, Jörg VOIGTSBERGER, Anton KALININ, Lothar Ph H SCHMIDT, Markus SCHÖFFLER, Achim CZASCH, Wieland SCHÖLLKOPF, Robert E GRISENTI, Till JAHNKE et al. (2015), « Observation of the Efimov state of the helium trimer », in *Science* **348**, p. 551-555.
- NAIDON, Pascal & Shimpei ENDO (2017), « Efimov physics : a review », in *Reports on Progress in Physics* **80**, 056001 (see also corrected version at arXiv :1610.09805v3).
- NIELSEN, E., D.V. FEDOROV, A.S. JENSEN & E. GARRIDO (2001), « The three-body problem with short-range interactions », in *Physics Reports* **347**, p. 373 -459.
- PETROV, Dmitry S (2012), « The few-atom problem », in *Many-Body Physics With Ultracold Gases (Les Houches 2010) Lecture Notes of the Les Houches Summer School* **94**, p. 109-160.
- SCHÖLLKOPF, Wieland & J Peter TOENNIES (1994), « Nondestructive mass selection of small van der Waals clusters », in *Science* **266**, p. 1345-1348.
- THOMAS, L. H. (1935), « The Interaction Between a Neutron and a Proton and the Structure of H₃ », in *Physical Review* **47**, p. 903-909.
- WANG, Yujun, Paul JULIENNE & Chris H GREENE (2015), « Few-body physics of ultracold atoms and molecules with long-range interactions », in *Annual Review of Cold Atoms and Molecules* **3**, p. 77.
- WESTFALL, Richard S. (1980), *Never at rest : a biography of Isaac Newton*, Cambridge University Press.

Chapitre 1

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

Sommaire

1	Le problème à deux corps	2
1-1	Séparation des variables	2
1-2	L'invariance par rotation	2
1-3	Recherche des états liés	3
1-4	Solution d'énergie nulle et longueur de diffusion	5
2	Potentiels attractifs en loi de puissance $1/r^\beta$	6
2-1	Approche qualitative en terme de paquet d'ondes	6
2-2	Le cas $\beta < 2$.	6
2-3	Le cas $\beta > 2$.	7
2-4	Combien y a-t-il d'états liés?	8
3	Le potentiel $1/r^2$ en mécanique classique	9
3-1	Mouvement classique et chute vers le centre	9
3-2	L'interaction atome – fil chargé	10
3-3	Les résultats de Denschlag et al	11
4	Le potentiel en $1/r^2$ en mécanique quantique	11
4-1	L'invariance d'échelle	12
4-2	Brisure de l'invariance d'échelle	13
4-3	Potentiel adimensionné et solution d'énergie nulle	13
4-4	Point critique $\alpha = -1/4$ et anomalie quantique	16

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

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

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

Le problème du potentiel en $1/r^2$ est traité explicitement dans plusieurs livres et articles. En plus de LANDAU & LIFSHITZ (1975) déjà men-

tionné, citons notamment MOTT & MASSEY (1949), chapitre II, §7, CASE (1950), COON & HOLSTEIN (2002), ESSIN & GRIFFITHS (2006), DEREZIŃSKI & RICHARD (2017) et PAIK (2018). Ce problème reste néanmoins relativement méconnu et ESSIN & GRIFFITHS (2006) avancent une "bonne" raison pour cela : " *It violates every rule in the book, and discredits all the intuition we are trying to instill in our students.* " Comme ce problème joue un rôle central dans la physique efimovienne, il nous a donc semblé utile de lui consacrer ce chapitre et le suivant.

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

1 Le problème à deux corps

1-1 Séparation des variables

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

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

se réécrit en fonction des variables du centre de masse

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

et de la variable relative

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

sous la forme

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

où nous avons introduit la masse totale $M = m_1 + m_2$ et la masse relative $m_r = m_1m_2/(m_1 + m_2)$.

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

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

1-2 L'invariance par rotation

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

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

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

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

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

Il ne reste plus qu'à déterminer la dépendance radiale $\psi(r)$ de la fonction d'onde Ψ . En pratique, il est commode d'introduire la fonction d'onde

radiale réduite $u(r) = r \psi(r)$ qui vérifie l'équation uni-dimensionnelle :

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

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

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

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

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

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

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

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

1-3 Recherche des états liés

Une partie importante du cours de cette année sera consacrée à la recherche d'états liés à plusieurs corps. Indiquons donc comment cette re-

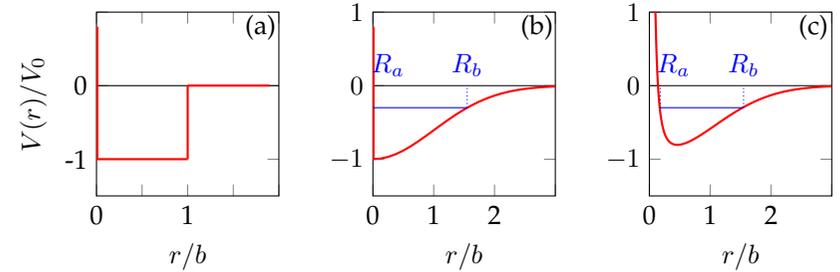


FIGURE 1. Quelques potentiels à deux corps simples. (a) Puits carré de profondeur V_0 et de portée b . (b) Potentiel gaussien. (c) Potentiel gaussien superposé au potentiel centrifuge pour $\ell \neq 0$. On a indiqué en (b) et (c) les points tournants utilisés pour le calcul de l'énergie d'un état lié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

cherche peut se faire pour le problème à deux corps.

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

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

Le premier terme du membre de gauche est toujours positif (énergie cinétique), et le second est supérieur ou égal à $-|V_0|$ puisque :

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

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

Existence d'états liés. Rappelons que l'existence d'états liés n'est pas garantie, même si $V(r)$ est négatif en tout point. Prenons l'exemple du po-

tentiel carré représenté en figure 1b, que nous avons étudié en détail dans le cours 2020-21 (chapitre 3, §3), intéressons-nous au canal de moment cinétique $\ell = 0$ et posons $V_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2m_r$. On peut montrer simplement que le puits ne contient aucun état lié si $k_0 b / \pi \leq 1/2$, contient un seul état lié pour $1/2 < k_0 b / \pi < 3/2$, et plus généralement n états liés pour $n - 1/2 < k_0 b / \pi < n + 1/2$.

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

Une méthode simple pour estimer le nombre d'états liés consiste à utiliser la méthode semi-classique, encore appelée méthode WKB (Wentzel - Kramers - Brillouin). Nous nous contenterons d'énoncer ici le résultat utile pour notre étude et nous renvoyons le lecteur intéressé vers SCHIFF (1968) et vers le cours 2020-21 (chapitre 4, §1), où cette méthode a été présentée en détail.

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

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

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

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

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

Pour estimer la position des états liés, on peut donc balayer la valeur de E depuis $E = -|V_0|$ jusqu'à $E = 0$. Pour chaque valeur de E , on calcule

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

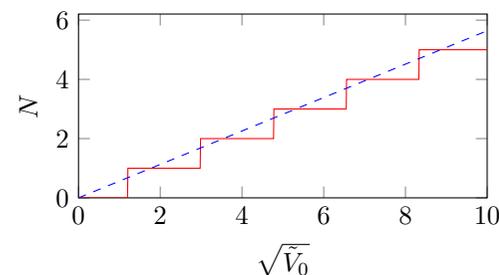


FIGURE 2. Ligne rouge continue : Nombre d'états liés dans le potentiel gaussien $V(r) = -V_0 e^{-r^2/2b^2}$, avec $\tilde{V}_0 = 2m_r V_0 b^2 / \hbar^2$. Ligne bleue tiretée : valeur approchée donnée par l'argument de la fonction $I(x)$ en (15).

l'intégrale (13) et on obtient une valeur approchée de l'énergie d'un état lié quand cette intégrale est un multiple entier de π . En particulier, la valeur de l'intégrale en $E = 0$ donne une estimation généralement assez fiable du nombre d'états liés :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Longueur de diffusion. Supposons que le potentiel $V(r)$ décroît "vite" à l'infini [en pratique, cela veut dire plus vite que $1/r^3$ (LANDAU & LIFSHITZ 1975)]. Rappelons la forme de la solution d'énergie nulle de l'équation radiale (7) dans ce cas : dans une région loin de l'origine, telle que le potentiel $V(r)$ est négligeable, c'est-à-dire pour r grand devant la portée b du potentiel, cette équation devient simplement $u''(r) = 0$, dont les solutions sont

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

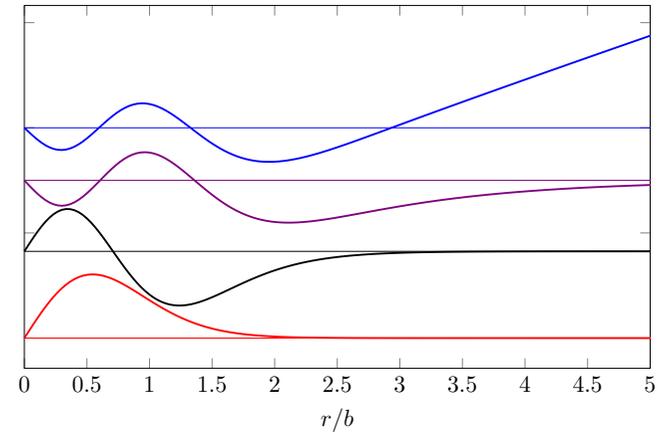


FIGURE 3. De bas en haut : Fonction d'onde réduite $u(r)$ pour les trois états liés et l'état d'énergie nulle dans le potentiel gaussien $V(r) = -V_0 e^{-r^2/2b^2}$ avec $\tilde{V}_0 = 2m_r V_0 b^2/\hbar^2 = 29$. Les états ne sont pas normalisés.

de la forme $u(r) = c_0 + c_1 r$, que l'on écrit plutôt

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

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

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

On pourra consulter le cours 2020-21, chapitre 3, pour une présentation détaillée du traitement de la collision de deux particules à basse énergie et pour des exemples de calculs de longueur de diffusion.

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

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

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

Nous allons nous intéresser maintenant aux potentiels en loi de puissance

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

où l'exposant β est à ce stade quelconque et où nous considérons essentiellement le cas attractif, c'est-à-dire $g < 0$. Au moins pour le canal de moment cinétique $\ell = 0$, l'existence d'une borne inférieure pour l'état fondamental n'est alors pas acquise.

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

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

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

Pour obtenir une intuition des différents cas de figure possibles, considérons un paquet d'ondes centré³ en r_0 et d'extension également $\sim r_0$

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

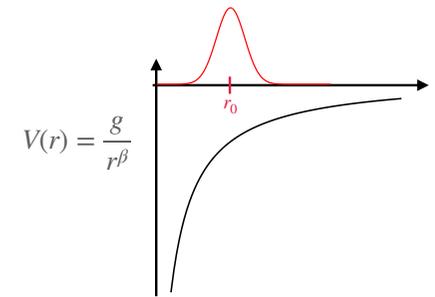


FIGURE 4. Paquet d'ondes de position et d'extension $\sim r_0$ dans un potentiel attractif en loi de puissance.

(figure 4). On sait que l'énergie moyenne de ce paquet d'ondes est nécessairement supérieure à l'énergie de l'état fondamental (théorème à la base de la méthode variationnelle). L'énergie cinétique du mouvement relatif $E_c \sim (\Delta p)^2/2m_r$ est liée au confinement sur la taille r_0 , donc à une dispersion en impulsion Δp d'au moins $\sim \hbar/r_0$. L'énergie cinétique et l'énergie potentielle E_p sont ainsi respectivement de l'ordre de

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

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

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

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

Le potentiel coulombien fournit un exemple de ce cas, avec $\beta = 1$ et

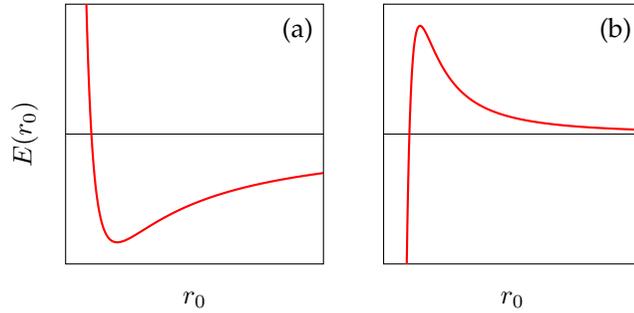


FIGURE 5. Énergie totale d'un paquet d'ondes de taille r_0 dans un potentiel en loi de puissance, $V(r) = g/r^\beta$ avec $g < 0$. (a) Cas $\beta < 2$, l'énergie cinétique (positive) domine à courte distance. (b) Cas $\beta > 2$, l'énergie potentielle (négative) domine à courte distance, ce qui permet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

$g = -e^2$. La minimisation de l'énergie totale

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2m_r r_0^2} - \frac{e^2}{r_0} \tag{22}$$

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

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

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

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

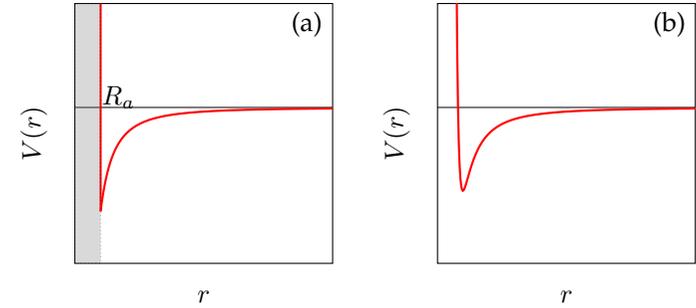


FIGURE 6. Ajout d'un potentiel répulsif à courte distance pour empêcher la chute vers le centre dans un potentiel algébrique en $r^{-\beta}$ avec $\beta > 2$. (a) : cœur dur en $r = R_a$, (b) : ajout d'un potentiel répulsif avec une loi de puissance plus élevée.

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

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

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

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

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

2-4 Combien y a-t-il d'états liés ?

Pour le potentiel coulombien, la réponse est bien connue. Les états liés sont repérés par le nombre quantique principal n et ont pour énergie $E_n = -E_I/n^2$, où $-E_I$ est l'énergie de l'état fondamental (-13.6 eV pour l'atome d'hydrogène). Le nombre n peut s'écrire $n = n' + \ell + 1$, où n' est le nombre quantique radial, c'est-à-dire le nombre de nœuds de la fonction d'onde radiale $\psi(r)$. Comme n peut être égal à n'importe quel entier positif, on en déduit que le nombre d'états liés est infini, quelle que soit la valeur ℓ du moment cinétique.

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

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

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

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

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

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

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

TABLE 1.1. Comportement des états liés d'une particule en mouvement dans un potentiel $V(r) = -|g|/r^\beta$. Un comportement non régulier à l'origine indique qu'il faut régulariser le potentiel $V(r)$ à courte distance, par exemple avec l'ajout d'un potentiel de cœur dur, pour assurer l'existence d'un état fondamental d'énergie finie.

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

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

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

un résultat déjà mentionné dans le cours 2020-21 (Chapitre 4, §2.1). Les résultats présentés dans cette section sont regroupés dans le tableau 1.1.

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

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

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

- Si $\beta < 2$, i.e. $\frac{\beta}{2} - 1 < 0$, ce critère de validité est satisfait aux distances r suffisamment grandes. Même si l'approximation semi-classique ne décrit pas correctement le comportement aux petits r , la conclusion concernant le nombre infini d'états liés, qui sont essentiellement concentrés loin de l'origine, reste valable.
- Si $\beta > 2$, i.e. $\frac{\beta}{2} - 1 > 0$, ce critère de validité est au contraire rempli pour les petites valeurs de r . Une étude plus précise du cas du potentiel de van der Waals, obtenu pour $\beta = 6$, montre que l'on décrit correctement presque tous les états liés (cf. cours 2020-21, chapitre 4, §4) : seule la position du dernier état lié est mal estimée par l'approche

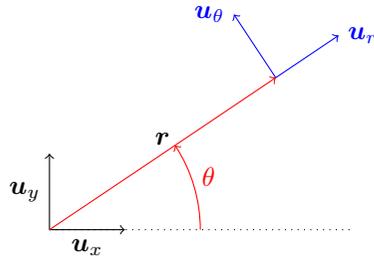


FIGURE 7. Définition des coordonnées polaires pour décrire le mouvement classique d'une particule dans un potentiel central.

semi-classique. En particulier, l'estimation du nombre total d'états liés donnée en (26) est tout à fait pertinente.

- Pour $\beta = 2$, on remarque que le critère de validité (27) n'apporte pas de contrainte sur la position r , mais seulement sur l'amplitude du potentiel $|g|$, qui doit être notablement plus grande que \hbar^2/m_r .

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

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

L'essentiel du cours sera consacré aux propriétés quantiques de particules en mouvement dans un potentiel en $1/r^2$. Il est toutefois intéressant de commencer notre étude par la version *classique* du problème, qui contient plusieurs précurseurs des spécificités qui vont nous occuper dans la suite.

3-1 Mouvement classique et chute vers le centre

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

coordonnées polaires :

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

On en déduit l'accélération

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$L_c = \sqrt{2m_r|g|} \tag{33}$$

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

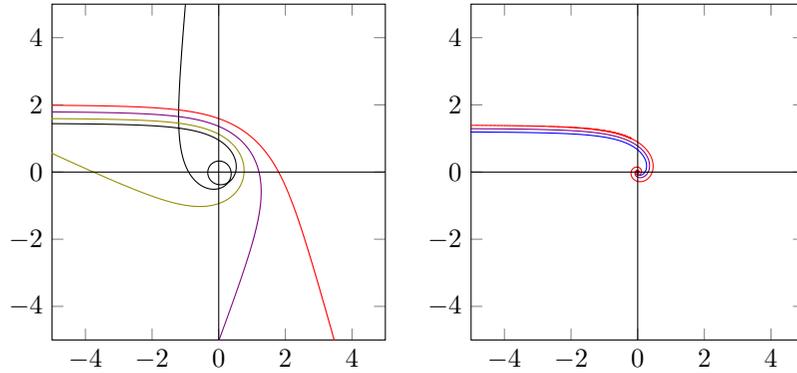


FIGURE 8. Trajectoires classiques dans le potentiel g/r^2 avec $g < 0$. Gauche, moment cinétique $L > L_c$: $L/L_c = 1.025, 1.13, 1.27, 1.41$. Droite, chute vers le centre pour $L < L_c$: $L/L_c = 0.85, 0.92, 0.99$.

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

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

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

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

3-2 L'interaction atome – fil chargé

Nous allons maintenant décrire une première implémentation expérimentale du mouvement d'une particule atomique dans un potentiel en $1/r^2$, due à DENSCHLAG, UMSHAUS et al. (1998). Bien qu'on ait affaire à des particules microscopiques, il n'est pas nécessaire d'avoir recours au

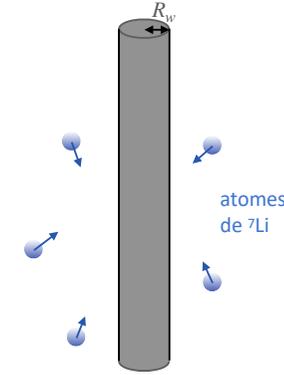


FIGURE 9. Principe de l'expérience de DENSCHLAG, UMSHAUS et al. (1998). On étudie le mouvement d'atomes neutres polarisables (${}^7\text{Li}$) dans le champ électrostatique créé par un fil uniformément chargé.

formalisme quantique pour traiter ce problème qui est bien décrit par une approche classique.

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

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

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

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

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

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

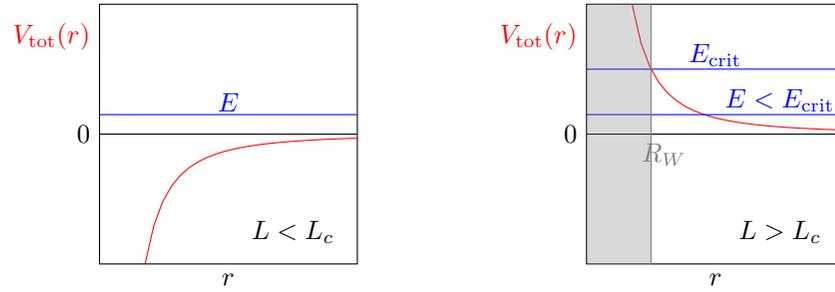


FIGURE 10. Les deux cas possibles dans l'expérience de DENSCHLAG, UMSHAUS *et al.* (1998). Si $L < L_c$ (figure de gauche), la chute vers le centre se produit avec certitude, quelle que soit l'énergie incidente. Si $L > L_c$ (figure de droite), l'atome peut toucher le fil de rayon R_w si son énergie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

3-3 Les résultats de Denschlag et al

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

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

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

Il faut ensuite moyenniser cette condition sur les positions et les vitesses des atomes piégés pour en déduire le taux de perte d'atomes induit par la

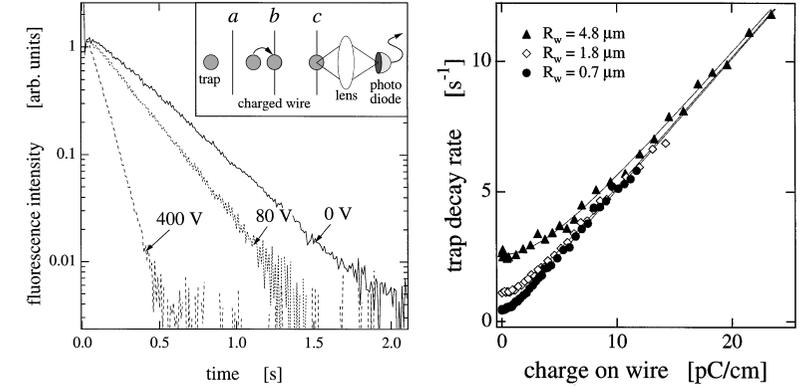


FIGURE 11. Pertes induites au sein d'un piège magnéto-optique de lithium par un fil métallique uniformément chargé. Figure extraite de DENSCHLAG, UMSHAUS *et al.* (1998).

présence du fil chargé.

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

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

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

en fonction de l'amplitude g du potentiel.

4-1 L'invariance d'échelle

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

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

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

Introduisons la fonction Φ définie par

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

où λ est un nombre réel positif, qui peut être pris quelconque à ce stade⁵. Il est immédiat de vérifier que Φ vérifie l'équation

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

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

L'invariance d'échelle que nous venons de trouver pour les états propres de l'hamiltonien se généralise aux problèmes dépendant du temps.

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

Considérons une fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ solution de

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

On peut alors vérifier que la fonction

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

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

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

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

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

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

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

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

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

4-2 Brisure de l'invariance d'échelle

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

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

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

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

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

- On définit l'adjoint \hat{A}^\dagger et le domaine de l'adjoint $\mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$ comme l'ensemble des fonctions $|\psi\rangle$ telles que la forme linéaire

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

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

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

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

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

4-3 Potentiel adimensionné et solution d'énergie nulle

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

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

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

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

où nous avons posé

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

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

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

Nous considérons donc l'équation

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

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

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

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

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

dont les racines s'écrivent

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

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

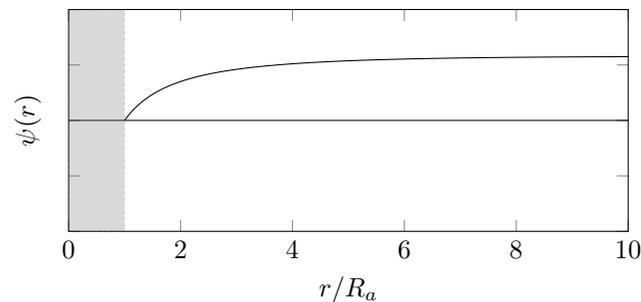


FIGURE 12. Cas $\alpha > -1/4$. Fonction propre d'énergie nulle pour le potentiel α/r^2 , tracée pour $\alpha = -1/8$.

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

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

à une constante multiplicative près.

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

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

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

Notons que la régularisation par un cœur dur en R_a n'est pas indispen-

sable dans ce cas $\alpha > -1/4$. Quand on fait tendre R_a vers 0 dans l'expression (55), on trouve, à un facteur multiplicatif près :

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

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

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

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

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

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

avec

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

La fonction $\psi(r)$ s'écrit alors

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

ou encore, à une constante multiplicative près

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

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

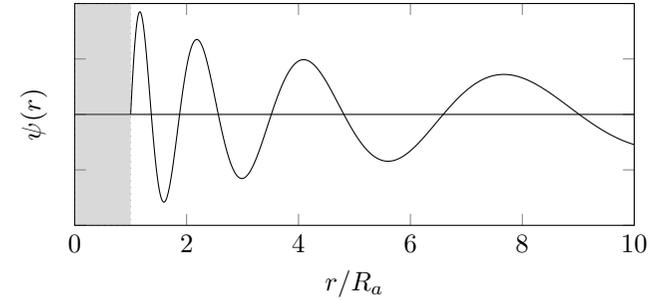


FIGURE 13. Cas $\alpha < -1/4$. Fonction propre d'énergie nulle pour le potentiel α/r^2 , tracée pour $s_0 \equiv (\alpha + 1/4)^{1/2} = 10i$.

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

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

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

Pour résumer, le potentiel en α/r^2 pour $\alpha < -1/4$ combine les deux types de "pathologie" décrits en §2 (cf. table 1.2) :

- Ce potentiel diverge vite au voisinage de l'origine et nécessite une régularisation, par exemple avec un cœur dur en R_a , tout comme les potentiels en r^β avec $\beta > 2$. Cette régularisation n'est au contraire pas nécessaire pour le potentiel coulombien en $1/r$. Comme signalé plus haut (cf. figure 6), on peut choisir une régularisation plus douce pour empêcher la chute vers le centre, voire même invoquer des effets liés aux interactions de champ moyen dans les systèmes à N corps [voir par exemple SAKAGUCHI & MALOMED (2011), ASTRAKHARCHIK & MALOMED (2015) et MALOMED (2018)].
- Ce potentiel tend lentement vers 0 à l'infini et conduit à une infinité d'états faiblement liés, tout comme le potentiel coulombien.

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

TABLE 1.2. Version complétée de la table 1.1, incluant le cas du potentiel g/r^2 .

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

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

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

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

ou encore

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

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

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

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

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

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

Références

- ARAUJO, Vanilse S, Francisco Antônio Bezerra COUTINHO & J FERNANDO PEREZ (2004), « Operator domains and self-adjoint operators », in *American Journal of Physics* **72**, p. 203-213.
- ASTRAKHARCHIK, GE & Boris A MALOMED (2015), « Quantum versus mean-field collapse in a many-body system », in *Physical Review A* **92**, p. 043632.
- BONNEAU, Guy, Jacques FARAUT & Galliano VALENT (2001), « Self-adjoint extensions of operators and the teaching of quantum mechanics », in *American Journal of physics* **69**, p. 322-331.
- CASE, K. M. (1950), « Singular Potentials », in *Phys. Rev.* **80**, p. 797-806.
- COON, Sidney A & Barry R HOLSTEIN (2002), « Anomalies in quantum mechanics : the $1/r^2$ potential », in *American Journal of Physics* **70**, p. 513-519.
- DENSCHLAG, Johannes, Gerhard UMSHAUS & Jörg SCHMIEDMAYER (1998), « Probing a singular potential with cold atoms : A neutral atom and a charged wire », in *Physical Review Letters* **81**, p. 737.
- DEREZIŃSKI, Jan & Serge RICHARD (2017), « On Schrödinger operators with inverse square potentials on the half-line », in *Annales Henri Poincaré*, t. 18, Springer, , p. 869-928.
- ESSIN, Andrew M & David J GRIFFITHS (2006), « Quantum mechanics of the $1/x^2$ potential », in *American Journal of Physics* **74**, p. 109-117.
- LANDAU, L. D. & E. M. LIFSHITZ (1975), *Mécanique quantique*, Editions Mir.
- MALOMED, Boris A (2018), « Suppression of quantum-mechanical collapse in bosonic gases with intrinsic repulsion : A brief review », in *Condensed Matter* **3**, p. 15.
- MOROZ, Sergej (2011), « Nonrelativistic scale anomaly, and composite operators with complex scaling dimensions », in *Annals of Physics* **326**, p. 1368-1380.
- MOTT, Nevill Francis & Harrie Stewart Wilson MASSEY (1949), *The theory of atomic collisions*, Clarendon Press.
- OVDAT, Omrie & Eric AKKERMANS (2021), « Breaking of continuous scale invariance to discrete scale invariance : A universal quantum phase transition », in *Fractal Geometry and Stochastics VI*, Springer, , p. 209-238.
- PAIK, Steve T (2018), « Teaching renormalization, scaling, and universality with an example from quantum mechanics », in *Journal of Physics Communications* **2**, p. 015016.
- SAKAGUCHI, Hidetsugu & Boris A MALOMED (2011), « Suppression of the quantum-mechanical collapse by repulsive interactions in a quantum gas », in *Physical Review A* **83**, p. 013607.
- SCHIFF, Leonard I (1968), *Quantum Mechanics*, McGrawHill.
- SUNDARAM, Sriram, CP BURGESS & Duncan HJ O'DELL (2021), « Fall-to-the-centre as a symmetry breaking transition », in *Journal of Physics : Conference Series*, t. 2038, IOP Publishing, , p. 012024.