

Chapitre 5

Le problème d’Efimov pour trois bosons identiques

Sommaire

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Paramétrisation de l’espace | 2 |
| 1-1 | Condition aux limites de Bethe–Peierls | 3 |
| 1-2 | Coordonnées de Jacobi | 3 |
| 1-3 | Composantes de Faddeev | 5 |
| 1-4 | Hyperrayon et angle de Delves | 6 |
| 2 | La solution dans le cas résonnant | 8 |
| 2-1 | Séparation des variables pour $a = \pm\infty$ | 8 |
| 2-2 | Équation angulaire et effet Efimov | 9 |
| 2-3 | Vérification : le cas sans interaction | 10 |
| 3 | La solution dans le cas général | 11 |
| 3-1 | Séparation des variables angulaires et radiales | 11 |
| 3-2 | Les potentiels hypersphériques | 12 |
| 3-3 | Universalité pour le problème à trois bosons | 13 |
| 4 | Un premier exemple : le trimère d’hélium | 14 |
| 4-1 | Un bon candidat : l’atome d’hélium | 15 |
| 4-2 | Le trimère He_3 fondamental | 16 |
| 4-3 | Le trimère He_3 excité | 17 |
| 5 | Appendice : équation de Skorniakov Ter-Martirosian | 19 |
| 5-1 | Définition des composantes de Faddeev | 19 |
| 5-2 | Potentiel à un corps séparable | 19 |
| 5-3 | Problème à trois corps et potentiels séparables | 20 |

Nous abordons dans ce chapitre le "véritable" effet Efimov, tel qu’étudié dans la publication originale (EFIMOV 1970). Nous considérons trois particules identiques, que nous supposons être des bosons de spin nul ou polarisés, et nous nous intéressons à la situation où les particules interagissent deux à deux. Nous supposons que cette interaction est caractérisée par la longueur de diffusion a (positive ou négative) et nous concentrons sur le cas où $|a|$ est très grande devant la portée b du potentiel.

Dans le traitement qui va suivre, nous prendrons en fait un potentiel de portée nulle (le pseudo-potentiel), en traitant les interactions par l’intermédiaire des conditions aux limites de Bethe–Peierls que nous avons déjà rencontrées aux chapitres précédents. Le cas un peu plus général d’un potentiel binaire séparable est brièvement traité dans l’appendice §5.

Le résultat trouvé par Efimov est remarquable : pour $a = \pm\infty$, alors qu’il n’y a pas d’état lié à deux corps (au moins dans le modèle de pseudo-potentiel), on trouve une infinité d’états liés à trois corps, avec des énergies formant une suite géométrique. Comme nous avons déjà eu l’occasion de le dire, cette suite géométrique doit être tronquée du côté des énergies très négatives, puisqu’on requiert que ce système possède un état fondamental. Ceci nécessite l’introduction d’un paramètre à trois corps que nous noterons R_0 .

Une fois le paramètre à trois corps fixé, tout le spectre du problème s’en déduit (figure 1). Du côté $a < 0$, quand on diminue la valeur de $|a|$, on voit les différents états trimères disparaître les uns après les autres car leur

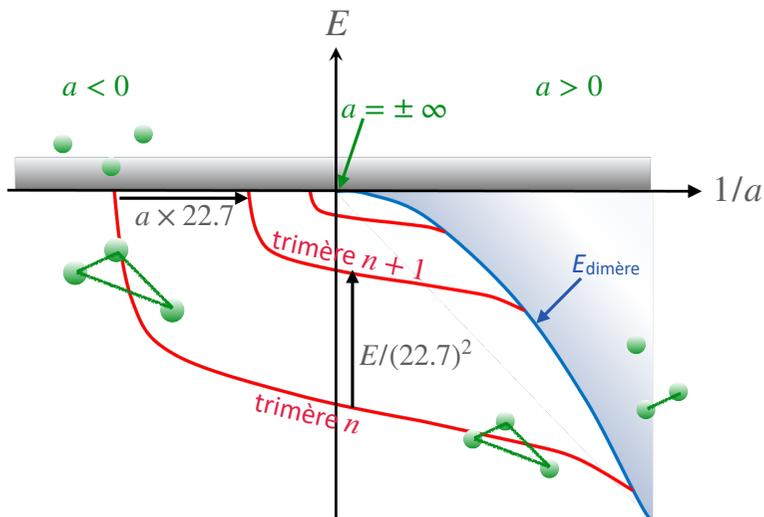


FIGURE 1. Schéma de principe du spectre des dimères et des trimères, dans le cadre d'une interaction de portée nulle décrite par la longueur de diffusion a . L'introduction d'un paramètre à trois corps R_0 est nécessaire pour fixer la position des niveaux sur l'axe vertical ($1/a = 0$). Le reste du diagramme en découle de manière universelle.

énergie de liaison s'annule. Du côté $a > 0$, quand on diminue la valeur de a , les états trimères entrent en compétition avec un état à un dimère et une particule libre, et ils finissent eux aussi par disparaître. La physique efimovienne est donc véritablement une physique de résonance de diffusion, au voisinage du point $a = \pm\infty$.

Contrairement au cas mMM pour lequel l'approximation de Born-Oppenheimer permettait de mener pratiquement tous les calculs de manière analytique, le cas de trois particules identiques est nettement plus compliqué à traiter. Dans ce qui suit, nous allons d'abord détailler la solution dans le cas strictement résonant, ce qui nous permettra de retrouver l'interaction en $1/r^2$ qui a joué le rôle de fil directeur dans tout le cours de

cette année. Nous donnerons ensuite les grandes lignes du traitement en dehors de la résonance, mais sans mener les calculs explicites qui nécessitent de toute façon une étape numérique conséquente si on veut obtenir une précision raisonnable.

Dans ses travaux des années 70, Efimov envisageait une application de son modèle à la physique nucléaire. Il mentionnait notamment un assemblage de trois particules α (deux protons, deux neutrons) pouvant former un état excité du noyau de carbone ^{12}C . Il s'est avéré que les conditions de résonance permettant d'atteindre $|a| \gg b$ (où b est la portée du potentiel à deux corps) n'étaient pas remplies dans ce cas. Il a fallu attendre 1994 pour voir apparaître le trimère d'atomes d'hélium (SCHÖLLKOPF & TOENNIES 1994), un état (presque) éligible au statut de trimère d'Efimov, puis les expériences sur les gaz d'atomes froids avec le travail pionnier du groupe de R. Grimm à Innsbruck (KRAEMER, MARK et al. 2006).

Comme nous l'avons écrit plus haut, nous ne mènerons pas ici tous les calculs pour arriver au diagramme énergétique final. Ces calculs peuvent se trouver dans plusieurs articles de revue écrits au cours des vingt dernières années, citons notamment ceux qui ont servi de base à la préparation de ce chapitre : NIELSEN, FEDOROV et al. (2001), BRAATEN & HAMMER (2006), NAIDON & ENDO (2017), GREENE, GIANNAKEAS et al. (2017) et D'INCAO (2018).

1 Paramétrisation de l'espace

Dans toute sa généralité, le problème à trois corps dans un espace tridimensionnel consiste à chercher les fonctions propres de l'hamiltonien, $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, dépendant de neuf variables d'espace. Il est bien sûr impossible d'aborder un tel problème de front et il est impératif de prendre en compte les différentes symétries du système pour le simplifier.

Pour commencer, nous pouvons nous laisser guider par la solution du problème à deux corps en interaction : partant des six variables d'espace $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\}$, la séparation "centre de masse – variable relative"

$$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2\} \longrightarrow \{\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_{12}\} \tag{1}$$

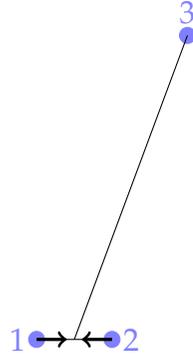


FIGURE 2. Un exemple de situation où la condition aux limites de Bethe–Peierls (3) intervient.

avec

$$\mathbf{R}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (2)$$

ramène le problème aux trois composantes de \mathbf{r}_{12} , puisque le mouvement du centre de masse \mathbf{R}_{12} est celui d'une particule libre. Ensuite, la prise en compte de la symétrie de rotation de l'interaction à deux corps permet de se ramener à un problème uni-dimensionnel, ne portant que sur $r_{12} = |\mathbf{r}_{12}|$.

Pour le problème à trois corps, les choses ne sont pas si simples. La séparation du mouvement du centre de masse permet de passer simplement de 9 à 6 variables, mais il est ensuite difficile de simplifier davantage le problème général. Toutefois, nous allons voir dans cette partie que pour une interaction de portée nulle, décrite par la condition aux limites de Bethe–Peierls, on peut ramener le problème à 9 variables à un problème à 2 variables seulement.

1-1 Condition aux limites de Bethe–Peierls

On considère trois particules de masse m interagissant deux à deux par le pseudo-potentiel associé à la longueur de diffusion a . On prend

en compte cette interaction en utilisant les conditions aux limites de Bethe–Peierls, qui imposent le comportement de la fonction d'onde totale $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ quand deux particules se rapprochent l'une de l'autre. Par exemple, quand la position de la particule 3 est fixée ainsi que le milieu \mathbf{R}_{12} du segment (1-2), et quand la distance r_{12} tend vers 0 (figure 2), on impose :

$$r_{12} \rightarrow 0 : \quad \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{a} \right) \Phi(\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_3) + \mathcal{O}(r_{12}). \quad (3)$$

Dans un développement en puissances de r_{12} , la condition de Bethe–Peierls impose donc une relation entre les deux premiers coefficients du développement, celui de $(r_{12})^{-1}$ et celui de $(r_{12})^0$, sans contraindre les coefficients suivants [termes en $(r_{12})^n$ avec $n \geq 1$].

Une fois la condition aux limites de Bethe–Peierls imposée, l'hamiltonien régissant l'évolution des trois particules est purement cinétique. La recherche d'états propres du système à trois corps passe donc par la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\sum_{j=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_j}^2 \right) \Psi = E \Psi. \quad (4)$$

1-2 Coordonnées de Jacobi

Comme pour le problème à deux corps, le système total est invariant par translation. On peut donc séparer le mouvement du centre de masse

$$\mathbf{R}_{123} = \frac{1}{3}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_3), \quad (5)$$

qui est celui d'une particule libre de masse $3m$, du mouvement relatif des trois particules. Il n'existe pas de choix simple des deux coordonnées relatives qui respectent pleinement la symétrie entre les trois particules. Nous utiliserons ici le système de Jacobi (voir figure 3). En particulierisant la particule 3 vis-à-vis de la paire (1, 2), ce système revient à faire le changement de variables :

$$\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\} \longrightarrow \{\mathbf{R}_{123}, \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3\} \quad (6)$$

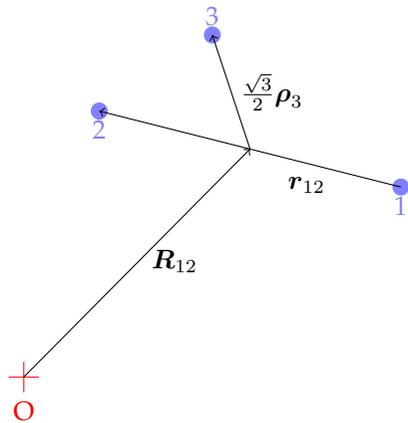


FIGURE 3. Un des systèmes de coordonnées de Jacobi pour le problème à trois corps. Nous avons choisi ici celui qui particularise la paire (1, 2).

où \mathbf{R}_{123} et \mathbf{r}_{12} ont déjà été définis ci-dessus et où

$$\frac{\sqrt{3}}{2} \boldsymbol{\rho}_3 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{R}_{12}. \quad (7)$$

La raison d'être du coefficient $\sqrt{3}/2$ apparaîtra dans un instant¹.

Une fois ce choix de coordonnées effectué, il faut réécrire l'équation aux

1. Nous avons adopté ici le même système de coordonnées que NAIDON & ENDO (2017). On trouve également dans la littérature [voir par exemple GREENE, GIANNAKEAS et al. (2017)] un choix correspondant à une répartition différente de ce coefficient $\sqrt{3}/2$, qui consiste à poser :

$$\tilde{\mathbf{r}}_{12} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^{1/2} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad \tilde{\boldsymbol{\rho}}_3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^{-1/2} (\mathbf{r}_3 - \mathbf{R}_{12}), \quad (8)$$

de sorte que les angles de Delves et de Jacobi ne sont pas modifiés, et l'hyperrayon correspondant s'écrit $\tilde{R}^2 = \tilde{r}_{12}^2 + \tilde{\rho}_3^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} R^2$ où R est défini en (29). Pour le terme associé à l'hyperrayon dans l'hamiltonien [voir par exemple (32)], on doit alors faire la substitution :

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial^2}{\partial R^2} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{R}^2} \quad \text{avec } \mu = m/\sqrt{3}. \quad (9)$$

valeurs propres (4). Un calcul simple donne pour la somme des laplaciens

$$\sum_{j=1}^3 \nabla_{\mathbf{r}_j}^2 = \frac{1}{3} \nabla_{\mathbf{R}_{123}}^2 + 2 \left(\nabla_{\mathbf{r}_{12}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}_3}^2 \right). \quad (10)$$

Le terme en $\frac{1}{3} \nabla_{\mathbf{R}_{123}}^2$ correspond à l'énergie cinétique du centre de masse. Le mouvement du centre de masse n'est pas affecté par la condition aux limites de Bethe–Peierls et ses fonctions propres sont les ondes planes $e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_{123}}$ d'énergie $\hbar^2 K^2 / 6m$. Dans tout ce qui suit, nous supposons que nous nous sommes placés dans le référentiel du centre de masse du système à 3 corps, ce qui revient à choisir $\mathbf{K} = 0$, et nous omettrons cette contribution $\frac{1}{3} \nabla_{\mathbf{R}_{123}}^2$. Nous travaillons donc maintenant avec la fonction inconnue $\Psi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$ qui est solution de

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{m} \left(\nabla_{\mathbf{r}_{12}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}_3}^2 \right) \Psi = E \Psi} \quad (11)$$

qu'il s'agit de résoudre en prenant en compte les conditions aux limites de Bethe–Peierls. Notons l'intérêt du coefficient $\sqrt{3}/2$ dans la définition (7) de $\boldsymbol{\rho}_3$ qui permet d'obtenir une écriture symétrique du laplacien vis-à-vis des deux variables \mathbf{r}_{12} et $\boldsymbol{\rho}_3$.

Les trois systèmes de coordonnées de Jacobi. Comme nous l'avons dit, il n'y a pas de choix simple pour le système de coordonnées qui respecte la symétrie entre les trois particules. Le choix $\{\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3\}$ fait ci-dessus singularise la particule 3. On peut bien sûr faire des choix équivalents en singularisant la particule 1 : $\{\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1\}$, ou la particule 2 : $\{\mathbf{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2\}$. Nous aurons besoin dans la suite des formules de passage entre ces différents systèmes de coordonnées (rotation d'angle $\pm 2\pi/3$) :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{23} \\ \boldsymbol{\rho}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ +\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \boldsymbol{\rho}_3 \end{pmatrix} \quad (12)$$

et

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_{31} \\ \boldsymbol{\rho}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & +\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \boldsymbol{\rho}_3 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Quand il s'agira d'imposer les conditions aux limites de Bethe–Peierls, il faudra prendre par exemple la limite $r_{12} \rightarrow 0$ en gardant \mathbf{R}_{12} et \mathbf{r}_3 fixes, ce

qui conduira pour les deux autres systèmes de coordonnées à :

$$\mathbf{r}_{23} \rightarrow -\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{\rho}_3, \quad \boldsymbol{\rho}_1 \rightarrow -\frac{\boldsymbol{\rho}_3}{2} \quad (14)$$

et

$$\mathbf{r}_{31} \rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{\rho}_3, \quad \boldsymbol{\rho}_2 \rightarrow -\frac{\boldsymbol{\rho}_3}{2}. \quad (15)$$

1-3 Composantes de Faddeev

La procédure générale consistant à fixer une paramétrisation de l'espace par un des trois jeux de coordonnées de Jacobi, $(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$ par exemple, puis à chercher directement les fonctions propres $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \equiv \Psi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$ conduit à des calculs difficiles, même pour le cas d'un potentiel de portée nulle que nous envisageons ici. Une raison en est que ce choix de coordonnées qui singularise la particule 3 n'est pas "démocratique", pour reprendre l'expression de NIELSEN, FEDOROV et al. (2001). Plus prosaïquement, il ne facilite pas la prise en compte des conditions aux limites de Bethe–Peierls pour chacune des trois paires possibles. Pour la paire (1, 2), cette condition aux limites dans le système de coordonnées $(\mathbf{R}_{12}, \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$ est bien sûr très simple puisqu'il s'agit de prendre la limite (figure 2) :

$$\text{Paire (1, 2) : } \quad \mathbf{r}_{12} \rightarrow 0 \quad \text{à } \mathbf{R}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3 \text{ constants.} \quad (16)$$

Mais la prise en compte de la condition aux limites pour les paires (2, 3) et (3, 1) est moins immédiate.

Pour faciliter la prise en compte simultanée des trois conditions aux limites, nous allons chercher la fonction Ψ sous la forme :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1) + \chi(\mathbf{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2), \quad (17)$$

où nous avons introduit les deux systèmes de coordonnées de Jacobi singularisant respectivement la particule 1 et la particule 2. La fonction $\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ est appelée composante de Faddeev et sa construction précise est détaillée dans l'appendice de ce chapitre (§5). La structure de l'équation (17) a le mérite d'être par construction symétrique par un cycle d'échange des trois

particules, ce qui est nécessaire puisque nous nous intéressons ici au problème de trois bosons identiques².

Sous cette forme, chacune des trois fonctions $\chi(\mathbf{r}_{ij}, \boldsymbol{\rho}_k)$ intervenant dans (17) va "prendre en charge" le comportement divergeant à courte distance de la fonction d'onde pour la paire (i, j) en question. Plus précisément, nous allons imposer

$$\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) \text{ diverge comme } \frac{1}{r} \text{ quand } \mathbf{r} \rightarrow 0. \quad (18)$$

On utilisera donc le développement de Taylor :

$$\mathbf{r} \rightarrow 0 : \quad \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = \frac{A(\boldsymbol{\rho})}{r} + B(\boldsymbol{\rho}) + \mathcal{O}(r) \quad (19)$$

avec les coefficients de r^{-1} et r^0 qui se calculent à partir de :

$$A(\boldsymbol{\rho}) = \lim_{r \rightarrow 0} [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})] \quad B(\boldsymbol{\rho}) = \lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial (r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}))}{\partial r} \right]. \quad (20)$$

Comme nous l'avons indiqué plus haut, la condition aux limites de Bethe–Peierls vient relier l'ordre dominant en $1/r_{ij}$ et l'ordre suivant du développement, le terme constant en $-1/a$. Plus précisément, on a dans la limite $r_{12} \rightarrow 0$:

$$\text{Terme en } (r_{12})^{-1} : \quad \lim_{r \rightarrow 0} [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}_3)] \quad (21)$$

et pour le terme en $(r_{12})^0$:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial (r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}_3))}{\partial r} \right] + \chi\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{\rho}_3, -\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho}_3\right) + \chi\left(+\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{\rho}_3, -\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho}_3\right) \quad (22)$$

où nous avons utilisé le passage à la limite sur les différentes coordonnées de Jacobi donné en (14-15).

Pour notre problème, la condition aux limites de Bethe–Peierls s'écrit donc pour toute valeur de $\boldsymbol{\rho}$:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})]}{\partial r} \right] + \chi\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{\rho}, -\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\right) + \chi\left(+\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{\rho}, -\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho}\right) = -\frac{1}{a} \lim_{r \rightarrow 0} [r \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})] \quad (23)$$

2. Il peut exister des situations telles que chacune des composantes de Faddeev est bien définie, mais $\chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(\mathbf{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1) + \chi(\mathbf{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2) = 0$. On parle alors de *spurious solutions* (NIELSEN, FEDOROV et al. 2001). Nous n'en rencontrerons pas ici.

Par ailleurs, la fonction $\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ satisfait l'équation aux valeurs propres identique à (11) :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{m} (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}}^2) \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}) = E \chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})} \quad (24)$$

qui correspond, rappelons-le, à une énergie purement cinétique puisque les interactions sont prises en compte ici par l'intermédiaire de la condition aux limites (23).

1-4 Hyperrayon et angle de Delves

À ce stade, l'équation (11), ou ses équivalents pour les deux autres systèmes de coordonnées de Jacobi, est une équation à six variables d'espace, qui peut être paramétrisée de multiples façons, une fois qu'on a adopté un système de coordonnées de Jacobi. Nous utiliserons le choix suivant³ qui précise la taille et la forme du triangle formé par les trois particules et qui définit ensuite l'orientation de ce triangle dans l'espace à trois dimensions :

— L'*hyper-rayon* R , défini par

$$R^2 = r_{12}^2 + \rho_3^2 = \frac{2}{3} (r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2), \quad (29)$$

3. Un autre choix communément utilisé dans la littérature pour traiter des potentiels de portée non nulle consiste à utiliser R , les trois angles d'Euler, et les deux angles θ et φ définissant les coordonnées r_{ij} [voir par exemple GREENE, GIANNAKEAS et al. (2017)] :

$$r_{ij} = \frac{R}{\sqrt{2}} [1 + \sin \theta \sin(\varphi + \nu_{ij})]^{-1/2} \quad (25)$$

avec $\nu_{ij} = -\pi/6, -5\pi/6, +\pi/2$ pour $(i, j) = (1, 2), (2, 3), (3, 1)$. L'opérateur énergie cinétique s'écrit alors $\hat{H}_{\text{cin}} = \hat{T}_R + \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{T}_3$ avec \hat{T}_R inchangé par rapport à (32) et

$$\hat{T}_1 = -\frac{4\hbar^2}{mR^2} \frac{1}{\sin(2\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin(2\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (26)$$

$$\hat{T}_2 = -\frac{2\hbar^2}{mR^2} \frac{1}{\sin^2(\theta)} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2\hbar} \cos \theta \hat{J}_z \right)^2 \quad (27)$$

$$\hat{T}_3 = \frac{2\hat{J}_x^2}{mR^2(1 - \sin \theta)} + \frac{2\hat{J}_y^2}{mR^2(1 + \sin \theta)} + \frac{\hat{J}_z^2}{mR^2}. \quad (28)$$

où \hat{J} représente le moment cinétique total du système. Dans le sous-espace de moment cinétique $J = 0$, la dépendance vis à vis des angles d'Euler disparaît et les états propres de l'hamiltonien sont des fonctions des trois variables R, θ, φ (D'INCAO & ESRV 2005).

renseigne sur la nature du groupement des trois particules : R devient grand dès qu'une particule s'éloigne des deux autres ; une petite valeur de l'hyper-rayon est donc obtenue si et seulement si les trois particules sont proches l'une de l'autre. Notons que l'hyper-rayon (29) est identique pour les trois systèmes de coordonnées de Jacobi, puisqu'il fait jouer des rôles identiques aux trois variables r_1, r_2, r_3 .

— L'*angle de Delves* α est défini par :

$$r_{12} = R \sin \alpha, \quad \rho_3 = R \cos \alpha, \quad 0 \leq \alpha \leq \pi/2. \quad (30)$$

En toute rigueur, nous devrions noter cet angle de Delves α_3 , puisqu'il renseigne sur la position de la particule 3 par rapport à la paire 1-2. On peut bien sûr définir également α_1 et α_2 , mais nous n'aurons pas à les utiliser dans ce qui suit⁴. L'angle de Delves indique si on a affaire à un triangle plutôt allongé (petites valeurs de α) ou plutôt aplati (α proche de $\pi/2$). Plus précisément, si $\alpha \equiv \alpha_3$ est proche de 0, la particule 3 est loin de la paire 1-2 ; si α est proche de $\pi/2$, la particule 3 est proche du milieu de 1 – 2 (voir figure 4). En revanche quand $\alpha \sim \pi/4$, la forme du triangle n'est pas bien définie : il peut être allongé si la particule 3 est proche de 1 ou 2, ou quasi-équilatéral.

— L'angle de Jacobi $\beta = (\hat{r}_{12}, \hat{\rho}_3)$ (qui devrait lui aussi porter l'indice 3 pour lever toute ambiguïté). La connaissance de l'hyper-rayon et des deux angles α et β permet de préciser complètement la taille et la forme du triangle formé par les trois particules (figure 5).

— Les trois paramètres angulaires restants correspondent aux trois angles d'Euler nécessaires pour préciser l'orientation de ce triangle dans l'espace.

Une fois défini le système de coordonnées (R, α, Ω) où Ω désigne de manière collective l'angle de Jacobi β et les trois angles d'Euler, on peut écrire l'hamiltonien cinétique $-(\hbar^2/m) (\nabla_{\mathbf{r}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}}^2)$ qui intervient dans (24) sous une forme relativement compacte (PACK & PARKER 1987 ; YUEN 2020) :

$$\hat{H}_{\text{cin}} = \hat{T}_R + \hat{T}_\alpha + \hat{T}_\Omega \quad (31)$$

avec pour la partie hyperradiale :

$$\hat{T}_R = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{R^5} \frac{\partial}{\partial R} R^5 \frac{\partial}{\partial R}, \quad (32)$$

4. On notera la relation remarquable : $\sin^2 \alpha_1 + \sin^2 \alpha_2 + \sin^2 \alpha_3 = 3/2$.

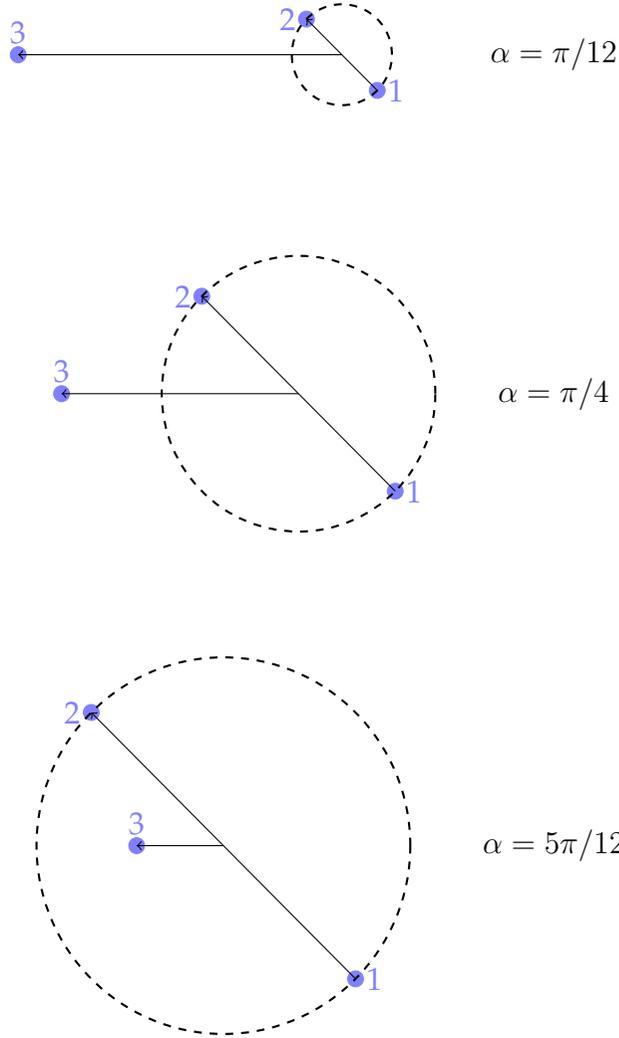


FIGURE 4. Trois configurations possibles pour un même hyper-rayon R et différents angles de Delves α . Les positions des particules 1 et 2 ne sont pas complètement définies par la connaissance de R et α . On sait uniquement qu'elles sont situées sur le cercle pointillé et diamétralement opposées.

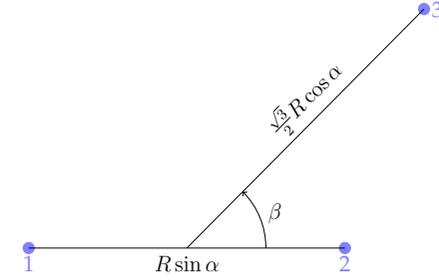


FIGURE 5. Détermination de la forme du triangle formé par les trois particules à partir des paramètres R, α, β .

et pour la partie angle de Delves :

$$\hat{T}_\alpha = -\frac{\hbar^2}{mR^2} \frac{1}{\sin^2(2\alpha)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sin^2(2\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha}. \quad (33)$$

Nous n'écrivons pas ici la forme explicite de \hat{T}_Ω en fonction de l'angle β et des angles d'Euler, mais nous donnons simplement sa structure en termes des deux opérateurs \hat{L} et \hat{J} , où \hat{L} désigne le moment cinétique du dimère aligné selon r et \hat{J} le moment cinétique total des trois corps :

$$\hat{T}_\Omega = \frac{1}{mR^2} \left[\frac{(\hat{J} - \hat{L})^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{\hat{L}^2}{\sin^2 \alpha} \right]. \quad (34)$$

Quand les interactions entre les particules sont décrites par un potentiel binaire $V(r_{ij})$ quelconque, les distances r_{ij} font intervenir R, α et β . Il en va de même pour les états propres de l'hamiltonien total (cinétique+interactions), de sorte que les trois termes $\hat{T}_R, \hat{T}_\alpha$ et \hat{T}_Ω ont une contribution non triviale. Dans le cas d'une interaction décrite par le pseudo-potentiel, puisque l'hamiltonien est purement cinétique, on peut d'emblée se placer dans le sous-espace propre correspondant à $J = L = 0$, dont on peut montrer qu'il est le seul à donner naissance à l'effet Efimov.

Nous restreignons donc la recherche des fonctions $\chi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho})$ à des fonctions de R et de α uniquement (ou de manière équivalente de $r = R \sin \alpha$

et $\rho = R \cos \alpha$ uniquement). Par ailleurs, compte tenu de la structure de \hat{T}_R et \hat{T}_α , on a intérêt à faire le changement de fonction

$$\chi(r, \rho) = \frac{\Phi(R, \alpha)}{R^{5/2} \sin(2\alpha)} \quad (35)$$

et on arrive à l'équation aux valeurs propres :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m} \left[\partial_R^2 + \frac{1}{R^2} \left(\partial_\alpha^2 + \frac{1}{4} \right) \right] \right] \Phi(R, \alpha) = E \Phi(R, \alpha) \quad (36)$$

Il nous reste à préciser les conditions aux limites à imposer à $\Phi(R, \alpha)$.

Remarquons tout d'abord que le changement de fonction (35) requiert de bien définir le comportement de $\Phi(R, \alpha)$ aux points d'annulation du $\sin(2\alpha)$ figurant au dénominateur, c'est-à-dire $\alpha = 0$ ou $\alpha = \pi/2$:

- Quand $\alpha \rightarrow 0$ à R constant, la variable $r = R \sin \alpha$ tend vers 0 et on sait que $\chi(r, \rho)$ doit diverger comme $1/r$. Il suffit donc d'imposer que $\Phi(R, \alpha)$ soit régulière en $\alpha = 0$, mais elle n'est pas à s'annuler en ce point.
- Quand $\alpha \rightarrow \pi/2$ à R constant, la variable $\rho = R \cos \alpha$ tend vers 0, ce qui signifie que la particule 3 vient se positionner au milieu du segment 1 – 2 (figure 4). La fonction $\chi(r, \rho)$ est régulière en ce point⁵ et il faut donc imposer que le numérateur de (35) s'annule au moins linéairement comme $\alpha - \pi/2$ en ce point :

$$\left[\Phi\left(R, \frac{\pi}{2}\right) = 0 \right] \quad (37)$$

Par ailleurs, la condition aux limites (23) se transpose en :

$$\left[\frac{\partial \Phi(R, \alpha)}{\partial \alpha} \right]_{\alpha \rightarrow 0} + \frac{8}{\sqrt{3}} \Phi\left(R, \frac{\pi}{3}\right) = -\frac{R}{a} \Phi(R, 0) \quad (38)$$

La contribution de $\alpha = 0$ correspond au cas où les particules 1 et 2 se rapprochent l'une de l'autre (figure 6, gauche), et la contribution $\alpha = \pi/3$ correspond au cas où la particule 3 peut venir au contact de la particule 1 ou de la particule 2 (figure 6, droite).

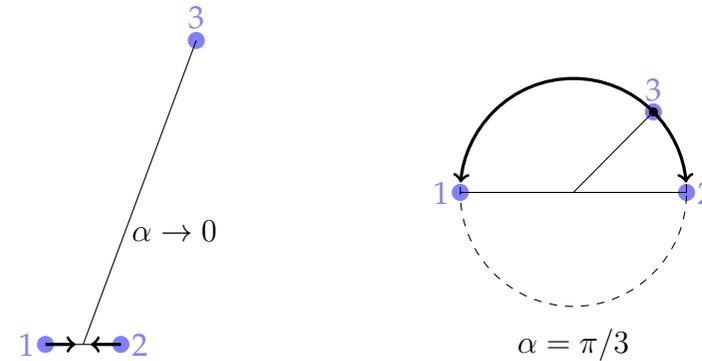


FIGURE 6. Les deux valeurs de l'angle de Delvoe α pouvant amener une particule sur une autre, et intervenant donc dans la condition aux limites de Bethe–Peierls (38).

2 La solution dans le cas résonnant

2-1 Séparation des variables pour $a = \pm\infty$

La structure de l'équation aux valeurs propres (36) se prête bien à la recherche des fonctions propres sous la forme factorisée du type $g_1(R) \times g_2(\alpha)$. Mais la condition aux limites (38) n'est généralement pas compatible avec cette factorisation. Il existe néanmoins deux cas où cette factorisation est possible, le cas résonnant $a = \pm\infty$ et le cas sans interaction $a = 0$. Nous allons nous concentrer ici sur le cas résonnant et nous vérifierons ensuite que le cas sans interaction redonne bien le résultat (trivial) attendu.

Plaçons-nous dans le cas résonnant et cherchons une solution de (36-37-38) sous la forme

$$\Phi(R, \alpha) = \phi(R) F(\alpha). \quad (39)$$

Grâce au choix $a = \infty$, les conditions aux limites (37-38) ne font pas intervenir la fonction inconnue $\phi(R)$, mais seulement $F(\alpha)$:

$$F(\pi/2) = 0 \quad (40)$$

5. sauf si $R \rightarrow 0$, mais ce cas où les trois particules sont superposées est "de mesure nulle".

et

$$\left[\frac{dF}{d\alpha} \right]_{\alpha \rightarrow 0} + \frac{8}{\sqrt{3}} F(\pi/3) = 0. \quad (41)$$

L'équation aux valeurs propres (36) s'écrit quant à elle :

$$-\left[\frac{d^2\phi}{dR^2} + \frac{\phi(R)}{4R^2} \right] F(\alpha) - \frac{\phi(R)}{R^2} \frac{d^2F}{d\alpha^2} = \frac{mE}{\hbar^2} \phi(R) F(\alpha). \quad (42)$$

La procédure est alors standard. On commence par résoudre l'équation aux valeurs propres pour une des fonctions inconnues, ici $F(\alpha)$:

$$\boxed{-\frac{d^2F}{d\alpha^2} = s^2 F(\alpha)} \quad (43)$$

où la valeur propre s^2 (réelle) doit être choisie pour respecter les conditions aux limites (40-41) et on reporte le résultat obtenue dans (42) pour déterminer la solution pour l'hyper-rayon :

$$\boxed{-\frac{d^2\phi}{dR^2} + \frac{s^2 - 1/4}{R^2} \phi(R) = \epsilon \phi(R)} \quad \text{avec} \quad \epsilon = \frac{mE}{\hbar^2} \quad (44)$$

On retrouve ici encore une équation de Schrödinger à une dimension dans le potentiel en $1/r^2$! La question que nous abordons dans le paragraphe suivant est de savoir si le coefficient s^2 peut être négatif pour que l'attraction due à ce potentiel puisse donner naissance à des états liés.

2-2 Équation angulaire et effet Efimov

La solution de l'équation aux valeurs propres pour la variable angulaire, $F'' + s^2 F = 0$ avec s^2 réel positif, négatif ou nul, compatible avec la première condition aux limites $F(\pi/2) = 0$ s'écrit, à une constante multiplicative près sans importance :

$$F(\alpha) = \sin \left[s \left(\frac{\pi}{2} - \alpha \right) \right]. \quad (45)$$

Injectons cette forme dans la seconde condition aux limites (41) :

$$s \cos(s\pi/2) = \frac{8}{\sqrt{3}} \sin(s\pi/6) \quad (46)$$

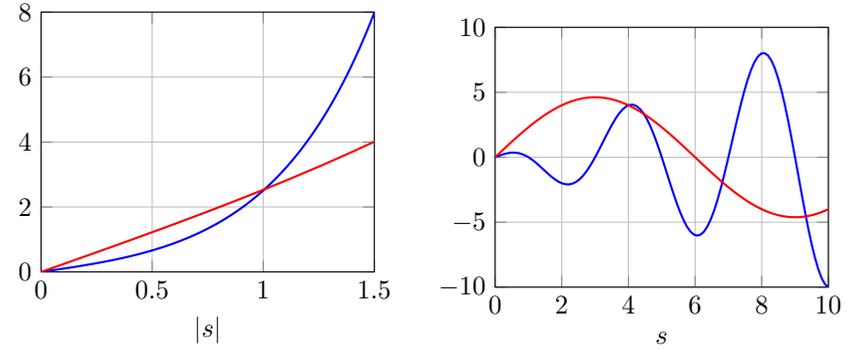


FIGURE 7. Gauche : recherche des solutions de (46) avec $s^2 < 0$, cette équation se réécrit sous la forme (48) pour la variable $|s|$; elle admet une solution unique donnée en (47). Droite : recherche des solutions de (46) avec $s^2 > 0$. Sur chaque graphe, les courbes bleue et rouge correspondent respectivement aux membres de gauche et de droite des équations (46) et (48).

où s est réel ou imaginaire pur.

Les nombres s satisfaisant (46) viennent par paires $(s, -s)$, la solution $s = 0$ étant à écarter car elle conduit à une fonction $F(\alpha)$ identiquement nulle. Une étude numérique simple montre que l'équation (46) admet deux types de solutions (voir aussi la résolution graphique en figure 7) :

— Une double solution imaginaire pure

$$\boxed{s_0 = \pm i |s_0|} \quad \text{avec} \quad |s_0| = 1.00624 \dots \quad (47)$$

l'équation (46) se réécrit dans ce cas

$$|s_0| \cosh(|s_0|\pi/2) = \frac{8}{\sqrt{3}} \sinh(|s_0|\pi/6) \quad (48)$$

où toutes les quantités sont réelles. L'équation portant sur l'hyper-rayon s'écrit alors

$$\boxed{-\frac{d^2\phi}{dR^2} - \frac{|s_0|^2 + 1/4}{R^2} \phi(R) = \epsilon \phi(R)} \quad (49)$$

— Une famille infinie de solutions $\pm s_j$ avec s_j réel positif, $j \geq 1$.

Comme nous avons eu l'occasion de le voir à plusieurs reprises dans les chapitres précédents, la condition pour que l'équation aux valeurs propres (44) sur la variable R admette un état lié, c'est-à-dire une valeur propre $\epsilon < 0$, est que le coefficient du terme en $1/R^2$, ici $s^2 - 1/4$, soit strictement inférieur à $-1/4$. Il faut donc que s^2 soit négatif, ce qui vient sélectionner un et un seul type de solution, $s_0 = \pm i|s_0|$, conduisant à l'équation aux valeurs propres (49).

Une fois cette solution identifiée, toute la procédure que nous avons développée dans les chapitres précédents s'applique sans modification. Partant de l'équation (49), on sait que :

- Il faut introduire une condition aux limites aux petites valeurs de R , par exemple un cœur dur en R_0 , pour empêcher la "chute sur le centre". On obtient ainsi un état fondamental d'énergie $E_0 < 0$ avec une fonction d'onde $\phi(R)$ sans nœud en dehors du point R_0 .
- Une fois imposée cette condition, on obtient une infinité d'états liés dont les énergies forment en très bonne approximation une suite géométrique

$$\boxed{\frac{E_n}{E_{n+1}} \approx \lambda^2 \quad \text{avec} \quad \lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 22.7, \quad \lambda^2 \approx 515} \quad (50)$$

— La fonction d'onde à énergie nulle est log-périodique :

$$\phi(R) = \sin [|s_0| \ln(R/R_0)] \quad (51)$$

et on retrouve cette structure pour les états liés tant qu'on se limite à des valeurs de R petites devant leur point de rebroussement extérieur.

On notera que la fonction d'onde angulaire $F(\alpha)$ trouvée en (45), qui se réécrit $\sinh [|s_0|(\frac{\pi}{2} - \alpha)]$ dans le cas efimovien, est relativement piquée autour de $\alpha = 0$, ce qui indique que les trimères obtenus dans ce cas ont une forme de triangle allongé, comme représenté sur la figure 8 (NAIDON & ENDO 2017).

2-3 Vérification : le cas sans interaction

Nous avons pu résoudre le problème aux valeurs propres (36-37-38) dans le cas $a = \infty$ car la recherche des solutions sous une forme factorisée

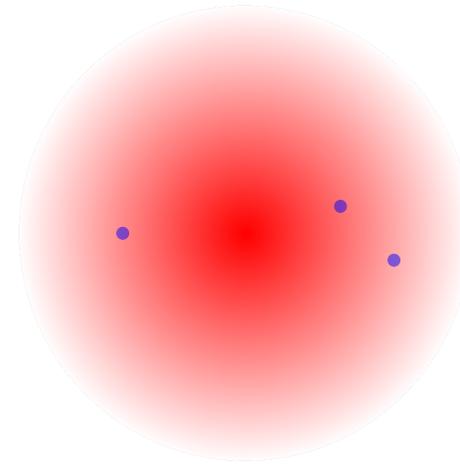


FIGURE 8. Une configuration typique d'un trimère d'Efimov, correspondant à une petite valeur de l'angle de Delves α , et donc un triangle allongé. L'état des trois particules est invariant par rotation, ce qui est représenté par le halo rouge. Les trois points bleus représentent un résultat possible (et relativement probable, à une rotation globale près) d'une mesure des positions.

était alors possible. Il existe une autre situation où c'est également le cas : $a = 0$. Nous allons vérifier qu'on retrouve alors bien les résultats attendus en absence d'interaction.

Quand la longueur de diffusion s'annule (ou plus précisément tend vers 0 par valeurs négatives), c'est-à-dire quand les particules n'interagissent pas entre elles, la condition aux limites (38) impose

$$a = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(R, 0) = 0. \quad (52)$$

Nous cherchons là aussi les fonctions solutions de (36) sous la forme factorisée

$$\Phi(R, \alpha) = \phi(R) F(\alpha) \quad (53)$$

avec les conditions aux limites (37-53) :

$$F(0) = 0, \quad F(\pi/2) = 0. \quad (54)$$

La fonction $F(\alpha)$ doit ici aussi être solution de l'équation aux valeurs

propres $F'' + s^2 F = 0$ et les conditions aux limites (54) entraînent immédiatement :

$$F(\alpha) = \sin(s\alpha) \quad \text{avec} \quad s = 2j, \quad j \in \mathbb{N}^*. \quad (55)$$

On injecte cette forme dans (36) pour en déduire l'équation vérifiée par $\phi(R)$:

$$-\frac{d^2\phi}{dR^2} + \frac{4j^2 - 1/4}{R^2}\phi(R) = \epsilon\phi(R). \quad (56)$$

Cela correspond à une équation de Schrödinger pour le potentiel répulsif (de type centrifuge) $(4j^2 - 1/4)/R^2$. Toutes les valeurs propres ϵ sont donc positives ou nulles et il n'y a pas d'état lié dans ce cas. C'est bien sûr le résultat attendu en absence d'interaction.

3 La solution dans le cas général

3-1 Séparation des variables angulaires et radiales

Quand la longueur de diffusion a n'est pas nulle ni infinie, la prise en compte de la condition aux limites (38) nécessite de manipuler des fonctions à deux variables, ce qui est numériquement compliqué.

En pratique, une approche puissante consiste à supposer dans une première étape que R est un paramètre fixé pour résoudre le problème angulaire décrit par la variable α , puis dans une deuxième étape injecter le résultat dans l'équation pour R . L'idée physique sous-jacente est que l'angle de Delves α est une variable rapide et l'hyperrayon une variable lente, ce qui permet de faire les approximations correspondantes lors de la deuxième étape.

Sur le plan mathématique, cette approche est rendue possible par le fait que la condition aux limites (38) est locale en R , c'est-à-dire qu'elle ne fait intervenir que les valeurs de la fonction recherchée $\Phi(R, \alpha)$ en un point R donné, mais pas ses dérivées partielles par rapport à R .

On cherche donc à résoudre (36) avec les conditions aux limites (37-38) en écrivant la solution sous la forme

$$\Phi(R, \alpha) = \sum_i \phi_i(R) F_i(\alpha; R) \quad (57)$$

où les F_i sont des fonctions de α à R fixé, solutions de l'équation aux valeurs propres

$$\boxed{-\frac{d^2 F_i(\alpha; R)}{d\alpha^2} = s_i^2(R) F_i(\alpha; R)} \quad (58)$$

et satisfaisant les conditions aux limites (37-38), toujours à R fixé.

Une fois l'ensemble des fonctions propres F_i et des valeurs propres s_i^2 connues, on injecte la forme (57) dans l'équation aux valeurs propres (36) et on obtient un ensemble *a priori* infini d'équations couplées pour les $\phi_i(R)$:

$$-\frac{d^2\phi_i}{dR^2} + \frac{s_i^2(R) - 1/4}{R^2}\phi_i(R) + \sum_j \hat{O}_{ij}(R)\phi_j(R) = \epsilon\phi_i(R). \quad (59)$$

Les opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ ont une structure qui est usuelle dans le formalisme de l'approximation adiabatique; ils font intervenir les produits scalaires des fonctions $F_i(\alpha; R)$ et $F_j(\alpha; R)$ et de leurs dérivées par rapport à R . Ils décrivent la "rotation" des vecteurs de base sur lesquels on effectue le développement, en l'occurrence la dépendance en R des fonctions angulaires F_i . Le terme $i = j$ correspond à un *potentiel géométrique* (scalaire et vecteur) qui vient s'ajouter au *potentiel hypersphérique* $[s_i^2(R) - 1/4]/R^2$ entrant dans l'évolution (59) de la fonction d'onde $\phi_i(R)$. Les termes non diagonaux $i \neq j$ décrivent des couplages entre les différents canaux.

Nous n'explicitons pas dans ce chapitre la forme des opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ [voir par exemple BRAATEN & HAMMER (2006), eqs. (114)-(116) pour une expression détaillée], mais nous y reviendrons dans le chapitre suivant lors de la discussion de la valeur du paramètre à trois corps pour une interaction de van der Waals.

Quand on se place à résonance ou à interaction nulle (cf. section précédente), les fonctions $F_i(\alpha; R)$ sont en fait indépendantes de R ; tous les $\hat{O}_{ij}(R)$ sont alors nuls. En dehors de ces valeurs particulières de la longueur de diffusion a , les opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ sont non nuls et on peut, suivant la précision recherchée pour le calcul numérique, en prendre un certain nombre en compte. À l'ordre le plus bas, l'approximation adiabatique hypersphérique consiste à négliger tous les opérateurs $\hat{O}_{ij}(R)$ pour ne garder que

$$\boxed{-\frac{d^2\phi_i}{dR^2} + \frac{s_i^2(R) - 1/4}{R^2}\phi_i(R) \approx \epsilon\phi_i(R)} \quad (60)$$

Toute la physique du problème – au moins pour les états de moment cinétique nul auxquels nous sommes restreints – est alors contenue dans les valeurs propres $s_i^2(R)$ du problème angulaire qui définissent les potentiels hypersphériques.

3-2 Les potentiels hypersphériques

La recherche des valeurs propres $s_i^2(R)$ et des fonctions propres $F_i(\alpha; R)$ pour l'équation aux valeurs propres (58) avec les conditions aux limites (37-38) se fait de manière similaire au cas résonant de la partie 2. On cherche la fonction propre à R fixé sous la forme

$$F(\alpha; R) = \sin \left[s(R) \left(\frac{\pi}{2} - \alpha \right) \right] \quad (61)$$

qui assure automatiquement que F est solution de $F'' + s^2 F = 0$ avec la condition aux limites $F(\pi/2; R) = 0$. La prise en compte de la condition aux limites (38) impose :

$$-s \cos(s\pi/2) + \frac{8}{\sqrt{3}} \sin(s\pi/6) = -\frac{R}{a} \sin(s\pi/2) \quad (62)$$

qui se résout numériquement pour chaque valeur de R/a .

Intéressons-nous ici à la plus petite valeur propre $s_{\min}^2(R)$ de (58) :

- Pour $a > 0$, cette valeur propre est négative pour toutes les valeurs de R , i.e. $s_{\min}(R)$ est imaginaire pur.
- Pour $a < 0$, on trouve $s_{\min}^2(R)$ négatif aux petites valeurs de R ($R \lesssim |a|$) et $s_{\min}^2(R)$ positif au delà.

La variation de $s_{\min}^2(R)$ dans ces deux cas est représentée sur la figure 9 (haut) [voir aussi les figures 4 et 5 de NIELSEN, FEDOROV et al. (2001)]. On notera que les deux solutions pour $a > 0$ et $a < 0$ tendent vers $-|s_0|^2$ quand $R \ll |a|$ avec $|s_0| = 1.00624 \dots$, ce qui permet de retrouver le cas $a = \pm\infty$ discuté à la section précédente et qui donne lieu à l'effet Efimov. Quand on prend la limite inverse $R \gg |a|$ pour $a < 0$, on retrouve le résultat $s = 2$ correspondant à la valeur la plus basse du cas sans interaction [cf. (55)]. Quand $R \gg a$ avec $a > 0$, la valeur $s_{\min}^2(R)$ tend vers $-\infty$, ce qui correspond à la formation de l'état lié du dimère.

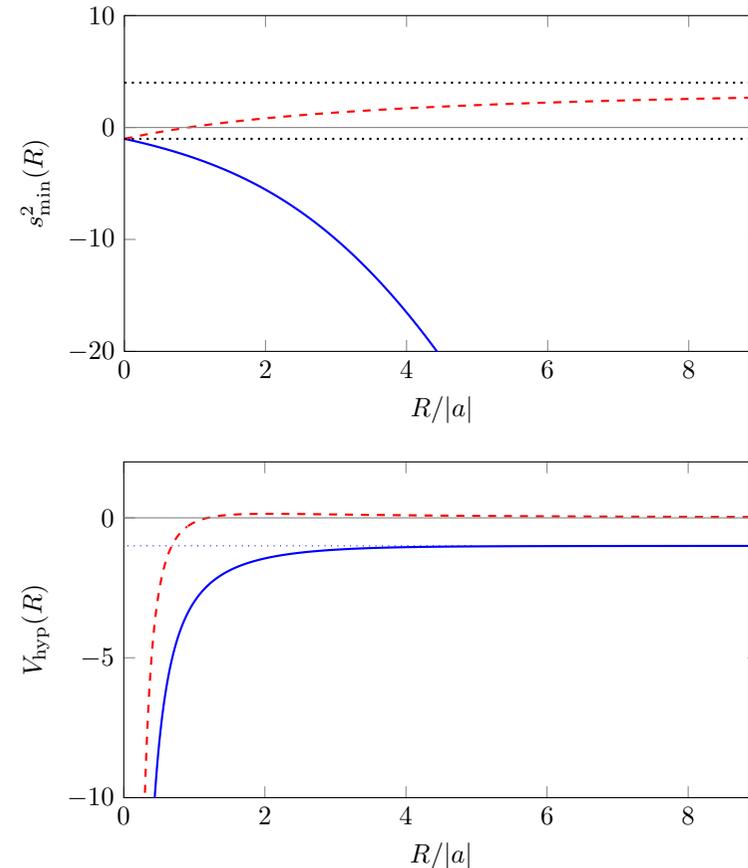


FIGURE 9. Haut : La première valeur propre $s_{\min}^2(R)$ pour $a > 0$ (courbe bleue continue) et pour $a < 0$ (courbe rouge tiretée). Les deux lignes pointillées indiquent la limite d'interaction nulle ($s = 2$, voir (55)) et le cas résonant $s_0 = i \times 1.00624$. Bas : Potentiel hypersphérique associés $V_{\text{hyp}}(R) = [s_{\min}^2(R) - 1/4]/R^2$ en unités de \hbar^2/ma^2 . Dans le cas $a > 0$, on retrouve la limite de l'énergie du dimère, $-\hbar^2/ma^2$, quand $R \rightarrow \infty$ (trait pointillé).

On montre également sur la figure 9 (en bas) les potentiels hypersphériques associés :

$$V_{\text{hyp}}(R) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{s_{\min}^2(R) - 1/4}{R^2} \quad (63)$$

Pour $R \ll |a|$, le fait que $s_{\min}^2(R)$ tende vers $-(1.00624)^2$ entraîne qu'on retrouve le potentiel en $1/R^2$ du cas résonnant. Aux grandes valeurs de R , $V(R)$ tend vers 0 pour $a < 0$ et vers l'énergie de l'état lié du dimère, $-\hbar^2/ma^2$, pour $a > 0$.

Nous nous sommes concentrés ici sur la plus petite valeur propre $s_{\min}^2(R)$ de (58). Toutes les autres valeurs propres sont strictement positives (quel que soit le signe de a) et elles conduisent pour $R \ll a$ à un potentiel hypersphérique en $1/R^2$ répulsif (BRAATEN & HAMMER 2006). Par conséquent, seul le potentiel associé à cette valeur propre minimale peut donner naissance à des états liés à trois corps "universels".

3-3 Universalité pour le problème à trois bosons

Une fois fixé le paramètre à trois corps qui régularise le problème pour $a = \pm\infty$, on peut utiliser le formalisme hypersphérique pour déterminer la variation des états propres du système avec a .

La forme générale de cette variation est très similaire à celle trouvée au chapitre précédent dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer pour le problème mMM . On trouve une série de branches énergétiques correspondantes aux différents états liés du trimère. Comme dans le cas mMM , le diagramme possède une invariance d'échelle remarquable : la connaissance d'une branche dans le plan $(1/a, E)$ permet d'en déduire toutes les autres par une simple homothétie de centre $(0, 0)$. La seule différence avec le cas mMM réside dans le fait que le rapport d'homothétie est maintenant fixé et déterminé par $\lambda = e^{\pi/s_0}$ avec $s_0 = 1.00624$, alors que c'était une fonction de M/m dans le cas précédent.

Nous avons tracé en figure 10 cette branche énergétique pour un des états du trimère avec le système de coordonnées $(\sqrt{1/|a|}, |E|^{1/4})$ déjà utilisé au chapitre 4 pour le problème mMM . La courbe continue est le résultat d'un calcul numérique précis (BRAATEN, HAMMER et al. 2003; NAIDON & ENDO 2017). La courbe pointillée représente la solution de l'équation de

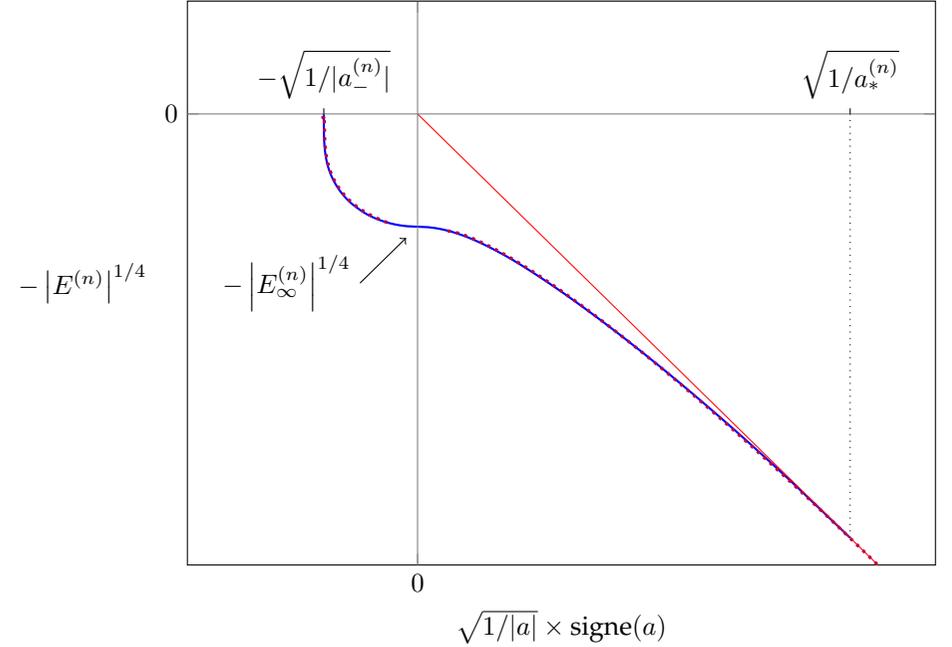


FIGURE 10. Courbe continue : calcul numérique précis de la branche énergétique $\mathcal{E}^{(n)}$ du $n^{\text{ième}}$ trimère d'Efimov en fonction de $1/a$. Courbe pointillée : résolution de l'équation de Schrödinger à un canal (60), pour le potentiel hypersphérique (63). La longueur de diffusion a et l'énergie $\mathcal{E}^{(n)}$ sont définies ici à une constante multiplicative près, qui dépend du paramètre à trois corps R_0 . La droite rouge côté $a > 0$ représente le dimère d'énergie $E = -\hbar^2/ma^2$. La branche énergétique du trimère $n+1$ se déduit de cette courbe par une homothétie de centre O et de rapport $1/\lambda$. Le tracé de la courbe continue a été effectué en utilisant la paramétrisation fournie par NAIDON & ENDO (2017) [leur équation (2.40)].

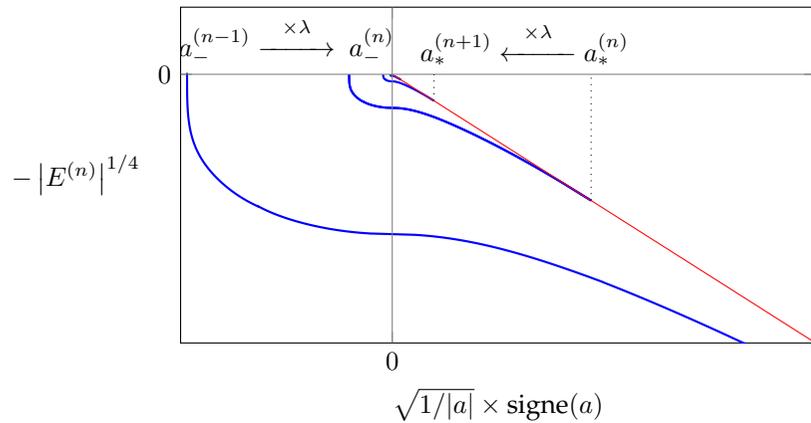


FIGURE 11. Les énergies des trimères d'Efimov au voisinage d'une résonance en fonction de $1/a$. La droite rouge côté $a > 0$ représente le dimère d'énergie $E = -\hbar^2/ma^2$.

Schrödinger à un canal (60), ne prenant en compte que le potentiel hypersphérique $V_{\text{hyp}}(R)$ du canal le plus bas donné en (63) et tracé en figure 9. On constate que cette approximation à un canal, qui revient à négliger les contributions de tous les opérateurs \mathcal{O}_{ij} , est excellente pour notre modèle d'une interaction binaire de portée nulle.

Nous montons également en figure 11 une représentation de l'empilement des différentes branches. Résumons les principales caractéristiques de ces deux diagrammes :

- Du côté $a < 0$ de la résonance, on retrouve les seuils d'apparition des trimères $a_-^{(n)}$, $n = 0, 1, \dots$ qui forment une progression géométrique, de raison $\lambda \approx 22.7$. Pour chaque seuil, on prédit un pic dans le taux de recombinaison à trois corps L_3 dans un gaz atomique, sur lequel nous reviendrons au prochain chapitre.
- À résonance, les énergies des trimères forment une suite géométrique de raison $\lambda^2 \approx 515$ [cf. (50)].
- Du côté $a > 0$ de la résonance, l'énergie du trimère n rejoint celle du dimère (+ un atome libre au repos) pour une valeur $a_*^{(n)}$. On s'attend

en ces points $a_*^{(n)}$ à une résonance du taux de relaxation inélastique atome-dimère β_{AD} . Les valeurs des $a_*^{(n)}$ forment également une suite géométrique de raison λ .

- Les valeurs des $a_-^{(n)}$ et des $a_*^{(n)}$ (de part et d'autre de la résonance) sont reliées par [voir par exemple BRAATEN & HAMMER (2006) et XIE, GRAAFF et al. (2020) et figure 10] :

$$\frac{a_-^{(n)}}{a_*^{(n)}} \approx 21.3 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{a_-^{(n-1)}}{a_*^{(n)}} \approx 0.94 \quad (64)$$

La valeur de $a_-^{(n)}$ et le nombre d'onde à résonance $\kappa_\infty^{(n)}$ défini par $E_\infty^{(n)} = -\hbar^2 \kappa_\infty^{(n)2}/m$ sont reliés par (NAIDON & ENDO 2017) :

$$a_-^{(n)} \kappa_\infty^{(n)} \approx 1.51 \quad (65)$$

Comme dans le cas mMM , ces lois d'échelle sont d'autant mieux vérifiées que n est grand.

4 Un premier exemple : le trimère d'hélium

Après les prédictions d'Efimov, les physiciens ont recherché des systèmes dans lesquels les conditions requises pouvaient être réalisées, aussi bien avec des atomes que des noyaux (EFIMOV 2011). Il fallait que les interactions soient essentiellement à basse énergie, descriptibles par une diffusion en onde s , et que la longueur de diffusion associée a soit grande devant la portée b des potentiels en jeu, ce qui est *a priori* une situation exceptionnelle : on a d'ordinaire $a \sim b$.

Les gaz quantiques avec leurs résonances de diffusion à la Fano-Feshbach sont bien sûr des candidats idéaux pour tester cette physique puisqu'ils permettent d'atteindre des longueurs de diffusion arbitrairement élevée avec des températures plus basses par plusieurs ordres de grandeur que l'échelle d'énergie \hbar^2/mb^2 . Nous décrirons en détail au chapitre suivant un certain nombre d'expériences menées avec ces gaz depuis 2005. Dans cette partie, nous allons présenter les résultats sur un atome qui est apparu rapidement très prometteur, l'hélium (LIM, DUFFY et al. 1977).

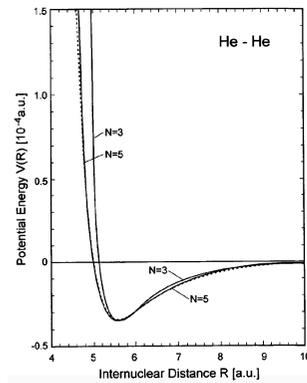


FIGURE 12. Potentiel d'interaction entre deux atomes d'hélium dans leur état fondamental. Le nombre N indique l'ordre du calcul dans un développement multipolaire de l'interaction [voir le cours 2020-21, chap. 1, pour plus de détails]. Figure extraite de TANG & TOENNIES (2003).

4-1 Un bon candidat : l'atome d'hélium

Le potentiel d'interaction entre deux atomes d'hélium est bien connu. Nous l'avons décrit dans le cours 2020-21. Sa portée, caractérisé par la longueur de van der Waals R_{vdW} , est de 0.27 nm et la longueur de diffusion $a = 9.04$ nm est ≈ 20 fois plus grande. Ce puits de potentiel, tracé sur la figure 12, admet un et un seul état lié, qui a été observé pour la première fois par SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994) dans une expérience d'interférométrie atomique que nous rappelons brièvement ci-dessous. L'énergie de liaison de ce dimère ($\sim 10^{-7}$ eV) est beaucoup plus faible que la profondeur du puits de potentiel entre les deux atomes ($\sim 10^{-3}$ eV), ce qui indique qu'il n'est que très marginalement lié (GRISENTI, SCHÖLLKOPF et al. 2000). La distance moyenne entre les deux atomes est ~ 5 nm, comparable à la longueur de diffusion et beaucoup plus grande que R_{vdW} .

Dans l'expérience de SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994), un jet supersonique d'hélium est formé à partir d'un container à haute pression (15 bar) percé d'un trou de diamètre 5 microns. Le jet sortant par cet orifice se propage dans le vide, il se refroidit du fait de la détente supersonique et devient donc quasi-monocinétique ($\Delta v/v \lesssim 5\%$). La longueur d'onde as-

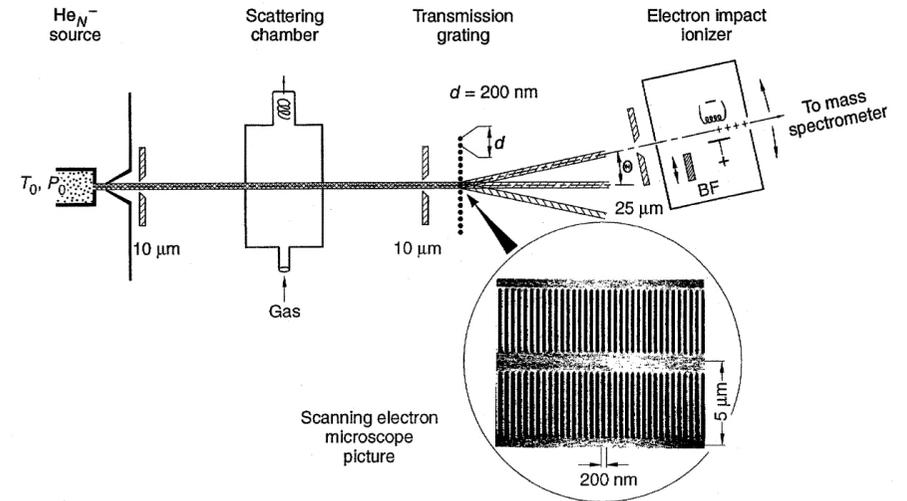


FIGURE 13. Schéma expérimental utilisant la diffraction d'ondes de matière par un réseau pour détecter la présence de dimères et de trimères d'hélium dans un jet supersonique d'hélium atomique. Figure extraite de SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994).

sociée à chaque type de particule (atome, dimère, trimère), $\lambda_{dB} = h/mv$, est alors bien définie. Ainsi, pour une température de 30 K, on a $\lambda_{dB} = 0.18$ nm pour les atomes He.

Ce jet est collimaté par deux fentes de largeur 10 microns, situées à 47 cm l'une de l'autre, puis il traverse un réseau périodique sur lequel les particules peuvent être diffractées (figure 13). La période du réseau est $d = 200$ nm et on s'attend à observer des pics de diffraction à des angles $\theta_n \approx n\lambda_{dB}/d$.

Un exemple de signal est montré sur la figure 14. On y voit un pic principal à gauche, correspondant aux particules non diffractées. À droite, pour un angle θ_1 , le grand pic correspond au premier ordre ($n = 1$) de diffraction des atomes. Entre ces deux grands pics se trouve le signal intéressant. On voit deux pics à $\theta_2 = \theta_1/2$ et $\theta_3 = \theta_1/3$, qui correspondent à des particules

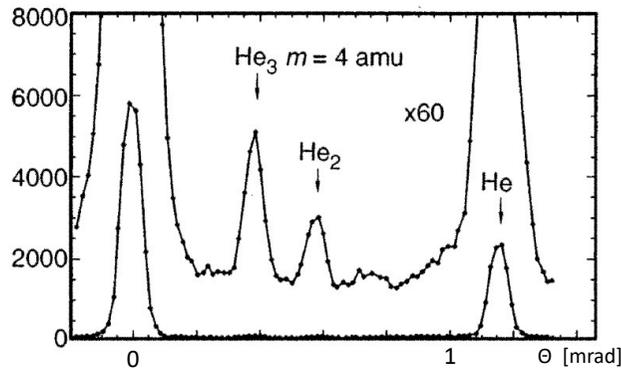


FIGURE 14. Distribution angulaire des particules diffractées par le réseau. Comme le jet est monocinétique, la comparaison des angles de diffraction permet de remonter directement à la masse des particules diffractées. Le grand pic de gauche correspond au jet non diffracté, et le grand pic de droite à l'ordre 1 de la diffraction pour les atomes d'hélium. Les deux petits pics intermédiaires révèlent l'existence des dimères He_2 et des trimères He_3 . Figure extraite de SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994).

dont la longueur d'onde est respectivement 2 et 3 fois plus faible que celles des atomes. Il s'agit respectivement du dimère et du trimère, qui vont à la même vitesse que les atomes du fait des collisions en sortie de la source, mais qui ont une masse 2 et 3 fois plus grande.

4-2 Le trimère He_3 fondamental

L'expérience de SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994) révèle donc l'existence d'un trimère lié He_3 . La très bonne connaissance du potentiel d'interaction entre deux atomes d'hélium permet de bien comprendre la structure de ce trimère. Sa taille est de l'ordre du nanomètre – donc nettement plus petite que le dimère – et sa structure est proche d'un triangle équilatéral.

Nous avons représenté sur la figure 15 la courbe habituelle donnant l'énergie de liaison du trimère dans le plan $(1/a, E)$. Cette courbe a été ob-

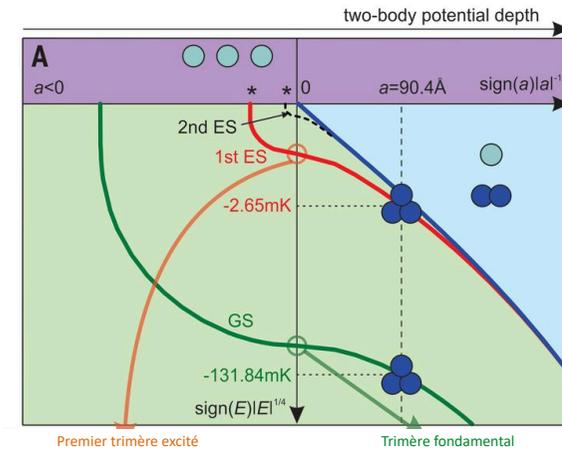


FIGURE 15. Dimère et trimère d'hélium : diagramme énergétique calculé pour le potentiel d'interaction à deux corps $\zeta V(r)$. Pour $\zeta = 1$, on obtient le "vrai" potentiel d'interaction He-He. La résonance de diffusion $a = \pm\infty$ est obtenue pour $\zeta = 0.97$. Figure adaptée de KUNITSKI, ZELLER *et al.* (2015).

tenu en prenant le potentiel réel (conduisant à la longueur de diffusion $a = 9.04 \text{ nm}$) et en le multipliant par un facteur sans dimension ζ . On observe les éléments suivants (BRAATEN & HAMMER 2006) :

- Pour $\zeta = 1$, on s'attend à ce qu'il y ait deux trimères liés, d'énergie -131.84 mK et de taille $\sim 1 \text{ nm}$ [celui observé par SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994)] et un autre beaucoup plus faiblement lié d'énergie $E = -2.65 \text{ mK}$, de taille $\sim 8 \text{ nm}$.
- Quand on diminue ζ , on trouve que la longueur de diffusion devient infinie pour $\zeta = 0.97$. L'état dimère disparaît alors et on a une infinité d'états trimères. L'écart entre le trimère fondamental et le premier trimère excité est un facteur 570 (à comparer au facteur 515 attendu pour le modèle de potentiel de portée nulle).
- La branche du trimère fondamental disparaît pour $\zeta \approx 0.9$.
- Quand on augmente ζ au dessus de 1, on constate que contrairement au cas du potentiel de portée nulle, la branche du trimère fondamental ne rejoint pas la branche du dimère, alors que la branche du trimère

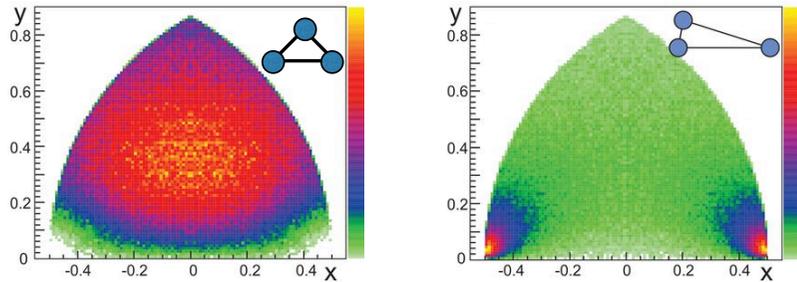


FIGURE 16. Répartition des atomes dans un trimère d'hélium. On place par convention les deux atomes les plus éloignés dans les coins inférieurs gauche et droit. La couleur encode la densité de probabilité pour trouver le troisième atome. Gauche : prévision théorique pour le trimère fondamental. Droite : prévision théorique pour le trimère excité. Figure adaptée de KUNITSKI, ZELLER et al. (2015).

excité le fait.

On peut donc s'interroger sur la nature Efimovienne du trimère fondamental. Comme le soulignent BRAATEN & HAMMER (2006), le fait que le passage de $a = 9 \text{ nm}$ à $a = \infty$ donne "presque" le bon rapport entre les énergies du trimère fondamental et le premier trimère excité plaide en la faveur d'une réponse positive. En revanche, le comportement à $\zeta > 1$ est différent de celui attendu : la longueur de diffusion a_* n'existe pas.

De façon peut-être plus problématique, la géométrie de ce trimère n'est pas celle attendue pour un trimère d'Efimov, à savoir un triangle isocèle allongé. Ce "défaut" est illustré sur la figure 16 gauche. Pour réaliser cette figure, on positionne dans les deux coins inférieurs gauche et droit les deux atomes les plus éloignés l'un de l'autre à l'intérieur du trimère. On représente en fausses couleurs la densité de probabilité pour trouver le troisième atome. Pour un trimère allongé de type Efimov, on s'attend à trouver ce troisième atome proche d'un des deux coins inférieurs. Pour le trimère fondamental, on observe une distribution très différente. Pour le trimère excité en revanche, la distribution prédite correspond bien à celle attendue pour un trimère d'Efimov (figure 16, droite). Ce point a bien sûr conduit les expérimentateurs à chercher à mettre en évidence ce trimère excité.

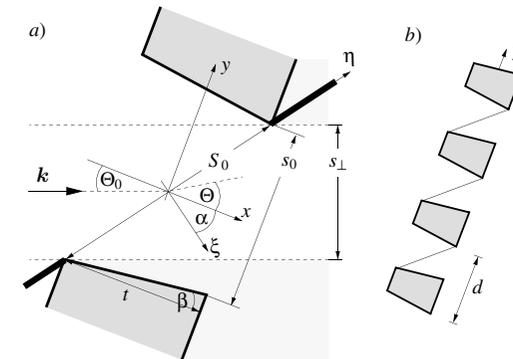


FIGURE 17. Expérience de diffraction menée avec un réseau incliné, pour filtrer en taille les objets diffractés. Figure extraite de BRÜHL, KALININ et al. (2005).

4-3 Le trimère He_3 excité

Dans la recherche du trimère He_3 excité, une première série d'expériences a été menée dans le groupe de Göttingen. Une stratégie explorée est représentée en figure 17. Elle consiste à mener l'expérience de diffraction en inclinant le réseau pour tirer parti d'un effet "passoire". Si l'objet à diffracter est trop gros, il devient peu probable qu'il soit transmis par le réseau de diffraction et on doit observer une chute du signal.

BRÜHL, KALININ et al. (2005) ont conclu de leur expérience que la taille du trimère qu'ils observaient était toujours compatible avec la taille du trimère fondamental, notablement inférieure à la taille du dimère. Ils ont ainsi pu mettre une borne supérieure de l'ordre de 6% sur la proportion de trimères excités, alors qu'ils s'attendaient à une proportion d'au moins 10%. Leur conclusion était alors la suivante : "We feel that the difference between the expectation of 10% and the experimental upper limit of 6% is sufficient to entertain the possibility that the $^4\text{He}_3$ Efimov state does, in fact, not exist despite the over 40 theory publications which have appeared since 1977."

La recherche du trimère excité a été reprise de manière différente par KUNITSKI, ZELLER et al. (2015). Après avoir sélectionné les trimères par une expérience de diffraction d'ondes de matière comme SCHÖLLKOPF & TOENNIES (1994), ils ont ionisé les trois atomes par une impulsion laser

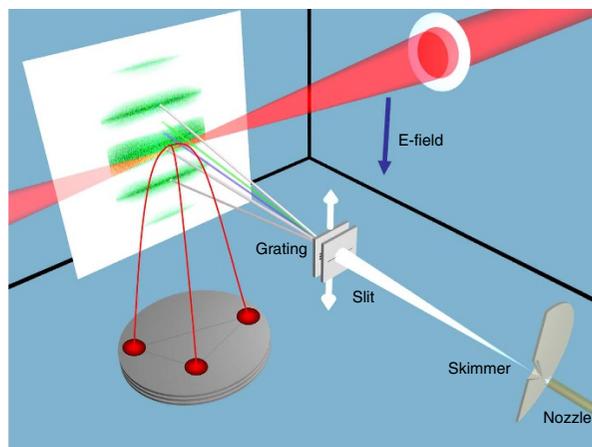


FIGURE 18. Explosion coulombienne d'un trimère d'hélium. Figure extraite de VOIGTSBERGER, ZELLER *et al.* (2014).

très brève (30 fs) et caractérisé l'explosion coulombienne qui suit cette ionisation. Une fois les trois ions observés de manière résolue en position, la résolution des équations du mouvement classiques permet de remonter à la distribution spatiale initiale des atomes (figure 18).

KUNITSKI, ZELLER *et al.* (2015) ont observé une distribution bimodale, correspondant à la somme de deux distributions radicalement différentes. Le poids des deux composantes varie fortement avec la pression du jet supersonique (figure 19). À relativement haute pression, c'est uniquement le trimère fondamental qui est formé. Comme il correspond à des atomes proches, une grande énergie (~ 5 eV) est libérée quand les atomes sont soudainement ionisés. En revanche, à basse pression, on trouve une contribution significative du trimère excité, qui donne lieu à une énergie coulombienne beaucoup plus faible (~ 0.57 eV). Cette variation inattendue de la fraction de trimères excités avec la pression du jet explique le résultat négatif de l'expérience de BRÜHL, KALININ *et al.* (2005). Quarante ans après la prédiction de son existence (LIM, DUFFY *et al.* 1977), le trimère excité d'hélium était enfin observé!

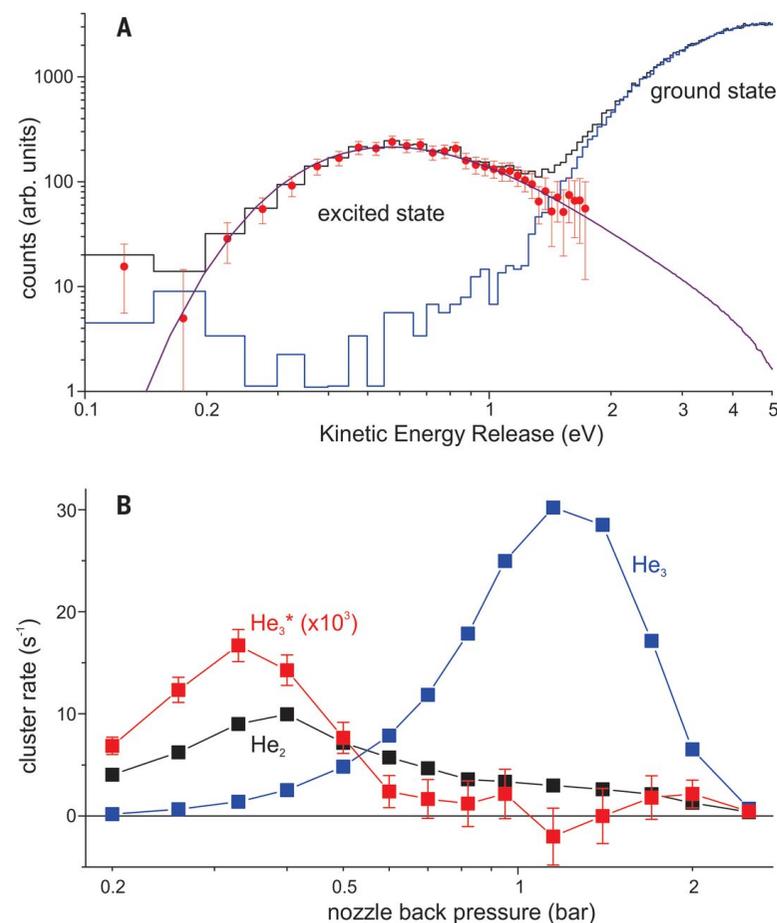


FIGURE 19. Haut : distribution bimodale de l'énergie relâchée lors de l'explosion coulombienne des trimères d'Efimov. La courbe noire a été obtenue dans le régime de basse pression, $P = 0.33$ Bar, pour lequel les deux trimères sont présents. La courbe bleue a été obtenue dans le régime de haute pression, pour lequel seul le trimère fondamental est formé. Les points rouges représentent la différence entre les deux courbes noire et bleue. Bas : Contributions des trimères fondamentaux et excités en fonction de la pression du jet d'hélium. Figure extraite de KUNITSKI, ZELLER *et al.* (2015).

5 Appendice : eq. de Skorniakov Ter-Martirosian

5-1 Définition des composantes de Faddeev

Considérons une fonction d'onde à trois corps $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ solution de l'équation de Schrödinger

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (66)$$

où \hat{H}_0 est l'opérateur énergie cinétique pour les trois particules et \hat{V} la somme des trois potentiels binaires

$$\hat{V} = \hat{V}_{12} + \hat{V}_{23} + \hat{V}_{31}. \quad (67)$$

À ce stade, nous considérons des potentiels réguliers et nous pourrions prendre la limite d'un potentiel de portée nulle plus tard. La fonction Ψ solution de (66) vérifie

$$|\Psi\rangle = \hat{G}_0 \sum_{(ij)} \hat{V}_{ij} |\Psi\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{G}_0 = \frac{1}{E - \hat{H}_0}. \quad (68)$$

On se restreint ici à des solutions d'énergie négative (états liés) de sorte qu'il n'y a pas de problème lié à d'éventuels pôles de \hat{H}_0 .

Les composantes de Faddeev introduites en §1-3 sont définies comme

$$|\chi_1\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{23} |\Psi\rangle \quad |\chi_2\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{31} |\Psi\rangle \quad |\chi_3\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{12} |\Psi\rangle \quad (69)$$

D'après (68), on a donc

$$|\Psi\rangle = |\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle + |\chi_3\rangle \quad (70)$$

et les trois composantes de Faddeev vérifient

$$\hat{H}_0 |\chi_3\rangle + \hat{V}_{12} (|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle + |\chi_3\rangle) = E |\chi_3\rangle \quad (71)$$

et les deux équations déduites par permutation circulaire. (71) s'écrit aussi :

$$|\chi_3\rangle = \hat{G}_0 \hat{V}_{12} |\chi_3\rangle + \hat{G}_0 \hat{V}_{12} (|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) \quad (72)$$

et nous utiliserons cette expression au paragraphe §5-3 pour traiter le cas d'un potentiel séparable.

5-2 Potentiel à un corps séparable

Un potentiel à un corps est dit séparable quand son action sur un état $|\psi\rangle$ est celle d'un projecteur, à un facteur multiplicatif près [cf. Cours 2020-21, chap. 5, §3] :

$$\hat{V} = V_0 |\phi_0\rangle \langle \phi_0|, \quad (73)$$

c'est-à-dire en point de vue position⁶ :

$$\hat{V} \psi(\mathbf{r}) = \alpha V_0 \phi_0(\mathbf{r}) \quad \text{avec} \quad \alpha = \int \phi_0^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r \quad (76)$$

et en point de vue impulsion (ou plutôt vecteur d'onde pour éviter \hbar) :

$$\hat{V} \tilde{\psi}(\mathbf{q}) = \alpha V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}) \quad \text{avec} \quad \alpha = \int \tilde{\phi}_0^*(\mathbf{q}) \tilde{\psi}(\mathbf{q}) \frac{d^3q}{(2\pi)^3}. \quad (77)$$

L'état $|\phi_0\rangle$ est choisi normé :

$$\int |\phi_0(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1 \quad \int |\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})|^2 \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = 1. \quad (78)$$

Notons qu'un potentiel séparable est généralement non local, puisque $\hat{V} \psi(\mathbf{r})$ dépend des valeurs de ψ en tout point de l'espace par l'intermédiaire du produit scalaire α . Une exception correspond au choix $|\phi_0\rangle = |\mathbf{r}_0\rangle$, qui correspond à une interaction de contact au point \mathbf{r}_0 .

La recherche d'éventuels états liés ($E < 0$) d'un potentiel séparable est très simple en point de vue impulsion. Prenons $V_0 < 0$ et posons pour une particule de masse m_r

$$V_0 = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_r} \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_r}. \quad (79)$$

6. Nous utilisons ici la convention :

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{q} \rangle = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \langle \mathbf{q} | \mathbf{q}' \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \quad (74)$$

de sorte que les relations de fermeture en impulsion et en position s'écrivent :

$$\hat{1} = \int |\mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{q}| \frac{d^3q}{(2\pi)^3} = \int |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| d^3r. \quad (75)$$

L'équation de Schrödinger $(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ avec $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m_r$ s'écrit :

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m_r} \tilde{\psi}(\mathbf{q}) + \alpha V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}) = E \tilde{\psi}(\mathbf{q}) \quad (80)$$

ce qui conduit à

$$\tilde{\psi}(\mathbf{q}) = \alpha \frac{k_0^2}{q^2 + \kappa^2} \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}) \quad (81)$$

Pour que cette solution soit acceptable, il faut vérifier son autocohérence, c'est-à-dire qu'elle fournit bien le bon produit scalaire α . Cela vient sélectionner l'unique énergie éventuellement solution de

$$\frac{1}{k_0^2} = \int \frac{|\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})|^2}{q^2 + \kappa^2} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \quad (82)$$

5-3 Problème à trois corps et potentiels séparables

Un potentiel binaire \hat{V}_{12} est dit séparable si son action sur la variable relative est celle décrite ci-dessus, tout en laissant intact l'état de la variable du centre de masse. Nous supposons ici que le potentiel à trois corps \hat{V} est une somme de potentiels binaires \hat{V}_{ij} séparables. Il est alors possible de simplifier considérablement la recherche des énergies des états liés du problème à trois corps [voir par exemple NAIDON, ENDO et al. (2014), NAIDON & ENDO (2017) et GREENE, GIANNAKEAS et al. (2017)].

Considérons l'équation (72) que nous allons mettre sous une forme facilement utilisable. L'état $|\chi_3\rangle$ est défini comme une fonction des deux coordonnées de Jacobi $\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3$:

$$\langle \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3 | \chi_3 \rangle = \chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3). \quad (83)$$

Pour exploiter le caractère séparable de \hat{V}_{12} , nous allons écrire (72) dans l'espace des impulsions. Les moments conjugués d'un jeu donné de coordonnées de Jacobi, par exemple

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \quad \boldsymbol{\rho}_3 = \frac{2}{\sqrt{3}} \left[\mathbf{r}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \right], \quad (84)$$

s'écrivent

$$\mathbf{q}_{12} = \frac{1}{2} (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \quad \mathbf{Q}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\mathbf{k}_3 - \frac{1}{2} (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \right]. \quad (85)$$

Nous définissons la transformée de Fourier de $\chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$ par rapport aux deux variables $\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3$:

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3) = \int e^{-i(\mathbf{q}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12} + \mathbf{Q}_3 \cdot \boldsymbol{\rho}_3)} \chi(\mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) d^3 r_{12} d^3 \rho_3 \quad (86)$$

et nous utilisons l'expression de \hat{H}_0 en terme de ces variables :

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{m} \left(\nabla_{\mathbf{r}_{12}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}_3}^2 \right). \quad (87)$$

Nous posons :

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} \quad V_0 = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{m}, \quad (88)$$

et nous pouvons écrire (72) sous la forme :

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3) = \frac{-m/\hbar^2}{q_{12}^2 + Q_3^2 + \kappa^2} \left[{}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_3 \rangle + \sum_{j=1,2} {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_j \rangle \right] \quad (89)$$

Dans l'expression ci-dessus et dans la suite de ce paragraphe, nous avons explicité par un exposant $^{(k)}$ le système de coordonnées $i = 1, 2, 3$ utilisé pour chaque ket $|\mathbf{q}_{ij}, \mathbf{Q}_k\rangle$. Le premier terme du crochet se calcule directement

$$\begin{aligned} {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_3 \rangle &= V_0 {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \left[(|\phi_0\rangle\langle\phi_0|)^{(12)} \otimes \hat{1}_3 \right] | \chi_3 \rangle \\ &= V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \langle \phi_0, \mathbf{Q}_3 | \chi_3 \rangle \\ &= V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \int \tilde{\phi}_0^*(\mathbf{q}') \tilde{\chi}(\mathbf{q}', \mathbf{Q}_3) \frac{d^3 q'}{(2\pi)^3}. \end{aligned} \quad (90)$$

Les deux autres termes du crochet nécessitent un peu plus de travail. Commençons par remarquer que ces deux contributions sont égales du fait de la symétrie du problème. Intéressons-nous par exemple à la contribution

de $i = 2$, pour laquelle nous introduisons une relation de fermeture pour les coordonnées de Jacobi associées à $i = 2$:

$${}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_2 \rangle = \int {}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2 \rangle {}^{(2)}\tilde{\chi}(\mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2) \frac{d^3 q'_{31} d^3 Q'_2}{(2\pi)^6}. \quad (91)$$

Pour calculer l'élément de matrice intervenant dans cette expression, il nous faut passer des moments $(\mathbf{q}_{31}, \mathbf{Q}_2)$ aux moments $(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3)$. On vérifiera que :

$$\mathbf{q}_{12} = -\frac{1}{2}\mathbf{q}_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{Q}_2 \quad \mathbf{Q}_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{q}_{31} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}_2 \quad (92)$$

dont on déduit

$$|\mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2\rangle^{(2)} = |-\frac{1}{2}\mathbf{q}'_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{Q}'_2, -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{q}'_{31} - \frac{1}{2}\mathbf{Q}'_2\rangle^{(3)} \quad (93)$$

L'élément de matrice intervenant dans (91) s'écrit alors :

$${}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \mathbf{q}'_{31}, \mathbf{Q}'_2 \rangle^{(2)} = V_0 \phi_0(\mathbf{q}_{12}) \phi_0^* \left(-\frac{1}{2}\mathbf{q}'_{31} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{Q}'_2 \right) \times (2\pi)^3 \delta \left(\mathbf{Q}_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{q}'_{31} + \frac{1}{2}\mathbf{Q}'_2 \right). \quad (94)$$

L'intégrale sur \mathbf{q}'_{31} figurant dans (91) disparaît du fait de la présence de la distribution de Dirac et on arrive à :

$${}^{(3)}\langle \mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3 | \hat{V}_{12} | \chi_2 \rangle = \frac{2}{\sqrt{3}} V_0 \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \times \int \tilde{\phi}_0^* \left[\frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{Q}_3 + 2\mathbf{Q}'_2) \right] \tilde{\chi} \left[\frac{-1}{\sqrt{3}}(2\mathbf{Q}_3 + \mathbf{Q}'_2), \mathbf{Q}'_2 \right] \frac{d^3 Q'_2}{(2\pi)^3}. \quad (95)$$

Nous allons maintenant rechercher la solution $\chi(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3)$ sous la forme directement inspirée de la solution (81) du problème à deux corps :

$$\tilde{\chi}(\mathbf{q}_{12}, \mathbf{Q}_3) = \frac{k_0^2}{q_{12}^2 + Q_3^2 + \kappa^2} \tilde{\phi}_0(\mathbf{q}_{12}) \mathcal{F} \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\mathbf{Q}_3 \right) \quad (96)$$

où \mathcal{F} est la fonction à déterminer. Pour simplifier les notations, nous ferons l'hypothèse que la fonction $\phi_0(\mathbf{r})$ est invariante par rotation, de sorte que $\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})$ est également invariante par rotation et ne dépend que de $q = |\mathbf{q}|$. En substituant la forme (96) dans la série d'équations (89,90,95) et en posant $\mathbf{Q} = 2\mathbf{Q}_3/\sqrt{3}$, $\mathbf{Q}' = 2\mathbf{Q}'_2/\sqrt{3}$, nous arrivons à l'équation de SKORNIAKOV & TER-MARTIROSIAN (1957) :

$$\mathcal{A}(Q, \kappa) \mathcal{F}(\mathbf{Q}) = 2 \int \mathcal{B}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \kappa) \mathcal{F}(\mathbf{Q}') \frac{d^3 Q'}{(2\pi)^3} \quad (97)$$

avec

$$\mathcal{A}(Q, \kappa) = \frac{1}{k_0^2} - \int \frac{|\tilde{\phi}_0(q)|^2}{q^2 + \frac{3}{4}Q^2 + \kappa^2} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \quad (98)$$

et

$$\mathcal{B}(\mathbf{Q}, \mathbf{Q}', \kappa) = \frac{\tilde{\phi}_0^* \left(|\mathbf{Q}' + \frac{1}{2}\mathbf{Q}| \right) \tilde{\phi}_0 \left(|\mathbf{Q} + \frac{1}{2}\mathbf{Q}'| \right)}{Q^2 + Q'^2 + \mathbf{Q} \cdot \mathbf{Q}' + \kappa^2}. \quad (99)$$

On a donc ramené le problème à trois corps à la détermination de la fonction $\mathcal{F}(\mathbf{Q})$, solution de l'équation intégrale (97).

On peut retrouver le cas d'un potentiel de contact en prenant $|\phi_0\rangle = |\mathbf{r}_0 = 0\rangle$, ce qui revient à prendre $\tilde{\phi}_0(\mathbf{q})$ indépendant de \mathbf{q} dans ce qui précède. Notons qu'il faut alors introduire une coupure ultra-violette – équivalente au paramètre à trois corps – pour régulariser les intégrales intervenant dans (97), voir par exemple l'appendice de l'article de revue de NAIDON & ENDO (2017) ainsi que PRICOUPENKO (2012) et PETROV (2012).

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 & M. KUSUNOKI (2003), « Universal equation for Efimov states », in *Physical Review A* **67**, p. 022505.
 BRÜHL, R, A KALININ, O KORNILOV, JP TOENNIES, GC HEGERFELDT & M STOLL (2005), « Matter Wave Diffraction from an Inclined Transmission Grating : Searching for the Elusive ^4He Trimer Efimov State », in *Physical Review Letters* **95**, p. 063002.

- D'INCAO, José P (2018), « Few-body physics in resonantly interacting ultracold quantum gases », in *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **51**, p. 043001.
- D'INCAO, JP & BD ESRY (2005), « Manifestations of the Efimov effect for three identical bosons », in *Physical Review A* **72**, p. 032710.
- EFIMOV, V. (1970), « Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system », in *Physics Letters B* **33**, p. 563-564.
- (2011), « Large Few-Body Systems. », in *Few-Body Systems* **51**.
- FERLAINO, F, A ZENESINI, M BERNINGER, B HUANG, H-C NÄGERL & R GRIMM (2011), « Efimov resonances in ultracold quantum gases », in *Few-Body Systems* **51**, p. 113-133.
- GREENE, Chris H, P GIANNAKEAS & J PÉREZ-RÍOS (2017), « Universal few-body physics and cluster formation », in *Reviews of Modern Physics* **89**, p. 035006.
- GRISENTI, R. E., W. SCHÖLLKOPF, J. P. TOENNIES, G. C. HEGERFELDT, T. KÖHLER & M. STOLL (2000), « Determination of the Bond Length and Binding Energy of the Helium Dimer by Diffraction from a Transmission Grating », in *Physical Review Letters* **85**, p. 2284-2287.
- 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.
- LIM, TK, Sister Kathleen DUFFY & William C DAMER (1977), « Efimov state in the he 4 trimer », in *Physical Review Letters* **38**, p. 341.
- NAIDON, Pascal & Shimpei ENDO (2017), « Efimov physics : a review », in *Reports on Progress in Physics* **80**, 056001 (see also corrected version at arXiv :1610.09805v3).
- NAIDON, Pascal, Shimpei ENDO & Masahito UEDA (2014), « Physical origin of the universal three-body parameter in atomic Efimov physics », in *Physical Review A* **90**, p. 022106.
- 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.
- PACK, Russell T & Gregory A PARKER (1987), « Quantum reactive scattering in three dimensions using hyperspherical (APH) coordinates. Theory », in *The Journal of chemical physics* **87**, p. 3888-3921.
- PETROV, D. 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.
- PRICOUPENKO, Ludovic (2012), « Few-body problem in ultra-cold atoms (lectures at Université Pierre et Marie Curie) ».
- SCHÖLLKOPF, Wieland & J Peter TOENNIES (1994), « Nondestructive mass selection of small van der Waals clusters », in *Science* **266**, p. 1345-1348.
- SKORNIKOV, GV & KA TER-MARTIROSIAN (1957), « Three body problem for short range forces. I. Scattering of low energy neutrons by deuterons », in *Soviet Phys. JETP* **4**, p. 648-661.
- TANG, KT & JP TOENNIES (2003), « The van der Waals potentials between all the rare gas atoms from He to Rn », in *The Journal of chemical physics* **118**, p. 4976-4983.
- VOIGTSBERGER, Jörg, Stefan ZELLER, Jasper BECHT, Nadine NEUMANN, Felix STURM, H-K KIM, Markus WAITZ, Florian TRINTER, Maksim KUNITSKI, Anton KALININ et al. (2014), « Imaging the structure of the trimer systems 4He3 and 3He4He2 », in *Nature communications* **5**, p. 1-6.
- XIE, Xin, Michael J Van de GRAAFF, Roman CHAPURIN, Matthew D FRYE, Jeremy M HUTSON, José P D'INCAO, Paul S JULIENNE, Jun YE & Eric A CORNELL (2020), « Observation of Efimov Universality across a Nonuniversal Feshbach Resonance in K 39 », in *Physical Review Letters* **125**, p. 243401.
- YUEN, Chi Hong (2020), « Theoretical Studies of Collisions Involving Three Bodies and Electron-Molecule Collisions Relevant to Astrophysical and Atmospheric Conditions », thèse de doct. University of Central Florida.