Cours 2

Dynamique dans un potentiel en $1/r^2$

Chaire *Atomes et rayonnement*
Cours 2022-23
Jean Dalibard

COLLÈGE DE FRANCE
1530

http://pro.college-de-france.fr/jean.dalibard/index.html

Prochains séminaires

Vendredi 17 mars : *Quantum Networks of the First Kind*

Gerhard REMPE, Max-Planck Institute of Quantum Optics, Garching, Allemagne

Vendredi 24 mars : *Émulation du modèle de Hubbard étendu aux interactions à longue portée*

François DUBIN, Centre de Recherche sur l'Hétéro-Epitaxie et ses Applications, CNRS, Sophia-Antipolis

Vendredi 31 mars : *To thermalize or not? Slow particle diffusion in Many-Body Localization*

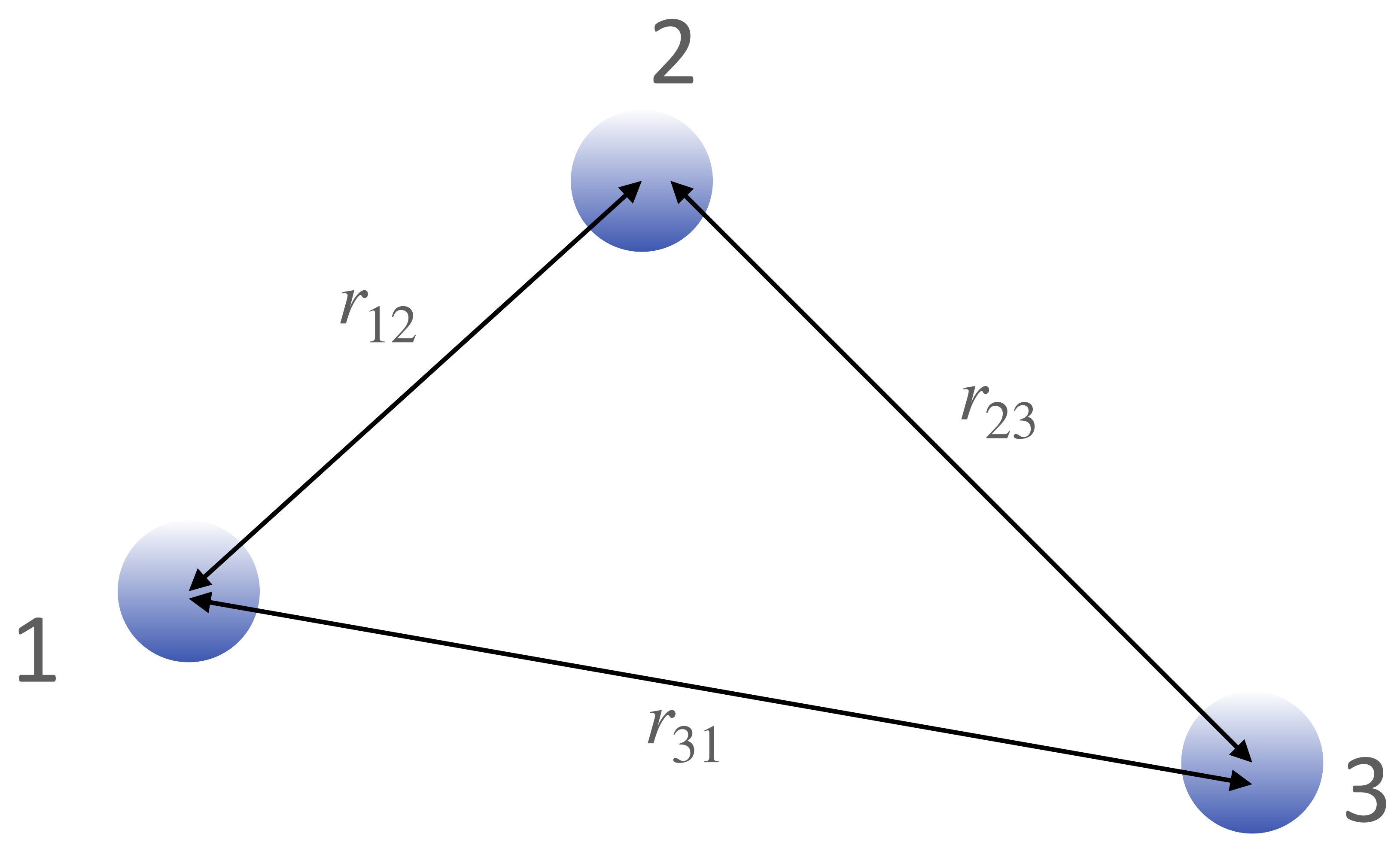
Michael FLEISCHHAUER, University of Kaiserslautern-Landau, Allemagne

Vendredi 7 avril :
Des doutes d'Einstein aux inégalités de Bell et aux technologies quantiques : la deuxième révolution quantique

Alain ASPECT, Institut d'Optique-Université Paris-Saclay

Atelier "*Open systems in Quantum Many-Body Physics*", vendredi 14 avril, 14h00-18h00

Le problème à trois corps “à la Efimov”

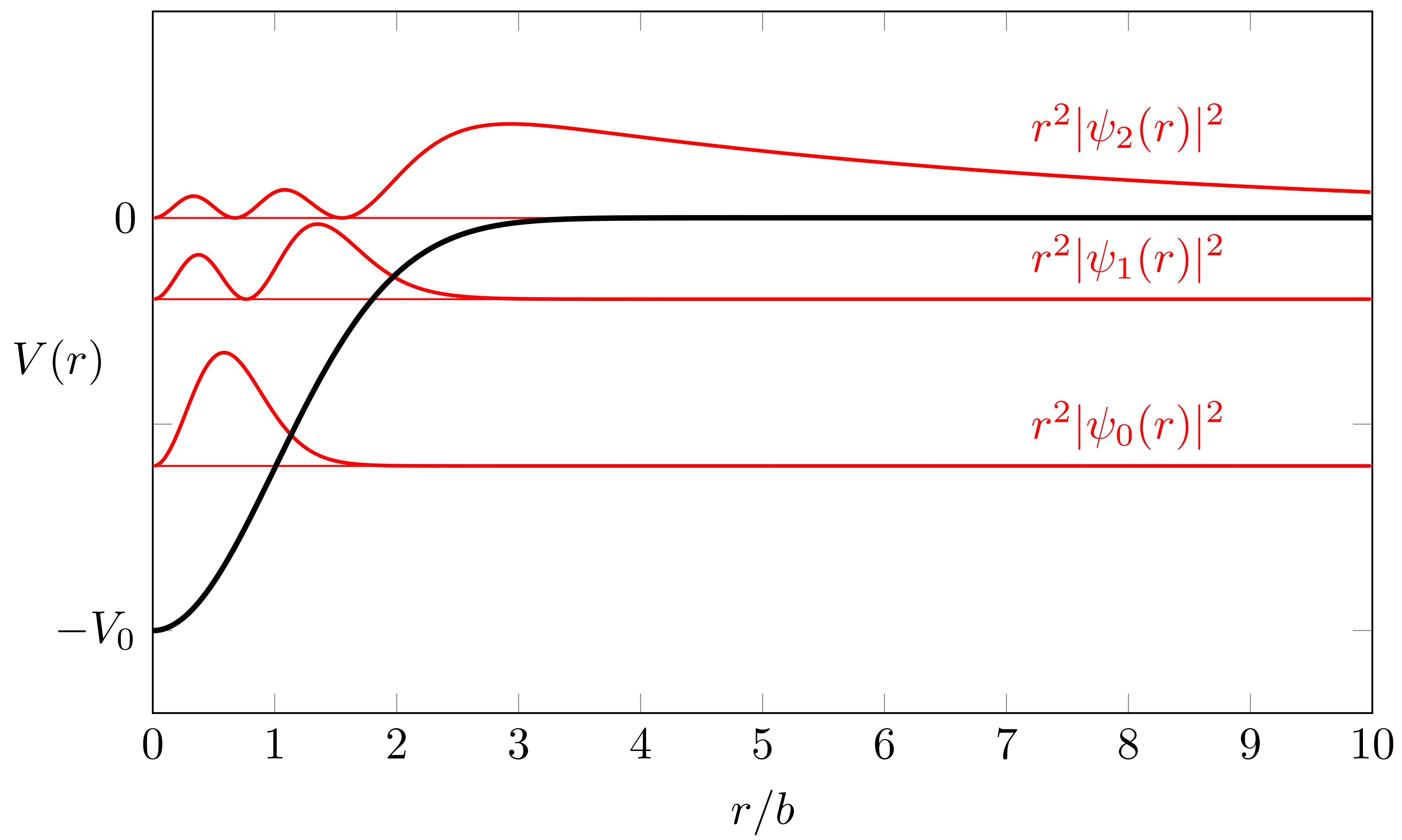


Problème à trois corps en interaction binaire résonante

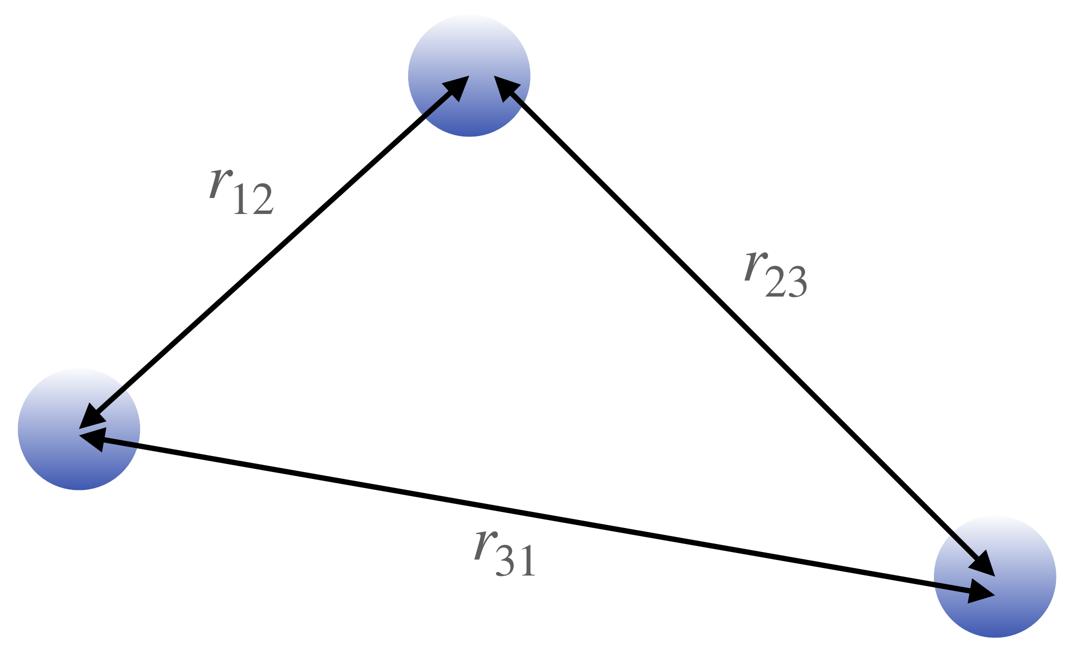
$$V(r_{12}) + V(r_{23}) + V(r_{31})$$

Notion de résonance dans ce contexte :

Les paramètres du potentiel binaires sont au seuil d’apparition d’un nouvel état lié



Pourquoi étudier le potentiel en $1/r^2$?



Vitaly Efimov, 1970

Interaction binaire
à courte portée,
mais résonante

Interaction effective
à trois corps à longue portée :

$$V(R) \propto \frac{1}{R^2}$$

propriété “émergente”

R : hyperrayon $\propto \left(r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2\right)^{1/2}$

Buts du cours d'aujourd'hui

Continuer notre exploration du potentiel à un corps en $1/r^2$

- Quels états liés ?

  Invariance d'échelle discrète

  Discuter un exemple simple : l'interaction "charge - dipôle électrique"

- Quelle dynamique dans ce potentiel ?

  Une symétrie "cachée" (ou symétrie dynamique) : l'invariance conforme

Rappel du cours précédent

On considère une particule en mouvement dans le potentiel

$$V(r) = \frac{g}{r^2}$$

⟶ Equation de Schrödinger et paramètre $\alpha = \frac{2mg}{\hbar^2} + \ell(\ell + 1)$

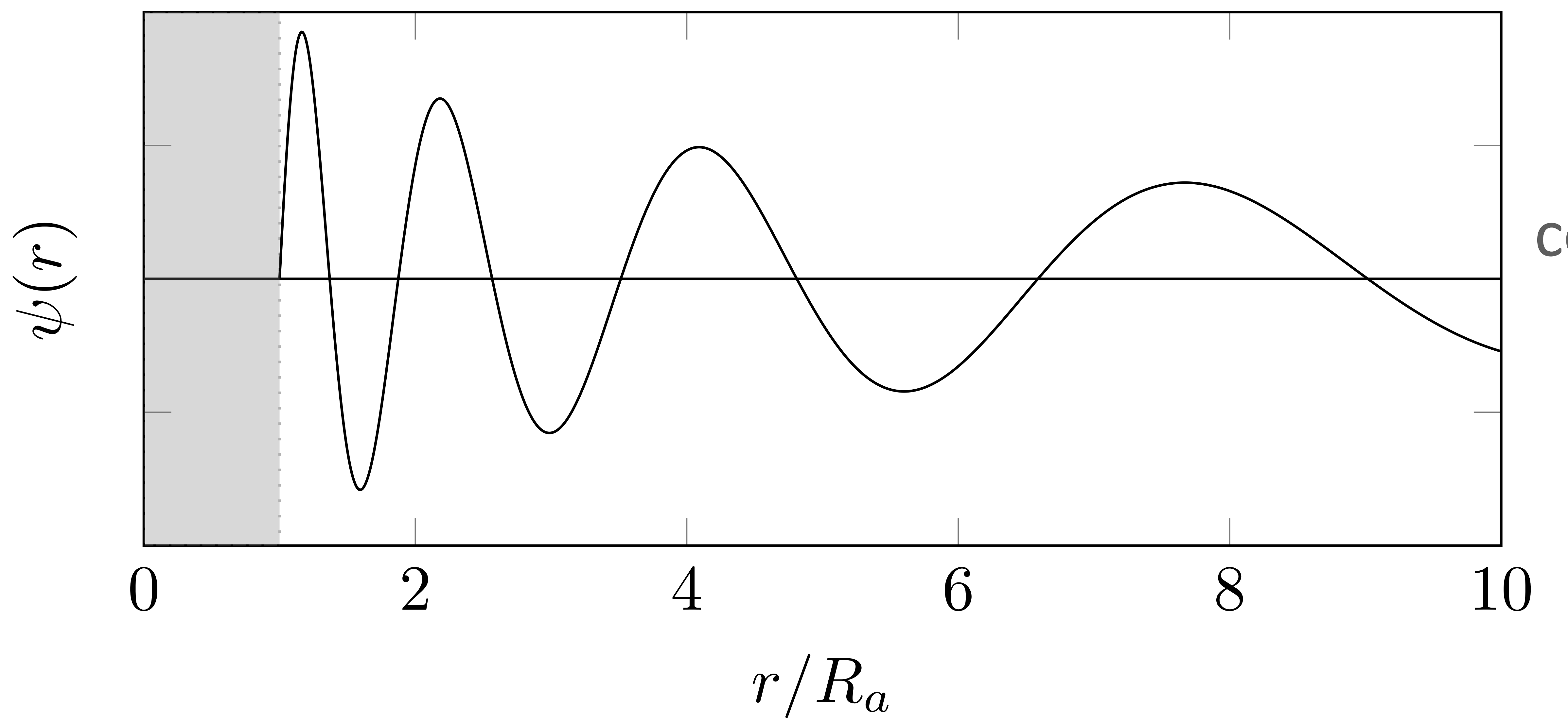
⟶ La solution d'énergie nulle pour $\alpha + \frac{1}{4} < 0$

La solution d'énergie nulle dans le potentiel en $1/r^2$

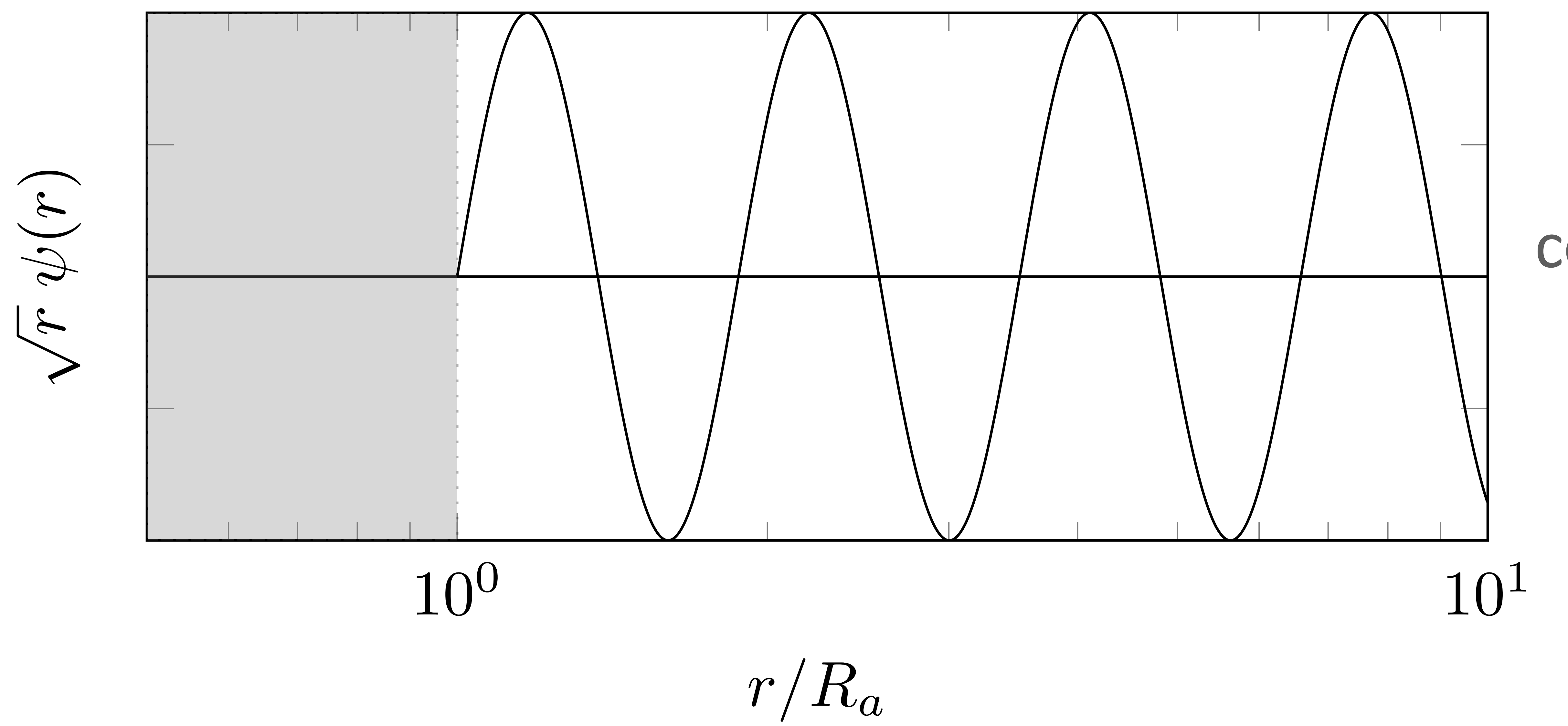
Cas $\alpha + \dfrac{1}{4} < 0$

$$s_0 = \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \in \mathrm{i}\mathbb{R}$$

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



coordonnées
linéaires



coordonnées
semi-log

1.

Les états liés dans un potentiel en $1/r^2$

Lien avec les fonctions de Bessel

$$\alpha = \frac{2mg}{\hbar^2} + \ell(\ell+1)$$

On cherche une solution de l'équation de Schrödinger d'énergie négative $E = -\dfrac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$

$$-\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\alpha}{r^2}\,u(r) = -\kappa^2\,u(r) \qquad\qquad u(R_a) = 0$$

On fait le changement de variable $x = \kappa r$ et de fonction $y(x) = \dfrac{u(r)}{\sqrt{r}} = \sqrt{r}\,\psi(r)$

et on arrive à :

$$x^2\,y''(x) + x\,y'(x) - (x^2 + s_0^2)\,y(x) = 0 \qquad\qquad s_0 = \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \in \mathrm{i}\mathbb{R}$$

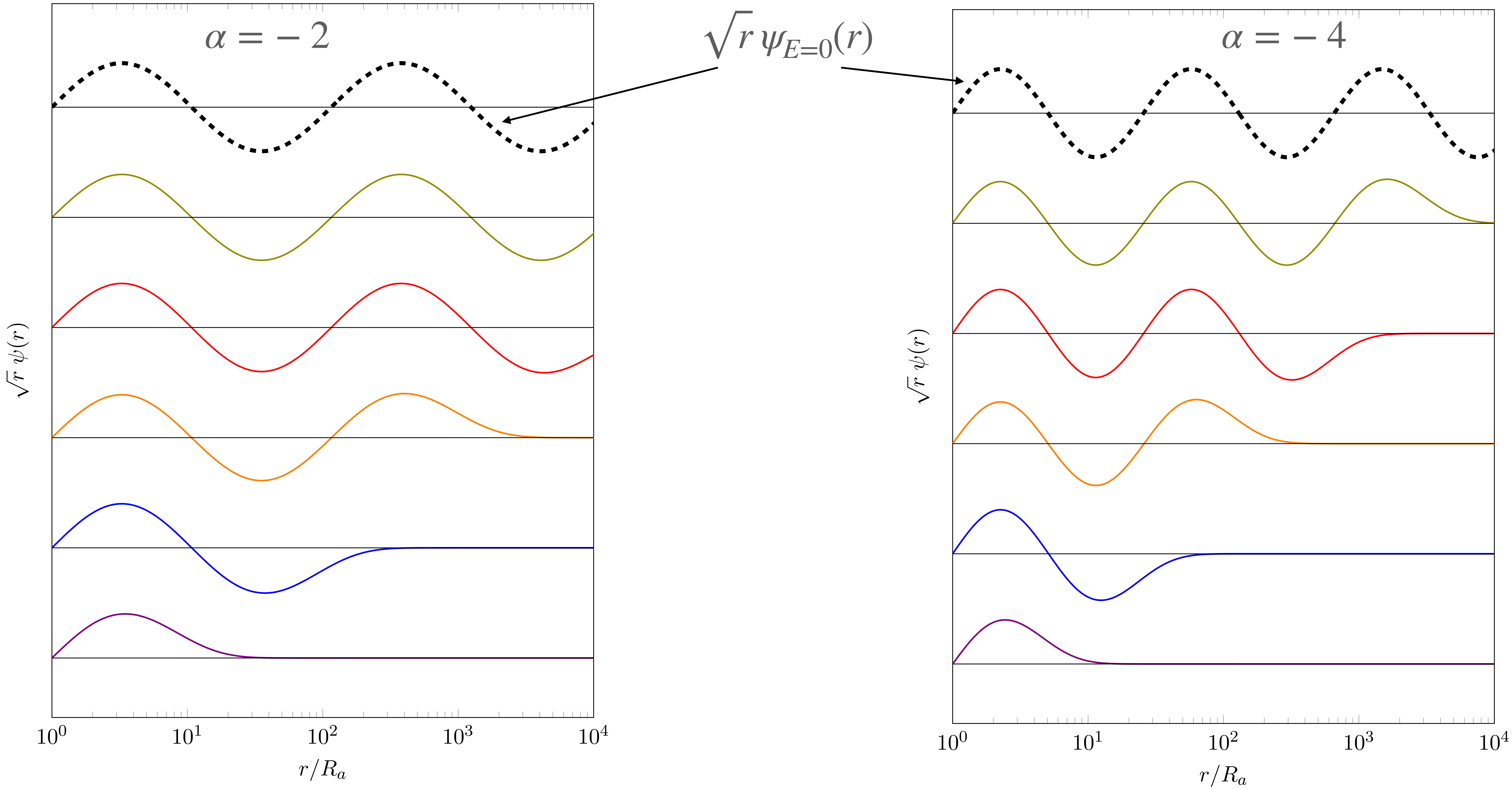
$\rightarrow$ **Fonctions de Bessel**

On veut que $\psi(r) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow +\infty$: $\quad y(x) = K_{\mathrm{i}|s_0|}(x)$

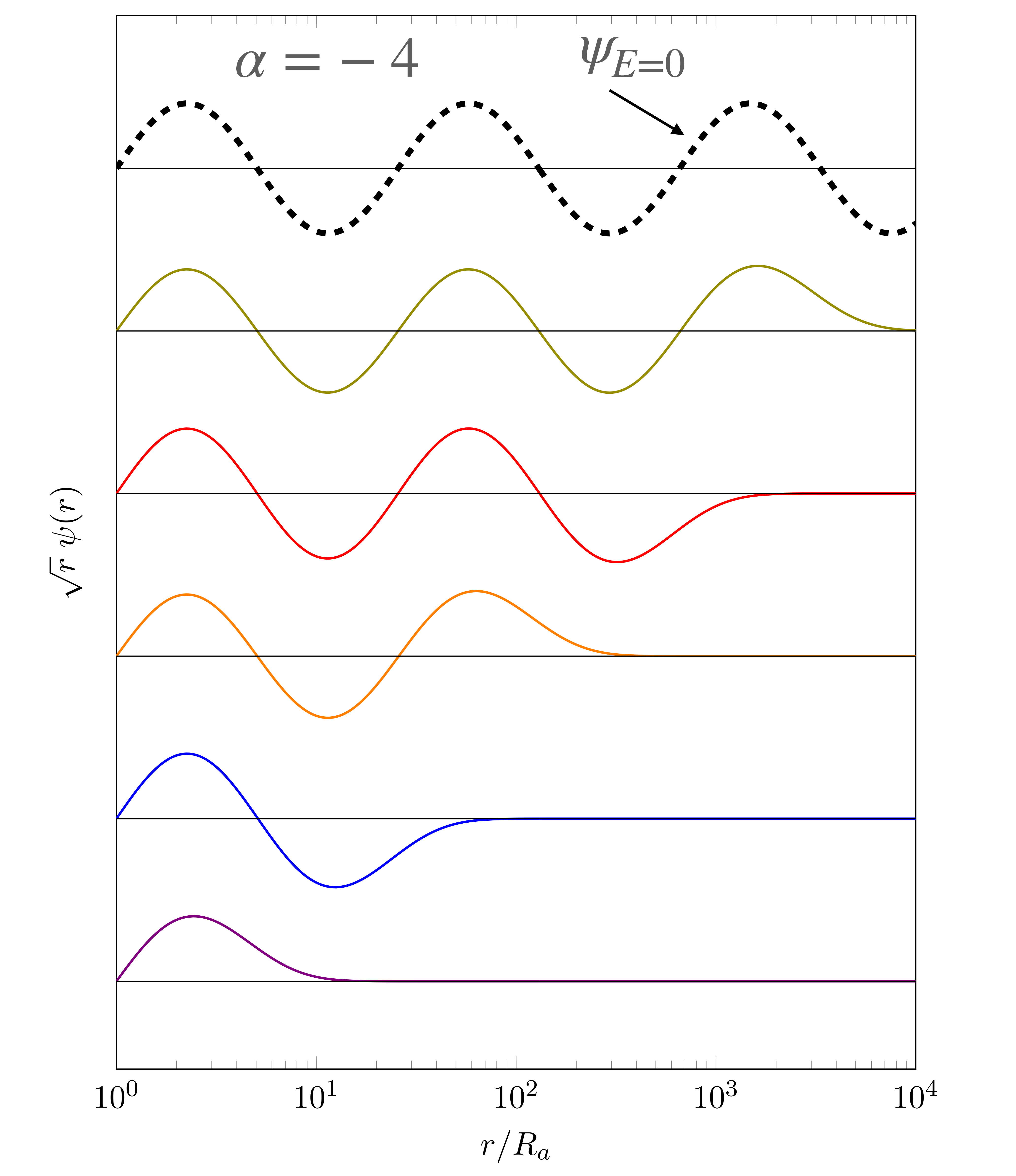
Fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce

Fonctions d'onde des états liés

$$\alpha + \frac{1}{4} < 0 \qquad s_0 = \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \in i\mathbb{R}$$



La forme des états liés et leurs énergies



Similarité entre $\psi_{E=0}(r)$ et $\psi_n(r)$

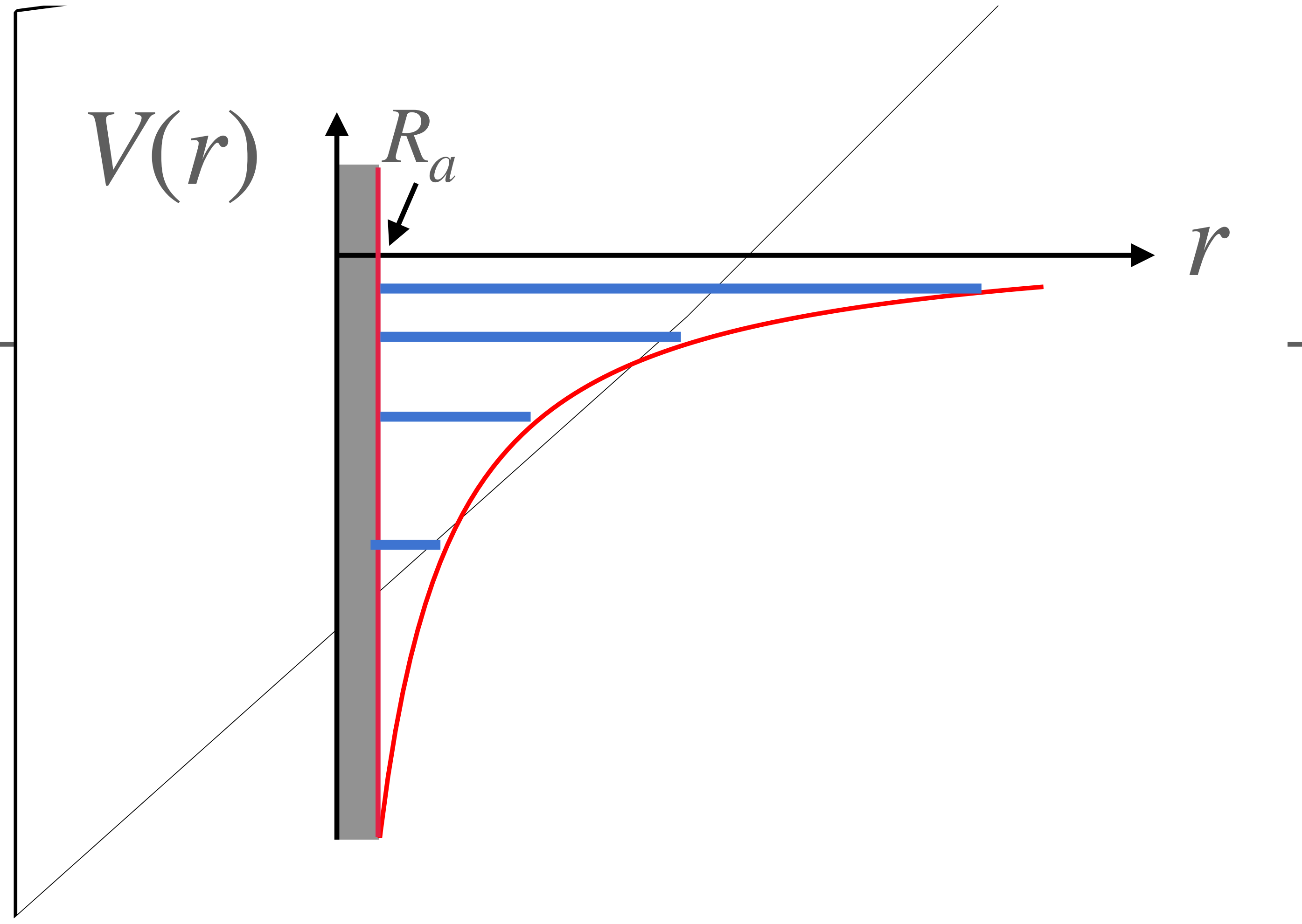
Invariance d'échelle discrète :

$$\psi_n(r) \longrightarrow \psi_{n-1}(r)$$

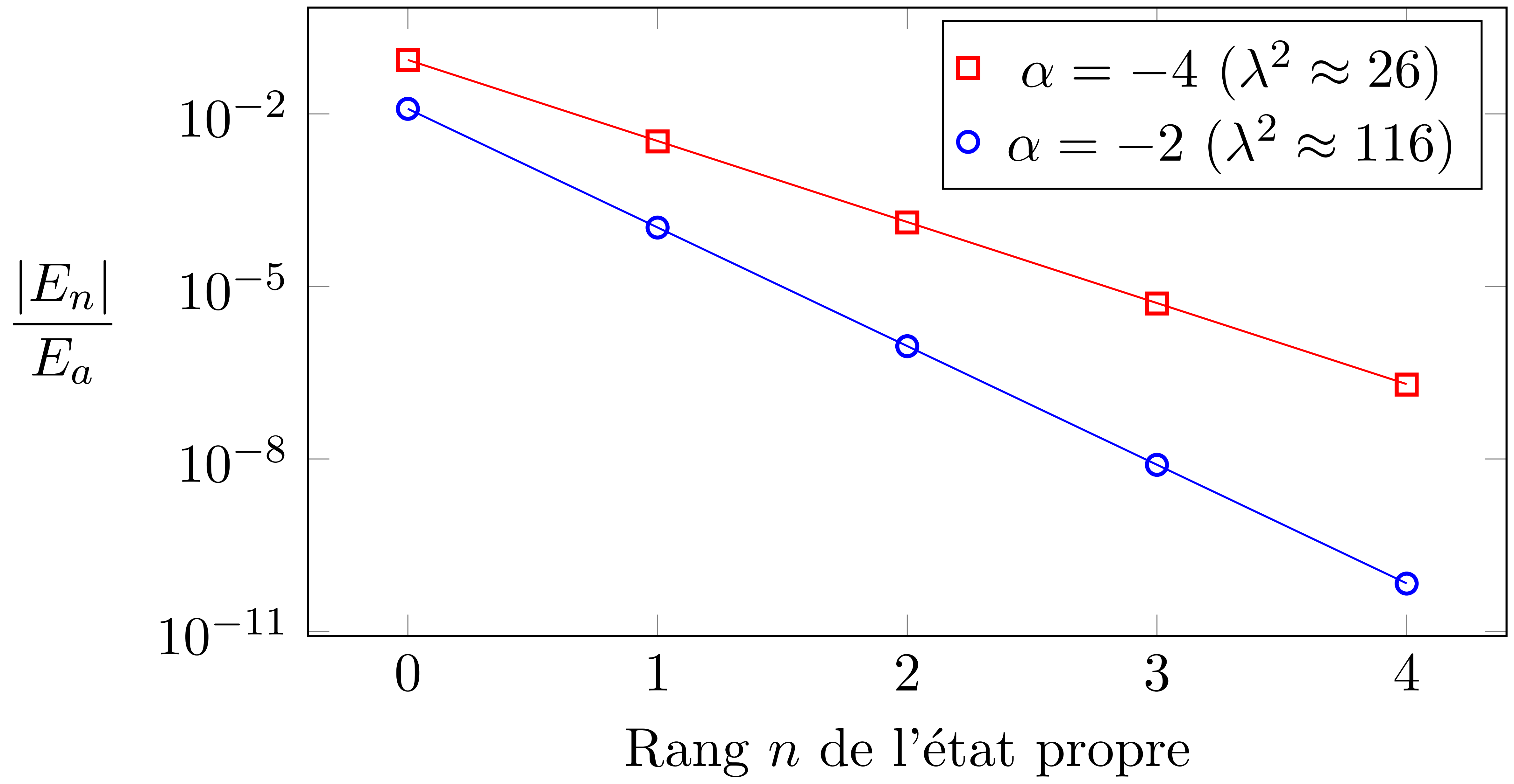
Loi d'échelle sur les énergies :

$$E_{n-1} \approx \lambda^2 E_n \qquad \lambda = e^{\pi/|s_0|}$$

Loi d'échelle sur l'énergie des états liés



$$E_n \approx \frac{1}{\lambda^2} E_{n-1} \qquad \text{ou encore} \qquad E_n \approx \frac{1}{\lambda^{2n}} E_0 \qquad \lambda = \mathrm{e}^{\pi/|s_0|}$$

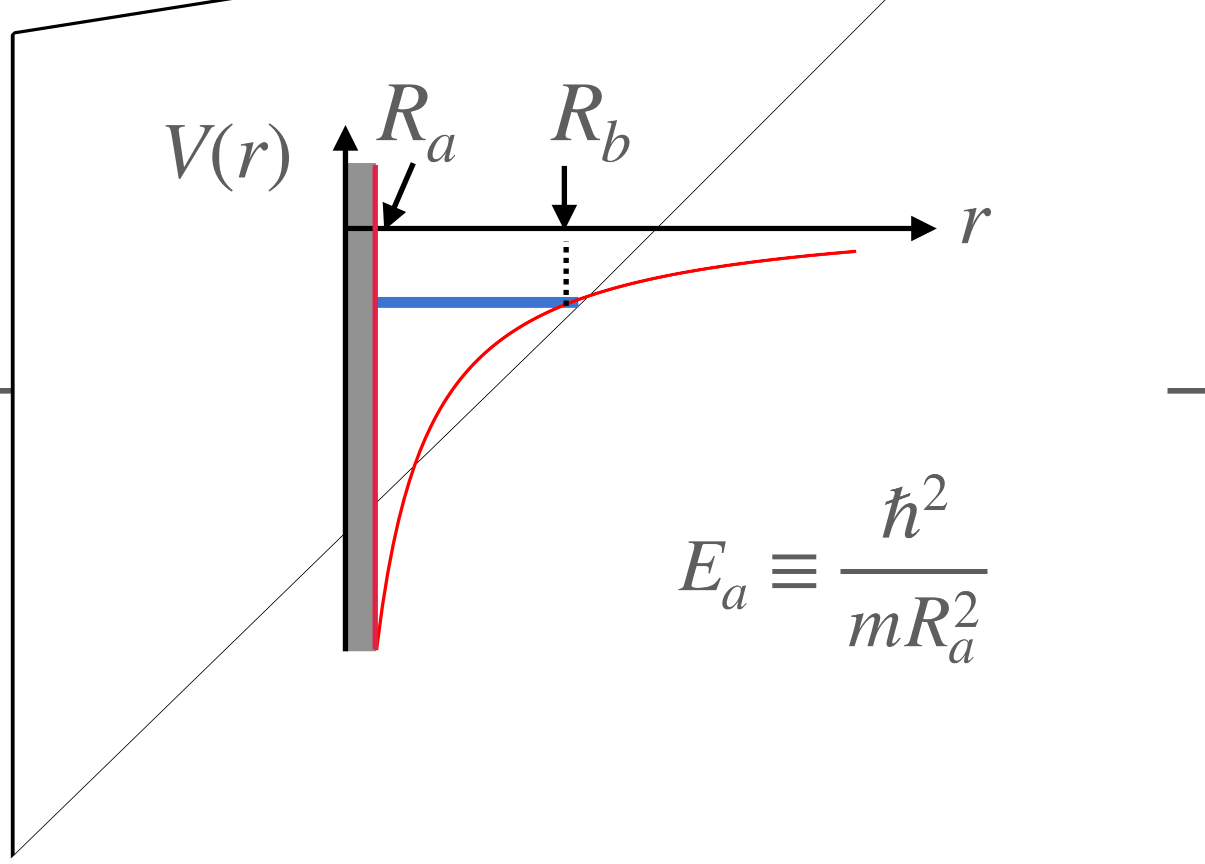


Unité d'énergie :

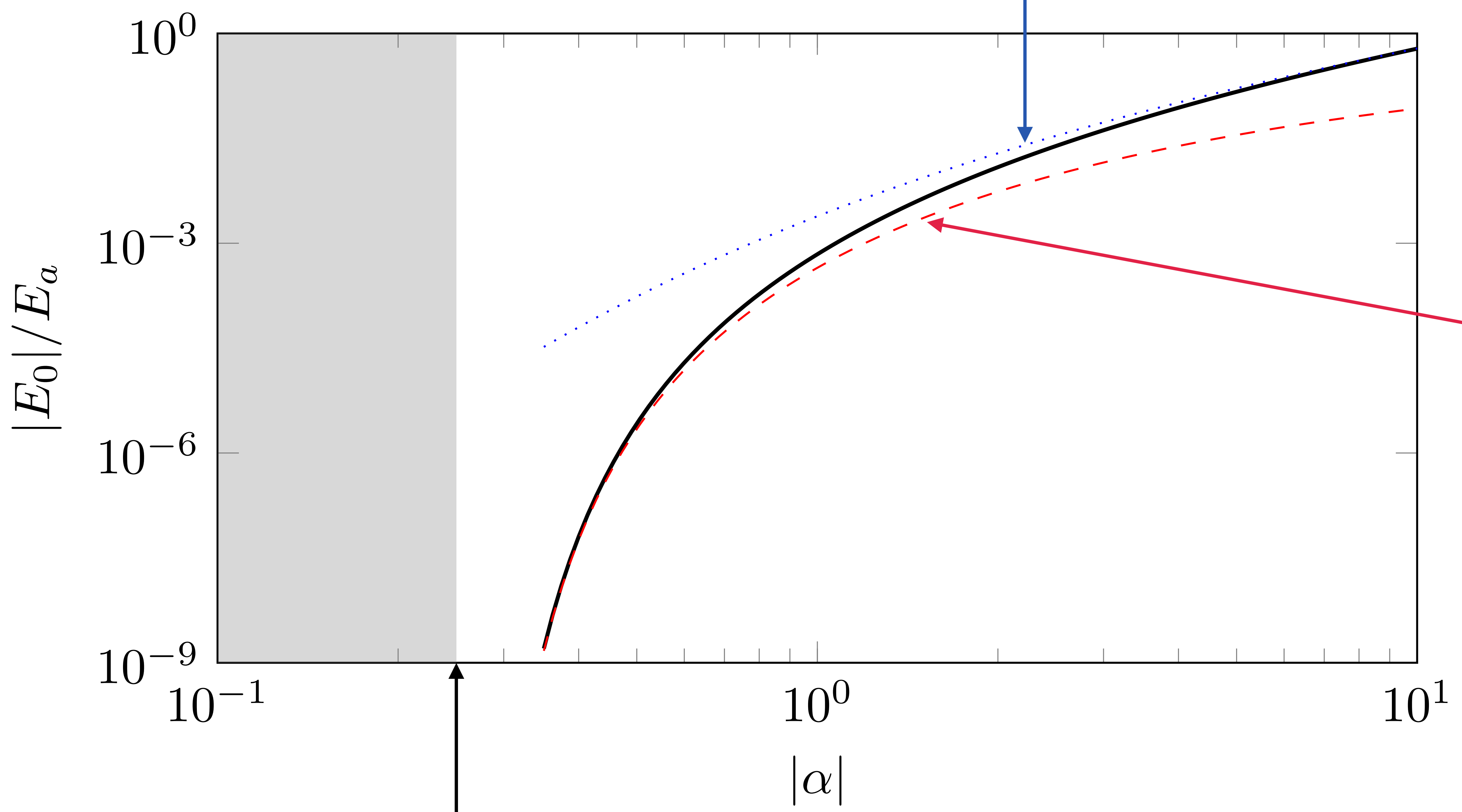
$$E_a \equiv \frac{\hbar^2}{m R_a^2}$$

Invariance d'échelle <u>discrète</u> très bien vérifiée !

Energie de l'état fondamental pour $\alpha < -1/4$



approche WKB, valable pour $|\alpha| \gg 1/4$



$\alpha = -1/4$

Utilisation de la fonction de Bessel $K_{\mathrm{i}|s_0|}$ quand $\alpha + 1/4 \to 0\_$, i.e. $|s_0| \to 0$

Lien avec la renormalisation :
Essin & Griffith 2006, Ovdat & Akkermans 2021

Quelle valeur donner au paramètre α ?

$$s_0 = \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \qquad \lambda = \mathrm{e}^{\pi/|s_0|}$$

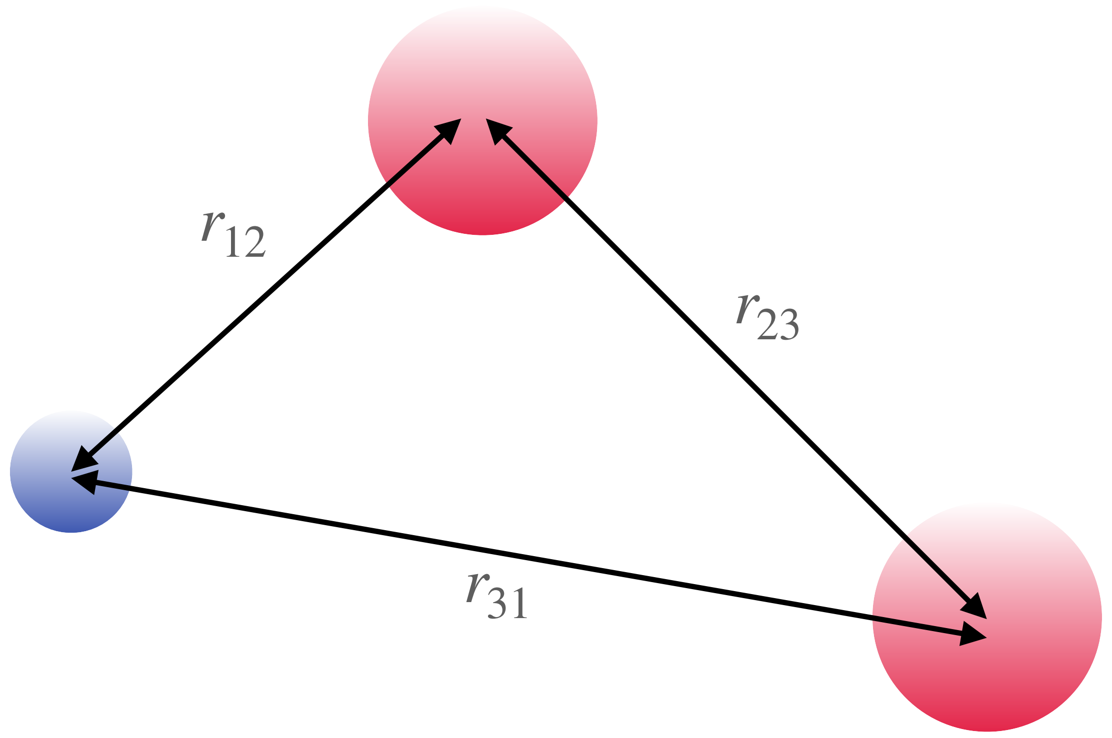
A ce stade, paramètre libre

→ Pour le problème à trois corps identiques d'Efimov, nous verrons (cours 5 et 6)

$$\alpha \approx -1.263 \qquad s_0 \approx \mathrm{i} \times 1.00624 \qquad \lambda = \mathrm{e}^{\pi/|s_0|} \approx 22.7$$

Facteur d'échelle sur les énergies $\lambda^2 \approx 515$ *: c'est très grand !*

→ Pour le problème mMM, nous verrons (cours 3 et 4) que α peut être ajusté via le rapport M/m



Facteur d'échelle λ^2 *plus petit, donc plus favorable pour les expériences*

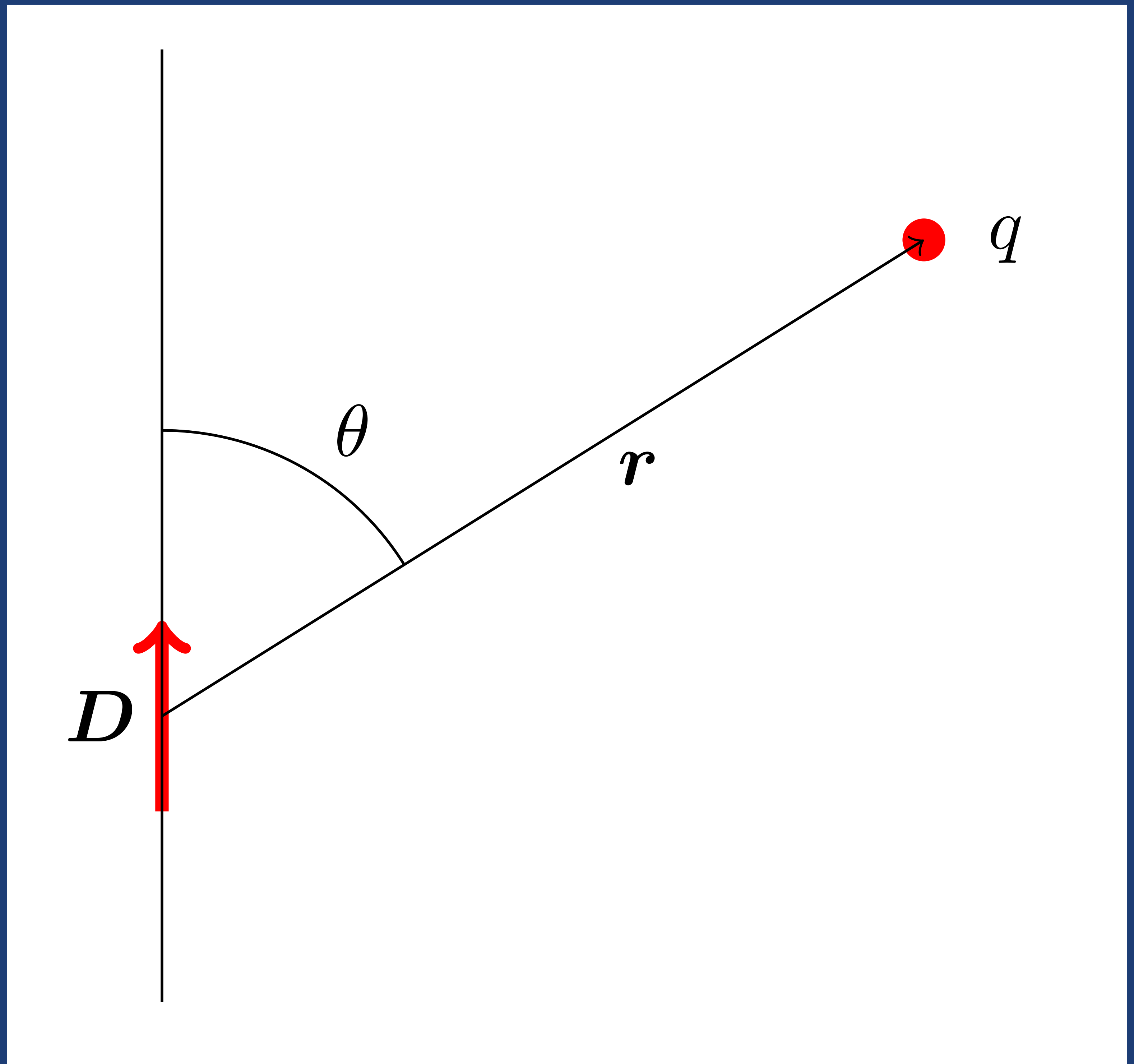
2.

L'interaction "charge - dipôle électrique"

charge - charge : $V(r) \sim \dfrac{q_1 q_2}{r}$

dipôle - dipôle : $V(r) \sim \dfrac{D_1 D_2}{r^3}$

Hamiltonien “charge-dipôle”



Energie d’interaction : $V = \dfrac{q\,\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} = \dfrac{qD}{4\pi\epsilon_0 r^2}\cos\theta$

Equation de Schrödinger en coordonnées sphériques

Séparation des variables “angle - rayon”

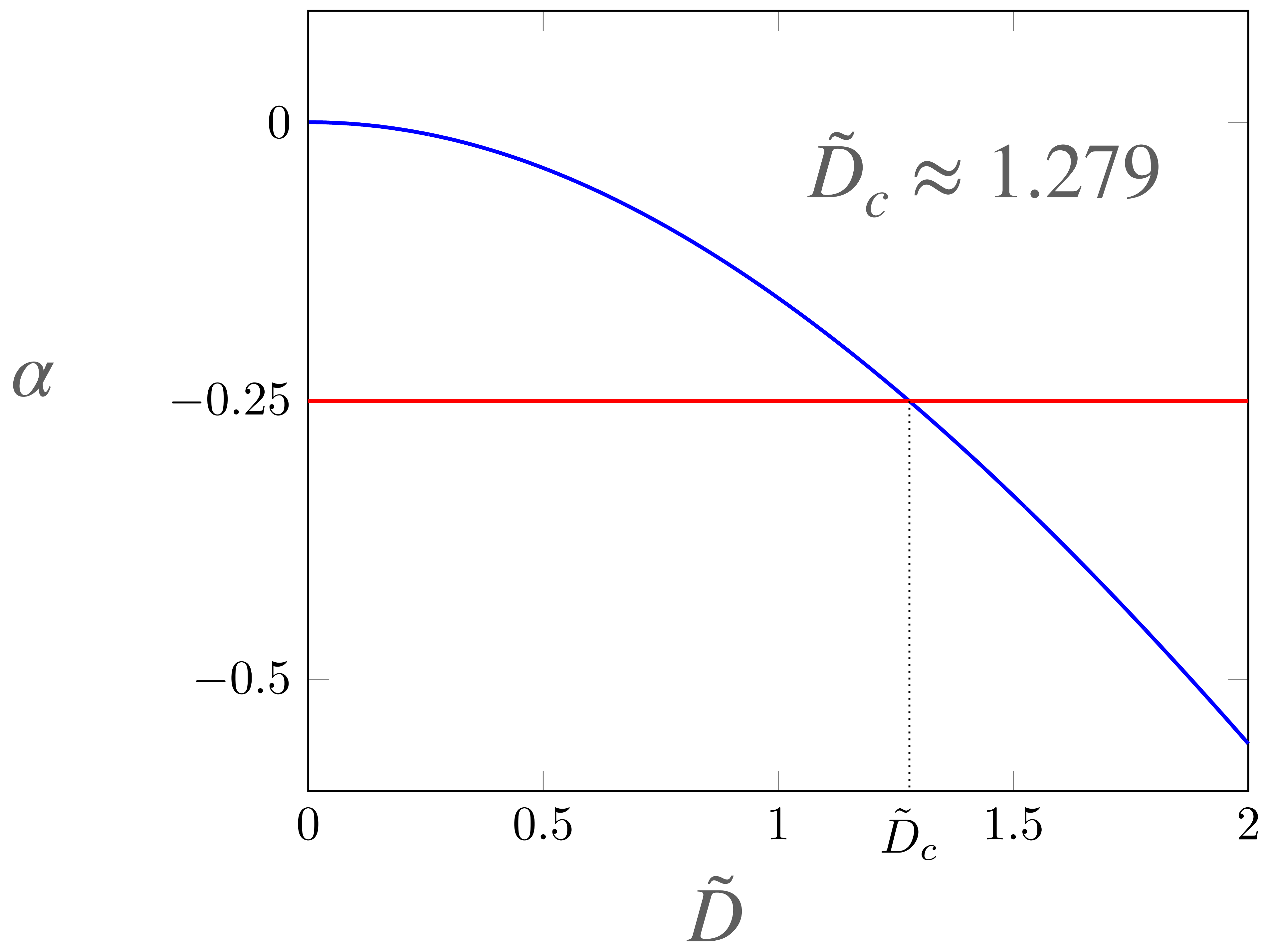
$\longrightarrow$ *valeur critique du dipôle ?*

La valeur critique du dipôle pour avoir $\alpha = -1/4$

$$\tilde{D} = \frac{2m_r qD}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$$

Résolution du problème angulaire : $\left[-\nabla^2_\theta + \tilde{D}\cos\theta\right] f(\theta) = \alpha f(\theta)$

Un outil commode : les polynômes de Legendre
$$\begin{cases} -\nabla^2_\theta P_n(\cos\theta) = n(n+1)\,P_n(\cos\theta) \\ xP_n(x) = \dfrac{n}{2n+1}P_{n-1}(x) + \dfrac{n+1}{2n+1}P_{n+1}(x) \end{cases}$$



électron face à une molécule dipolaire : $m_r \approx m_{\text{electron}}$

$D_c = 5.5\ 10^{-30}$ C.m = 1.6 Debye

L'expérience de Desfrançois *et al* (1992)

Une molécule dipolaire peut-elle capturer un électron ?

$$Xe^{*} + M \longrightarrow Xe^{+} + M^{-}$$

Xe^{*} : état de Rydberg avec *n* de 7 à 70

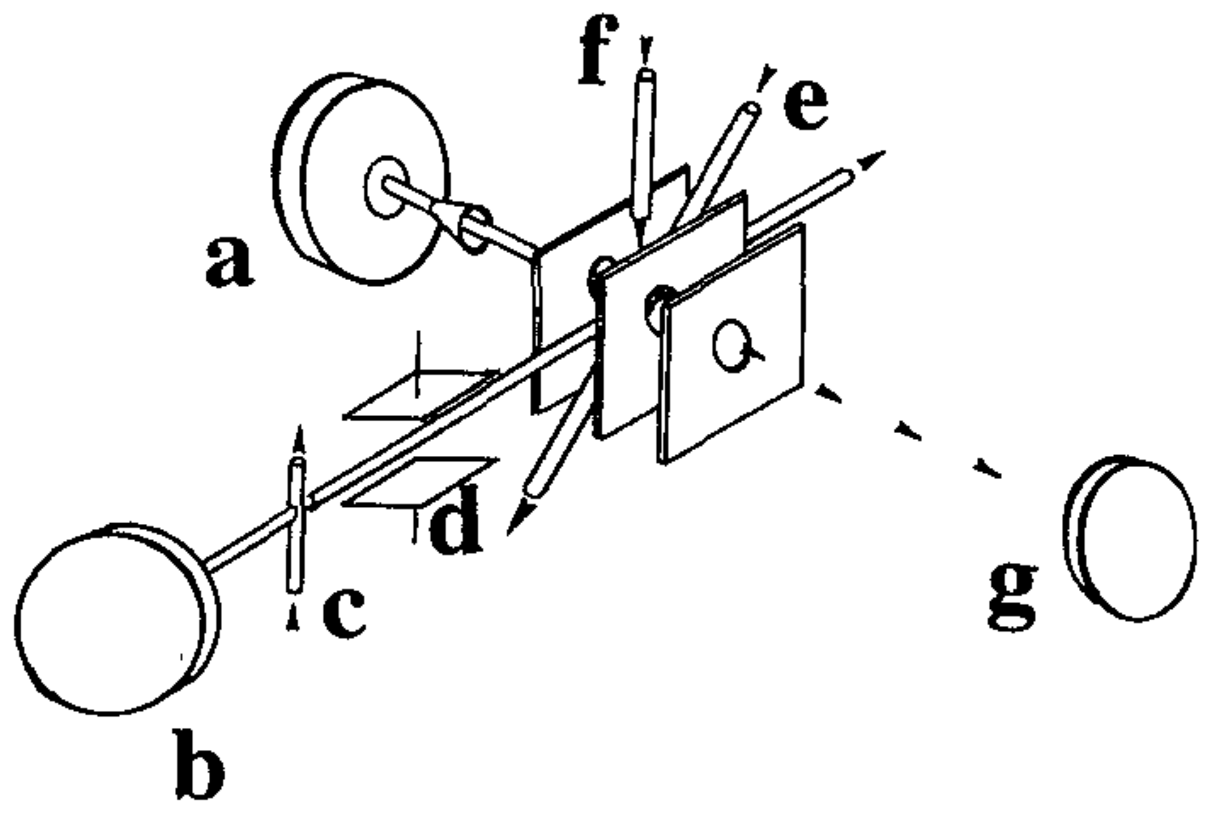
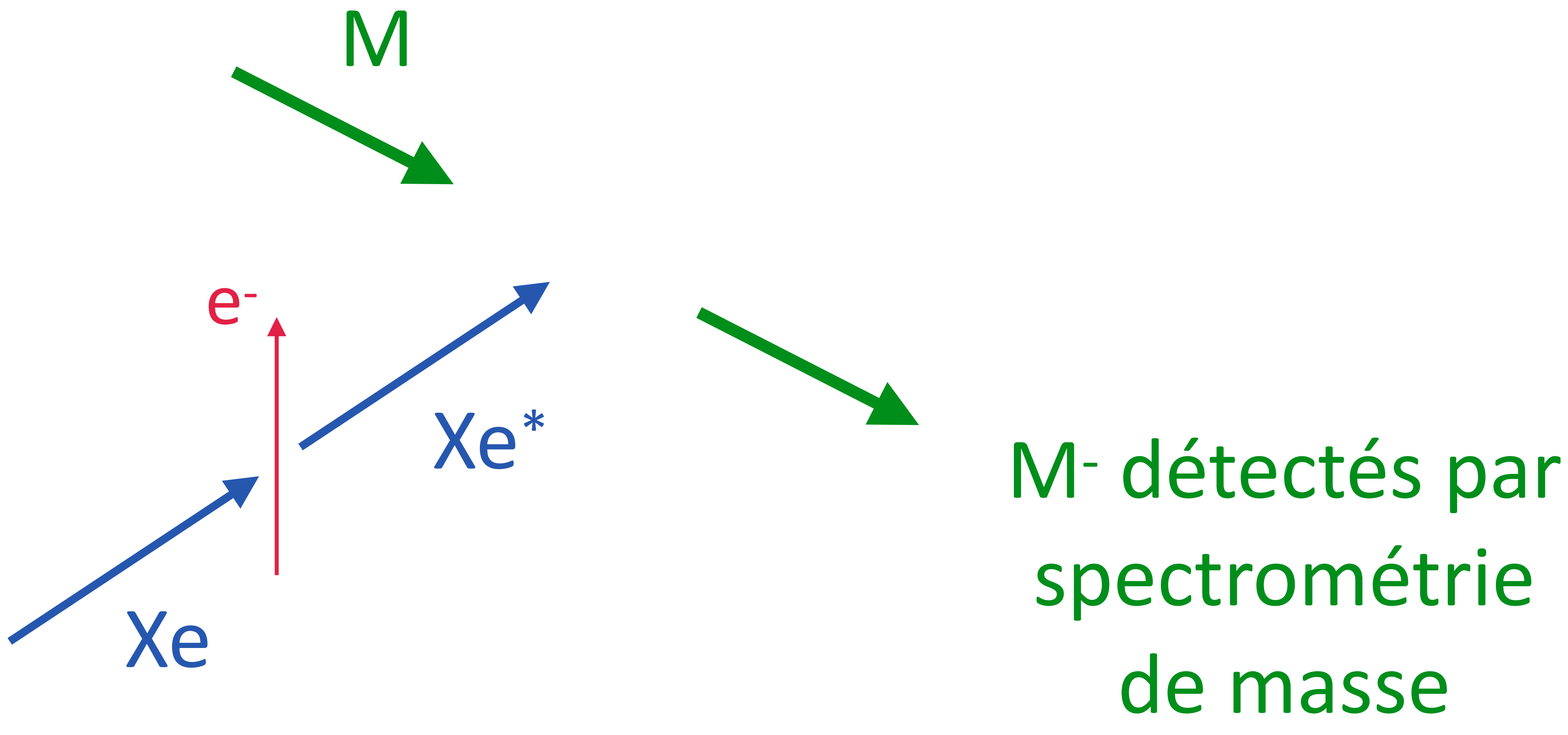


FIG. 1. Experimental setup. (a) Cluster pulsed valve. (b) Xenon pulsed valve. (c) Xenon beam electron bombardment. (d) Field ionization region (3000 V/cm) for destruction of undefined Rydberg atoms and charged particles removal. (e) Tunable pulsed laser beam. (f) Thermal SF_6 calibration inlet. (g) MCP ion detector.

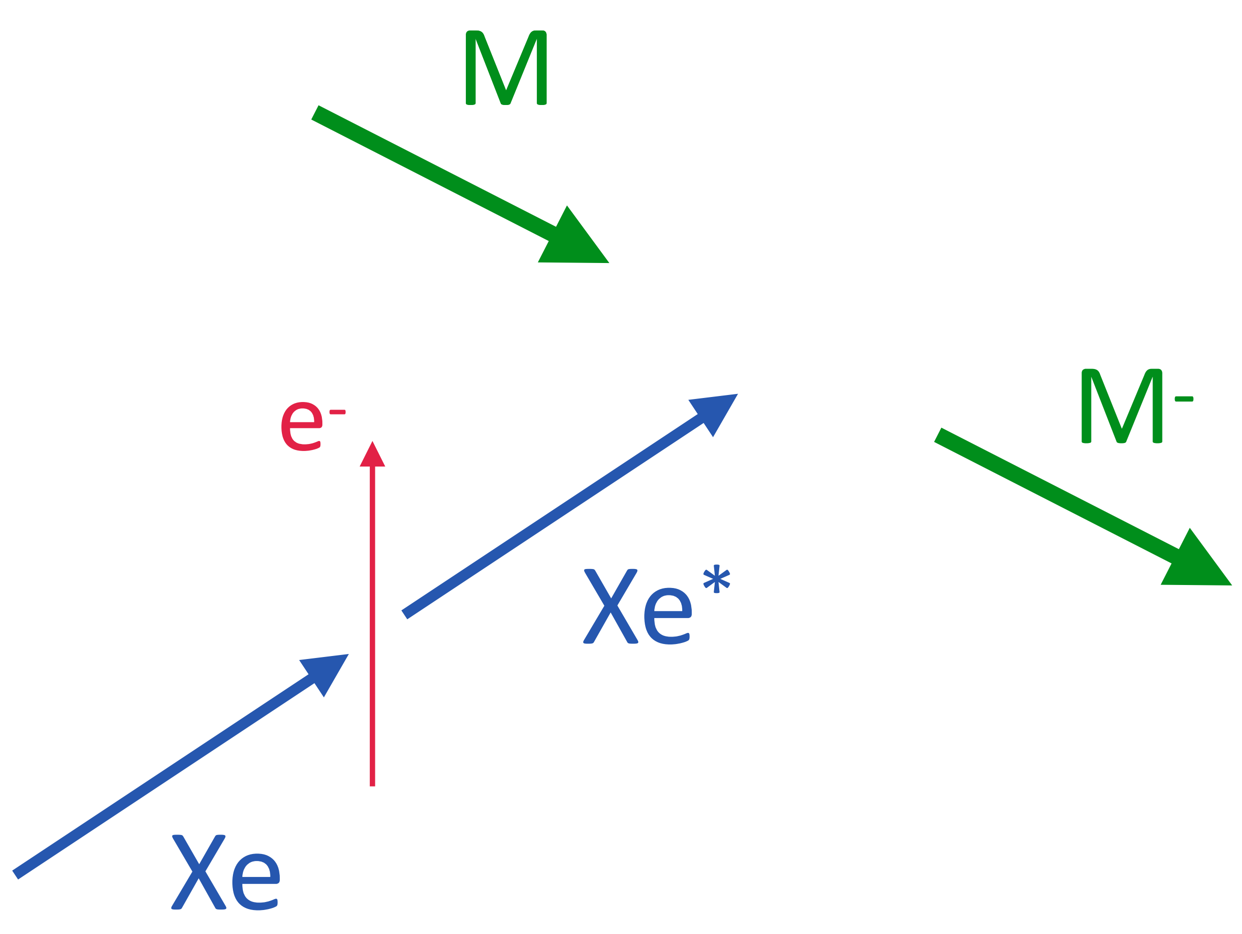


M possibles : acétonitrile, cyclohexanone, acétone, cyclobutanone, acétaldhyde,…

Taux de capture de l'électron par la molécule dipolaire

$D_c^{\text{theo.}} = 1.6$ Debye

$Xe^* + M \longrightarrow Xe^+ + M^-$



D grand:
3.9 Debye

D moyen:
2.7 Debye

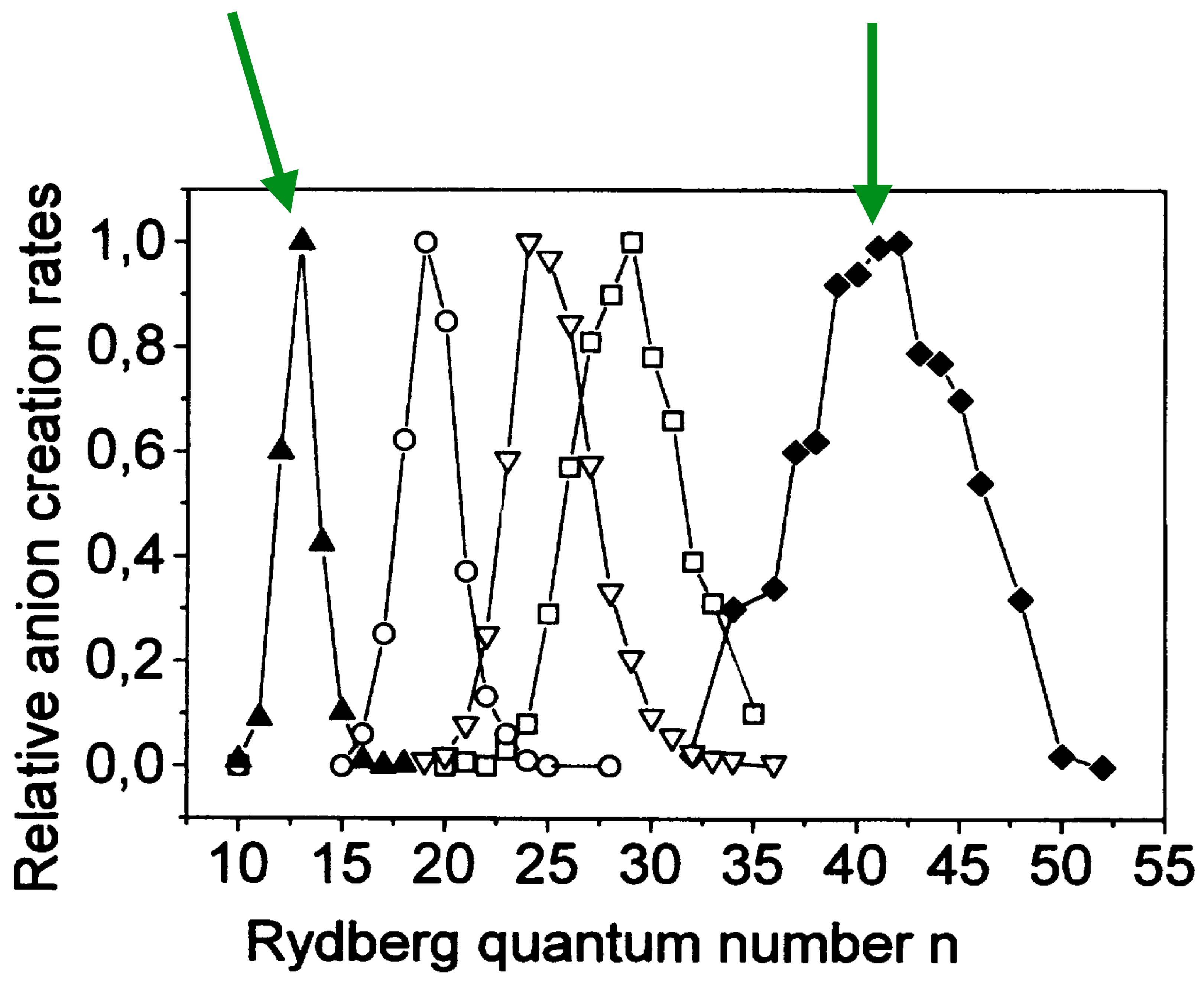


FIG. 1. The n dependences of relative rate constants for the formation of acetonitrile (filled triangles), cyclohexanone (open circles), acetone (open triangles), cyclobutanone (open squares), and acetaldhyde (diamonds) anions in collisions of Xe** (nf) atoms.

Desfrançois et al, Phys. Rev. Lett. **73**, 2436 (1994)

Energie de liaison de l'édifice M$^-$

Desfrançois et al, Phys. Rev. Lett. **73**, 2436 (1994)

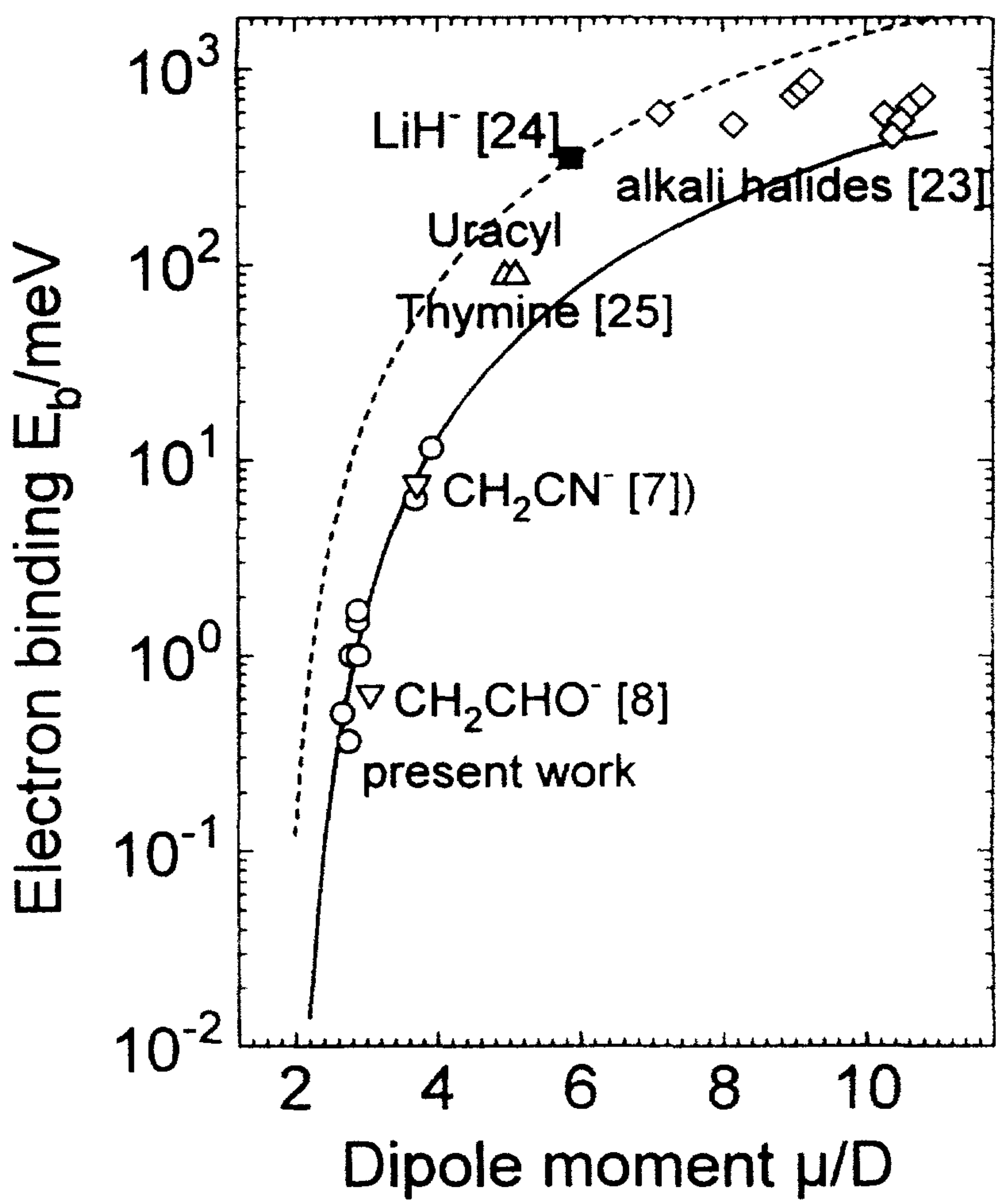


FIG. 2. Electron-binding energies of molecular anions as a function of parent molecular dipole moments. Solid and dashed lines correspond to results of pseudopotential calculations, respectively, for "large" and "small" molecules (see text). Down triangles correspond to excited dipole-bound anions and open circles to the present work experimental values given in Table I. Up triangles are results of *ab initio* calculations of nucleic base anions. The solid square and the open diamonds correspond to photoelectron spectroscopy experimental determinations.

Courbes : deux modélisations possibles de la physique à courte distance (notre paramètre R_a)

Cette expérience mériterait d'être reprise avec des molécules froides :

→ Valeur la plus basse mesurée $D = 2.6$ Debye alors qu'on prédit $D_c = 1.6$ Debye

→ Uniquement un état lié a été détecté alors qu'on en attend (naïvement) une infinité

3.

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

Propriétés également présentes pour

- le gaz de Bose à deux dimensions en champ classique (Pitaevskii & Rosch, 1997)
- le gaz de Fermi à trois dimensions dans le régime unitaire (Werner & Castin, 2006)

Lev Pitaevskii (1933-2022)

Invariances pour une particule quantique libre ?

Niederer (1972) : on considère une particule quantique libre, avec l'hamiltonien $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\, \psi$$

Quelles sont les transformations de l'espace et du temps qui laissent cette équation invariante ?

Question plus générale que la recherche d'une relation entre états propres

Réponse à 3D : un groupe à 12 paramètres

- 3 pour les translations
- 3 pour les rotations
- 3 pour les changements de repère galiléens
- 3 types de transformations supplémentaires

Les trois transformations “supplémentaires”

Translation dans le temps : $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} \qquad t' = t + t_0$

Dilatations : $\boldsymbol{r}' = \lambda \boldsymbol{r} \qquad t' = \lambda^2 t$

Expansions : $\boldsymbol{r}' = \dfrac{\boldsymbol{r}}{\gamma t + 1} \qquad t' = \dfrac{t}{\gamma t + 1}$

La combinaison de ces trois transformations forme un groupe à trois paramètres

$$[M] = \begin{pmatrix} \gamma_1 & \gamma_2 \\ \gamma_3 & \gamma_4 \end{pmatrix} \longrightarrow \quad \boldsymbol{r}' = \frac{\boldsymbol{r}}{\gamma_3 t + \gamma_4} \qquad t' = \frac{\gamma_1 t + \gamma_2}{\gamma_3 t + \gamma_4}$$

$$\det(M) = \gamma_1\gamma_4 - \gamma_2\gamma_3 = 1$$

Invariance “conforme”

Invariance conforme

$$\boldsymbol{r}' = \frac{\boldsymbol{r}}{\gamma_3 t + \gamma_4} \qquad t' = \frac{\gamma_1 t + \gamma_2}{\gamma_3 t + \gamma_4}$$

L'invariance conforme trouvée pour la particule libre se généralise telle quelle :

- au cas d'une particule dans un potentiel en $1/r^2$
- au cas de N particules en interaction binaire $\displaystyle\sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}^2}$

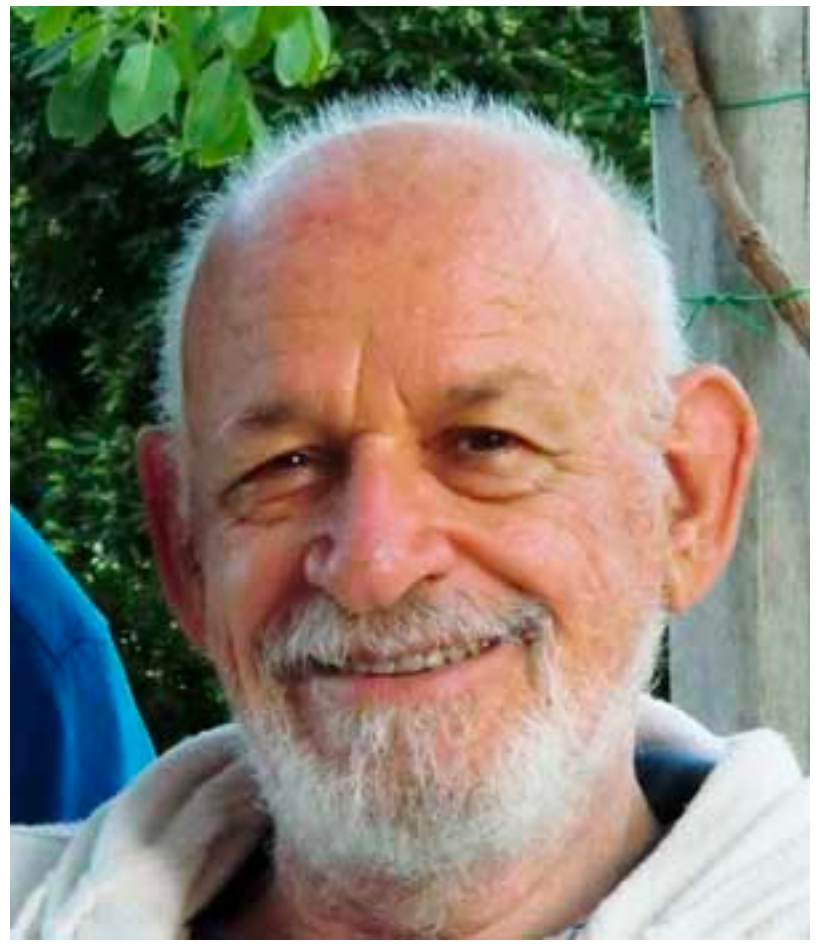
et - avec une modification simple - au cas où un potentiel harmonique $\dfrac{1}{2}m\omega^2 r^2$ est également présent

Symétrie "cachée" ou symétrie "dynamique", qui va au delà des symétries de translation et de rotation

Génère de nouvelles constantes du mouvement, en plus de l'impulsion et du moment cinétique

4.

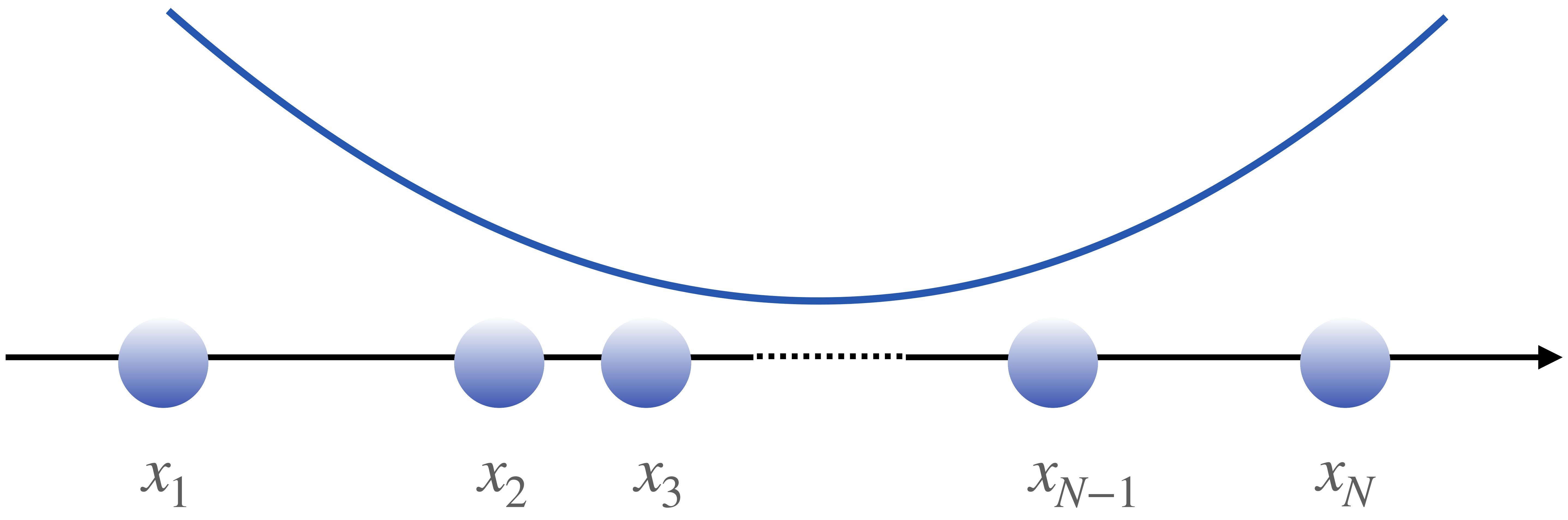
Le cas uni-dimensionnel



Francesco Calogero

Bill Sutherland

Le problème à N corps considéré



Confinement harmonique global

+

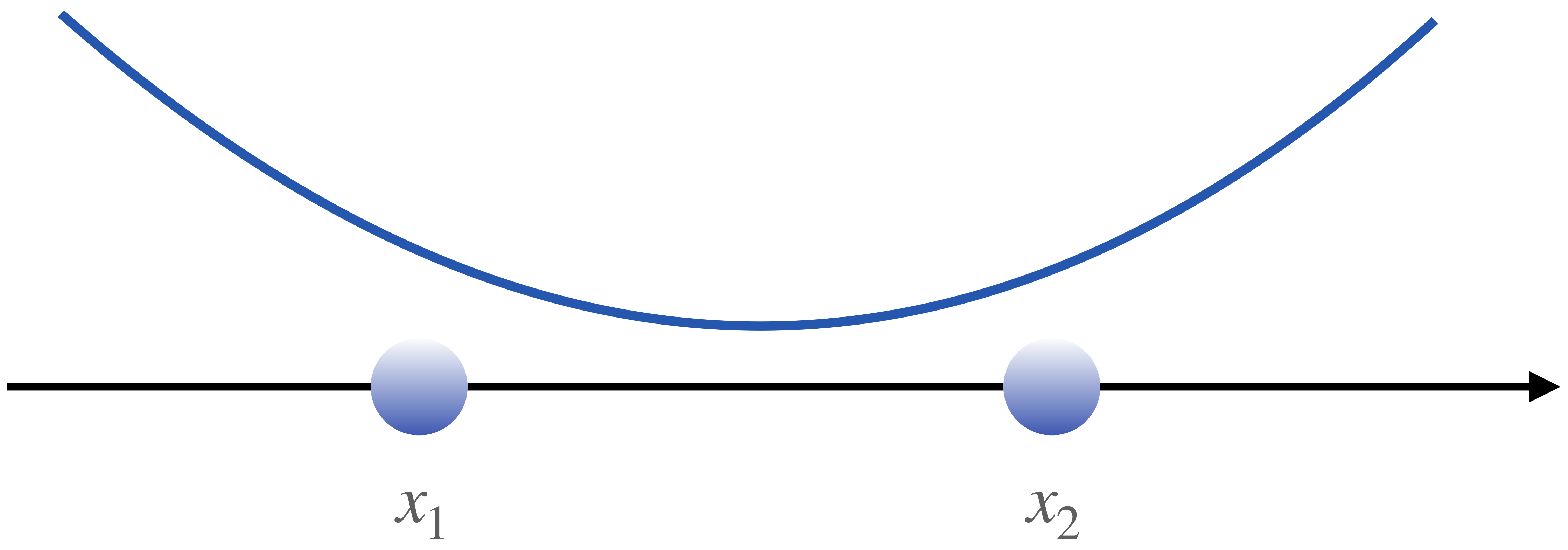
interactions binaires répulsives en $1/r^2$

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

$g > 0$

Quels états propres, quelles énergies ?

Le problème à deux corps



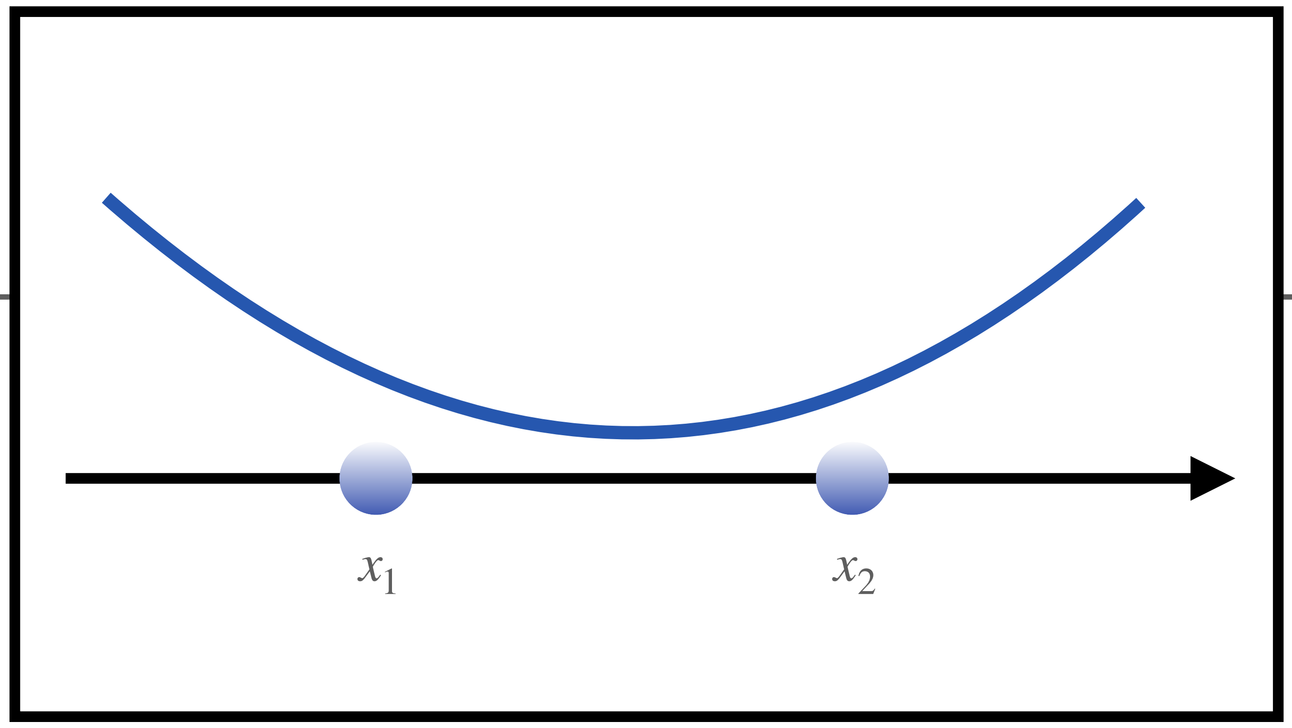
$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_i^2 \right) + \frac{g}{(x_1 - x_2)^2}$$

$$= \hat{H}_{\mathrm{CdM}} + \hat{H}_{\mathrm{rel}}$$

Mouvement du centre de masse : $\hat{H}_{\mathrm{CdM}} = \dfrac{\hat{P}^2}{2M} + \dfrac{1}{2} M\omega^2 x^2$ *simple oscillateur harmonique,* $M = 2m$

Mouvement relatif : $\hat{H}_{\mathrm{rel}} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m_{\mathrm{r}}} + \dfrac{1}{2} m_{\mathrm{r}}\omega^2 x^2 + \dfrac{g}{x^2}$ $m_{\mathrm{r}} = m/2$

Etat fondamental du problème à deux corps 1D



$$\hat{H}_{\mathrm{rel}} = \frac{\hat{p}^2}{2m_{\mathrm{r}}} + \frac{1}{2} m_{\mathrm{r}} \omega^2 x^2 + \frac{g}{x^2}$$

On choisit l'unité de longueur pour l'oscillateur harmonique $a_{\mathrm{ho}} = \sqrt{\hbar / m_{\mathrm{r}} \omega}$ $\qquad m_{\mathrm{r}} = m/2$

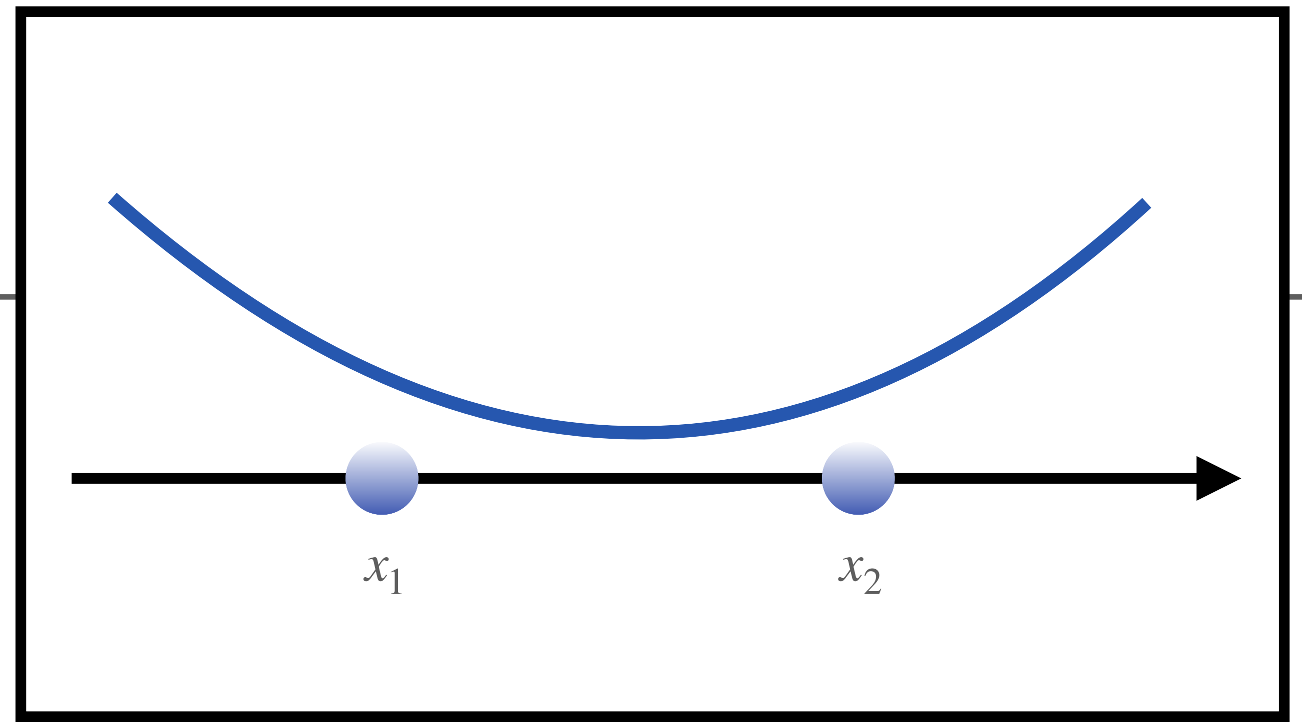
Il faut alors résoudre l'équation aux valeurs propres :

$$-\psi''(x) + \left(x^2 + \frac{\alpha}{x^2} \right) \psi(x) = \frac{2E}{\hbar \omega} \psi(x) \qquad \alpha = \frac{2 m_{\mathrm{r}} g}{\hbar^2}$$

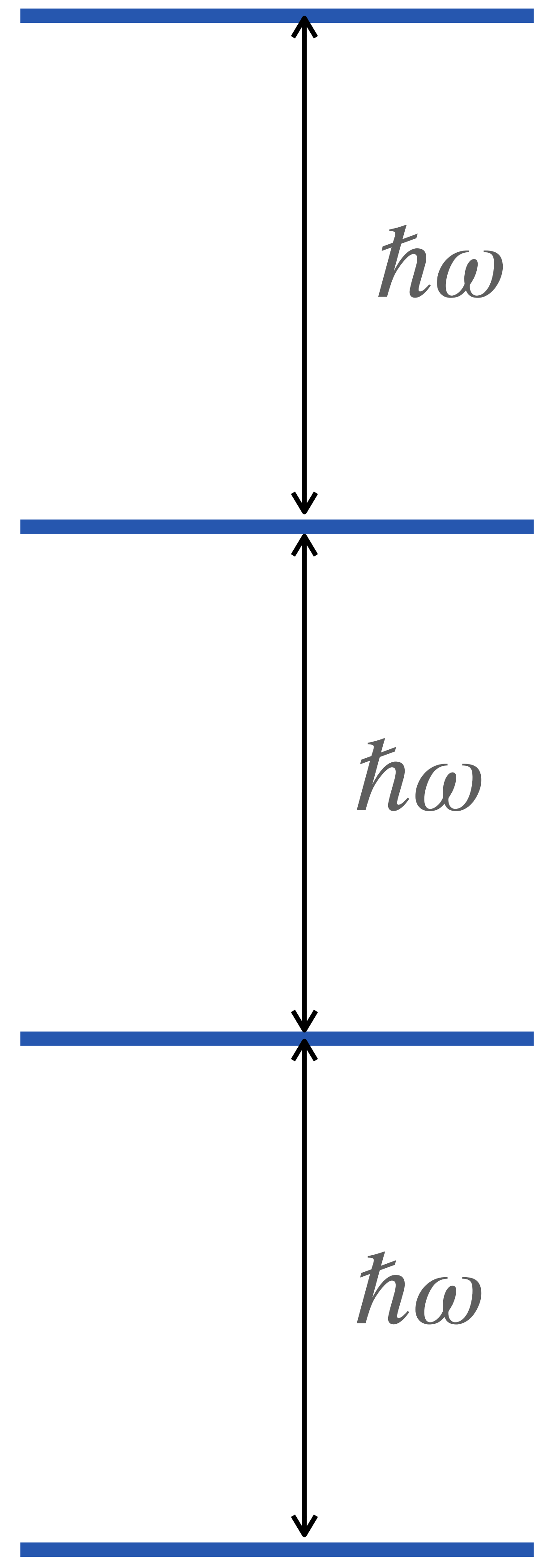
On peut vérifier qu'une solution exacte est : $\psi(x) = x^{s+1}\, \mathrm{e}^{-x^2/2}$ $\qquad E = \hbar \omega \left(s + \frac{3}{2} \right)$

avec s solution positive de $s^2 + s - \alpha = 0$: $\quad s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}}$

Le spectre du problème à deux corps



$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2}\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right) + \frac{g}{(x_1 - x_2)^2}$$

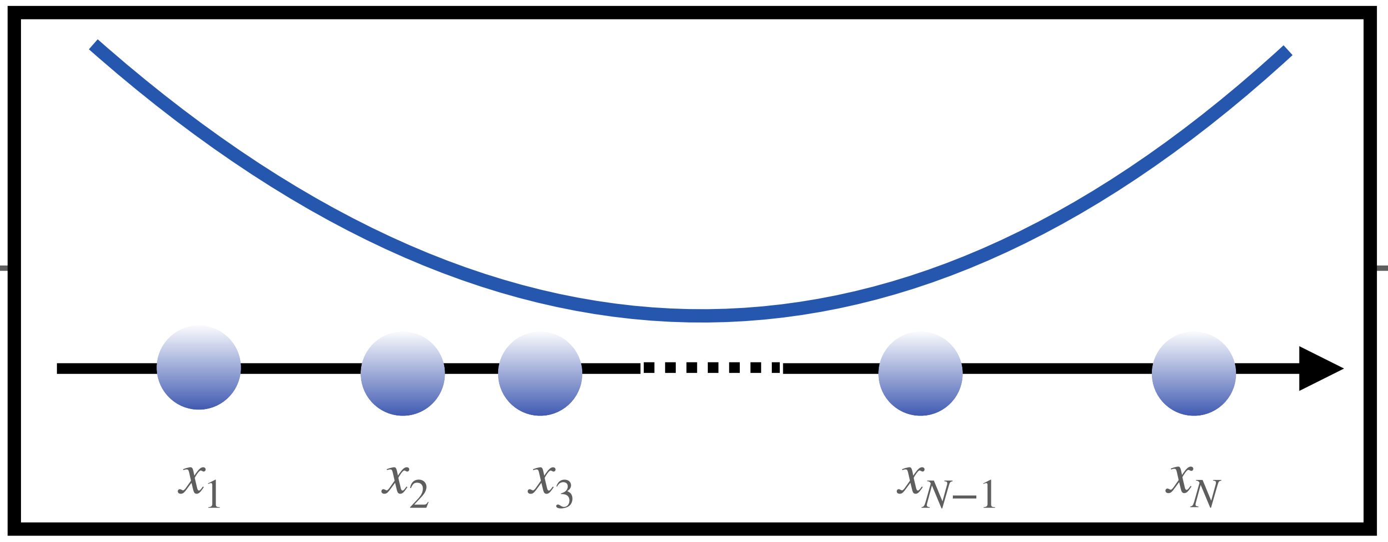


Spectre de niveaux équidistants, comme pour un pur oscillateur harmonique !

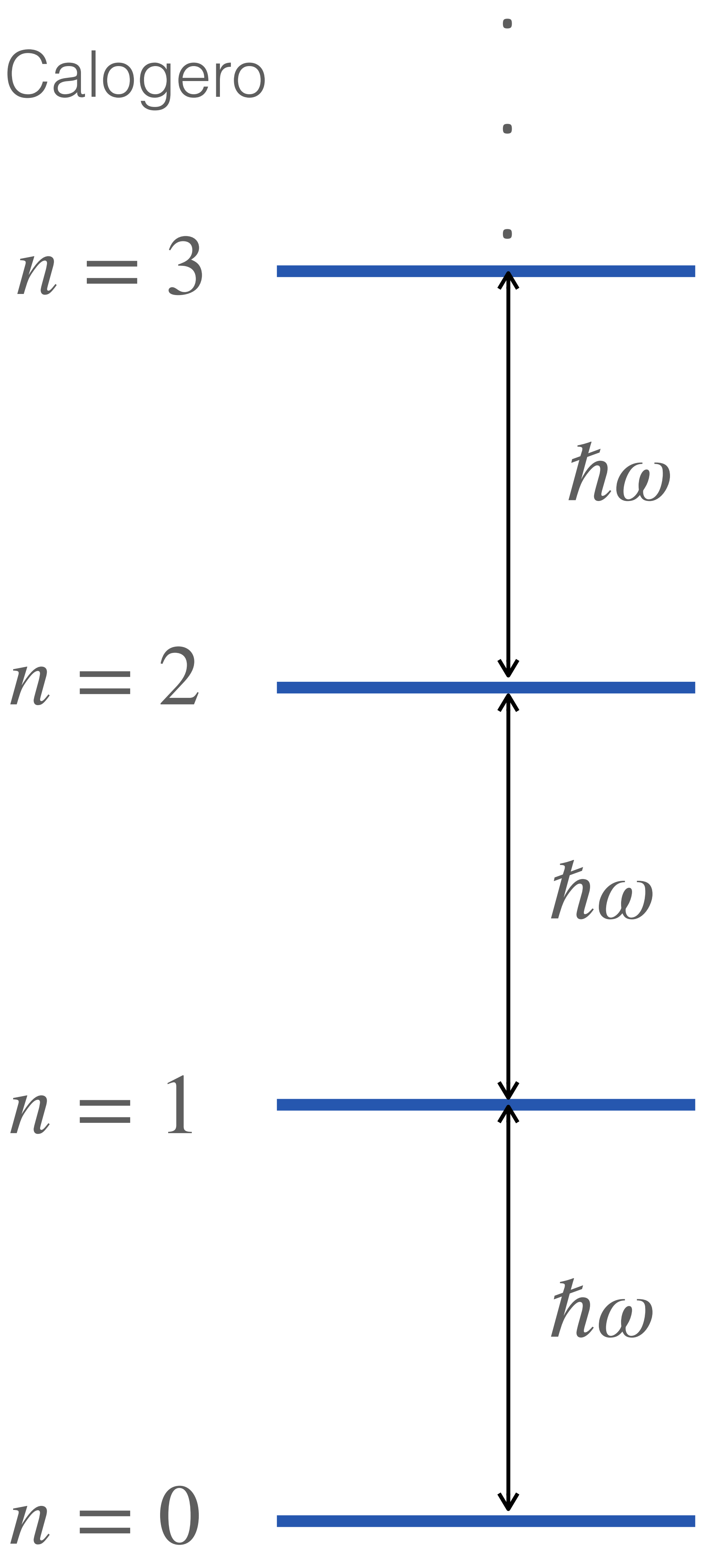
Etat fondamental : $E = \overbrace{\frac{\hbar\omega}{2}}^{E_{\mathrm{CdM}}} + \overbrace{\hbar\omega\left(s + \frac{3}{2}\right)}^{E_{\mathrm{rel}}} = \hbar\omega(s+2)$

$$\Psi(x_1, x_2) = \mathrm{e}^{-2X^2}\, x^{s+1}\, \mathrm{e}^{-x^2/2} \; = \; (x_1 - x_2)^{s+1}\, \mathrm{e}^{-(x_1^2 + x_2^2)}$$

Le résultat pour le problème à N corps



Calogero



$$V_{ij} = \frac{g}{(x_i - x_j)^2} \qquad \alpha = \frac{mg}{\hbar^2} \qquad s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} > 0$$

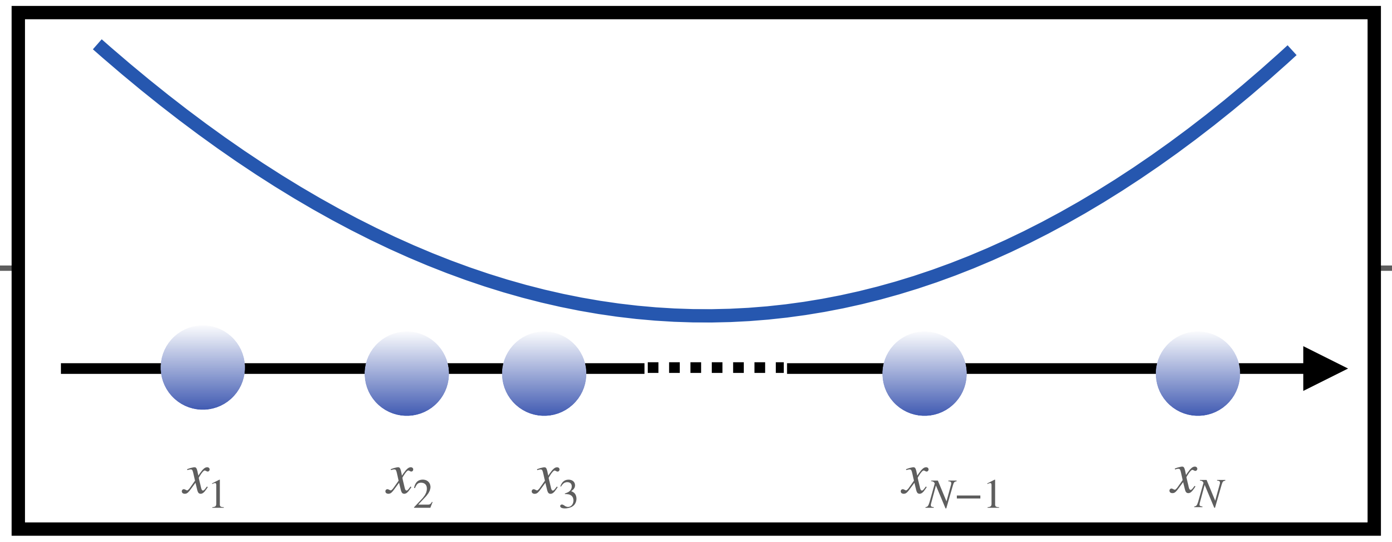
On garde un spectre de niveaux équidistants !!!

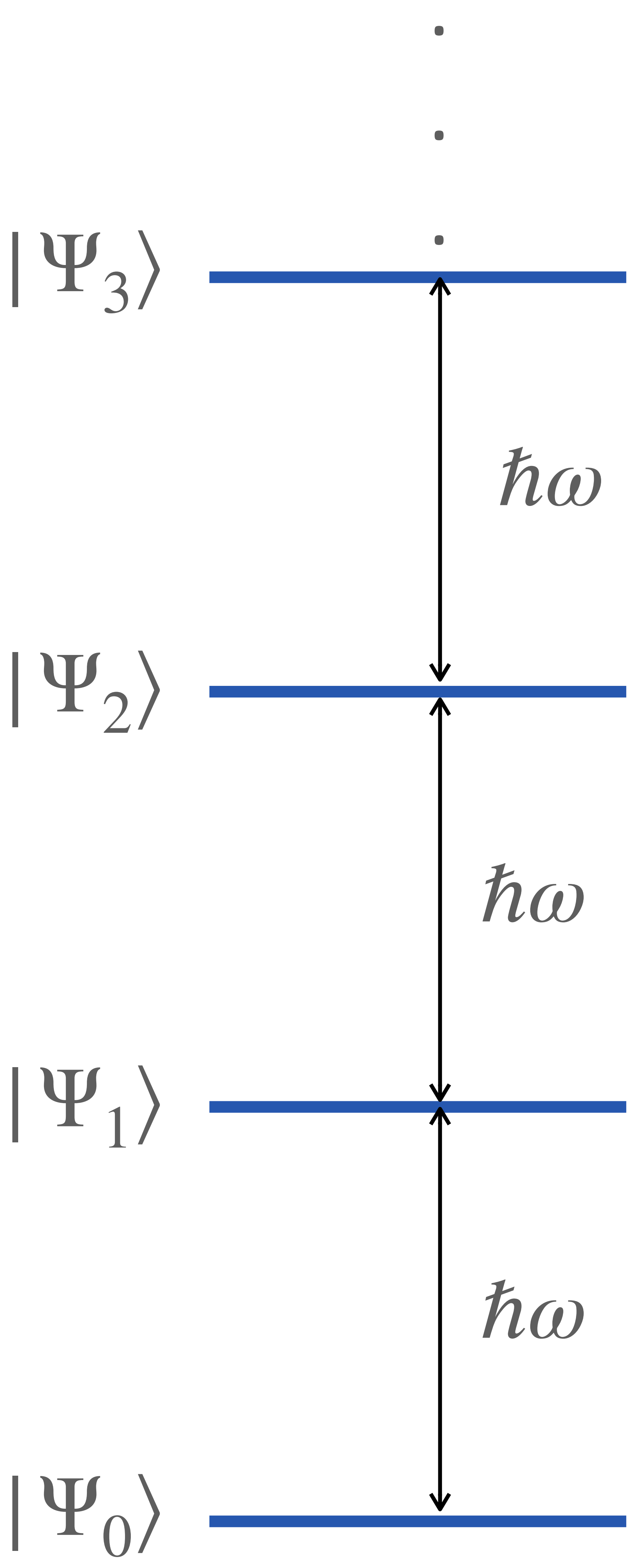
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{N(N-1)}{2}s + \frac{N^2}{2}\right)$$

Etat fondamental :

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

Dynamique du système 1D





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

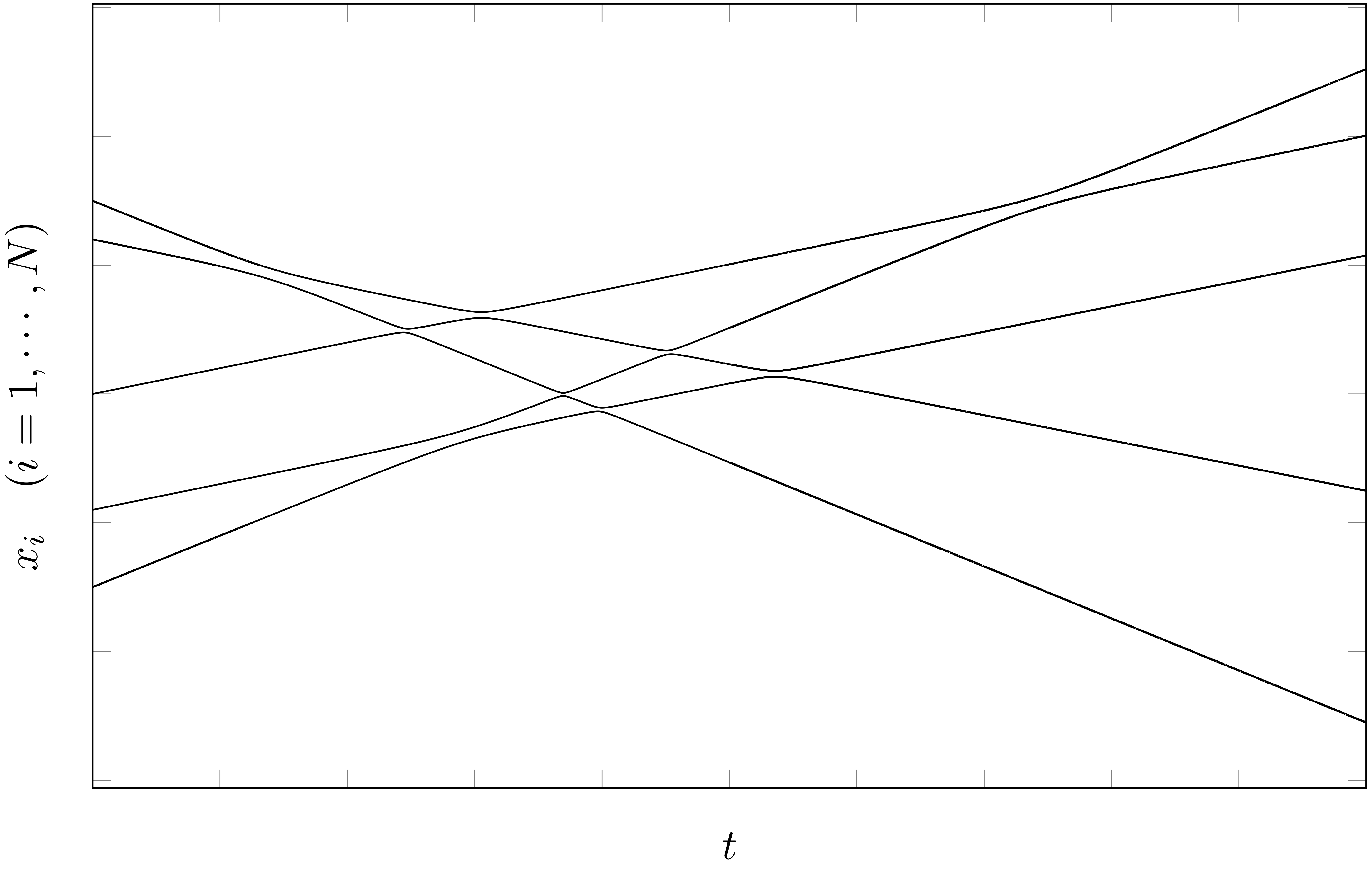
A l'instant t : $\quad |\Phi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0 t/\hbar} \sum_{\nu} c_\nu \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_\nu \omega t} |\Psi_\nu\rangle$

Evolution de la valeur moyenne d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$:

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

Quantité toujours périodique de période $2\pi/\omega$

Le mouvement classique à une dimension



N particules en interaction répulsive

$$V_{ij} = \frac{g}{(x_i - x_j)^2}$$

Vitesses incidentes : $v_1, v_2, \ \ldots \ , v_N$

Quelles ont les vitesses finales ?

Réponse : un simple échange !

$$v'_i = v_{N+1-i}, \qquad i = 1, \cdots, N$$

Bilan général

Mouvement quantique (ou classique) dans un potentiel en $1/r^2$

$$V(r) = \frac{g}{r^2} \qquad\qquad \alpha = \frac{mg}{\hbar^2} \; + \; \ell(\ell+1)$$

Nombreux résultats exacts liés à une symétrie "cachée" (ou symétrie dynamique)

- Cas répulsif (ou attractif faible avec $\alpha > -1/4$) : invariance d'échelle continue
- Cas attractif fort $\alpha < -1/4$: régularisation indispensable au voisinage de $r = 0$

$\longrightarrow$ Brisure de l'invariance d'échelle continue

$\longrightarrow$ Une invariance d'échelle discrète subsiste, avec une suite infinie d'états liés $E_n < 0$

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \lambda^{-2} \qquad\qquad \lambda = \mathrm{e}^{\pi/|s_0|} \qquad\qquad s_0 = \sqrt{\alpha + \frac{1}{4}} \in \mathrm{i}\mathbb{R}$$