Cours 5

Le problème d'Efimov pour trois bosons identiques

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

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

courrier à : listes-diffusion.cdf@college-de-france.fr
avec pour sujet : subscribe chaire-ar.ipcdf

COLLÈGE DE FRANCE 1530

Prochains séminaires

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

Vendredi 14 avril : *Emergence of topological pumping in atom-light interaction*

Tilman ESSLINGER, ETH Zürich, Suisse

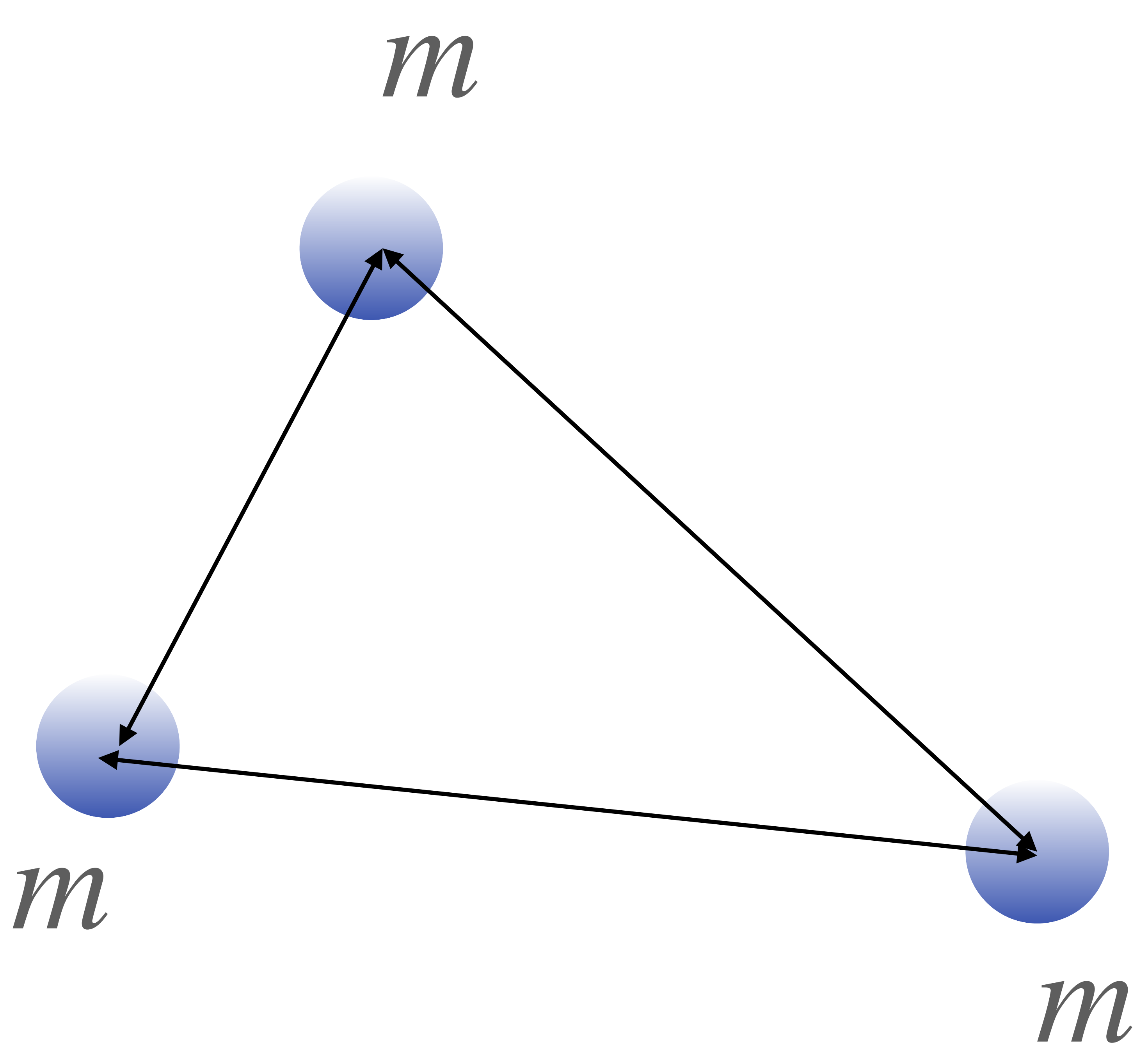
Atelier “*Open systems in Quantum Many-Body Physics*”, vendredi 14 avril, 14h00-18h00

I. Bouchoule (Palaiseau), T. Esslinger (Zurich), N. Goldman (Bruxelles), B. Huard (Lyon), L. Mazza (Orsay), A. Nahum (Paris)

Le séminaire (annulé) du 17 mars de Gerhard Rempe est reprogrammé pour le 28 juin à 11h00 (séminaire LKB)

Le but de ce cours

Efimov 1970, 1971



On considère trois particules identiques interagissant deux à deux avec un potentiel de courte portée

Peut-on former un édifice lié à trois corps ?

Réponse : oui, il peut exister des états liés à trois corps, même s'il n'y a pas d'état lié à deux corps

Il peut même y avoir une infinité d'états liés à trois corps, si l'interaction à deux corps est résonnante

Emergence d'un potentiel en $-\dfrac{1}{R^2}$

Le résultat d'Efimov

Interaction à deux corps caractérisée par la longueur de diffusion a

On suppose que a est grande devant la portée du potentiel à deux corps b (limite $b \to 0$)

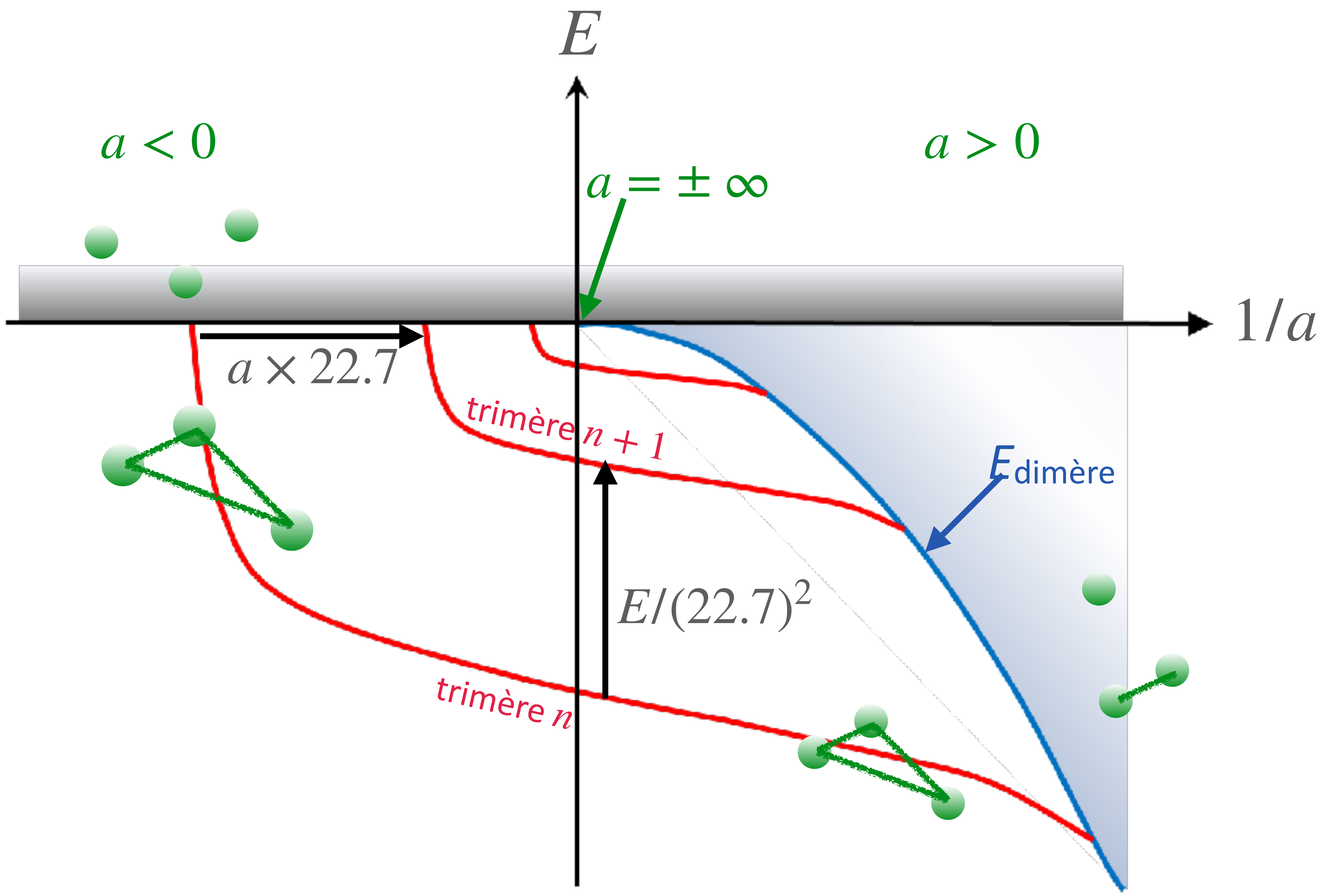
Structure du résultat proche de celle trouvée pour le problème mMM

… mais le facteur d'échelle est maintenant imposé

On remplace $\lambda = e^{\pi/|s_0|}$ avec

$$|s_0| = \left(\frac{M}{2m}\Omega^2 - \frac{1}{4}\right)^{1/2}$$

par $\lambda \approx 22.7$, soit $\lambda^2 \approx 515$



Vérifications expérimentales

Espoir initial d'Efimov : physique nucléaire

Par exemple : $\alpha \;+\; \alpha \;+\; \alpha \quad \rightleftharpoons \quad {}^{12}\mathrm{C}^*$

mais la limite de portée faible $b \ll a$ n'est pas atteinte dans ce cas

Physique atomique :

- Atomes d'hélium (1994-2015) : $\mathrm{He} \;+\; \mathrm{He} \;+\; \mathrm{He} \quad \rightleftharpoons \quad \mathrm{He}_3$
- Gaz d'atomes refroidis par laser (2006-…) : Cs, Li, K, …

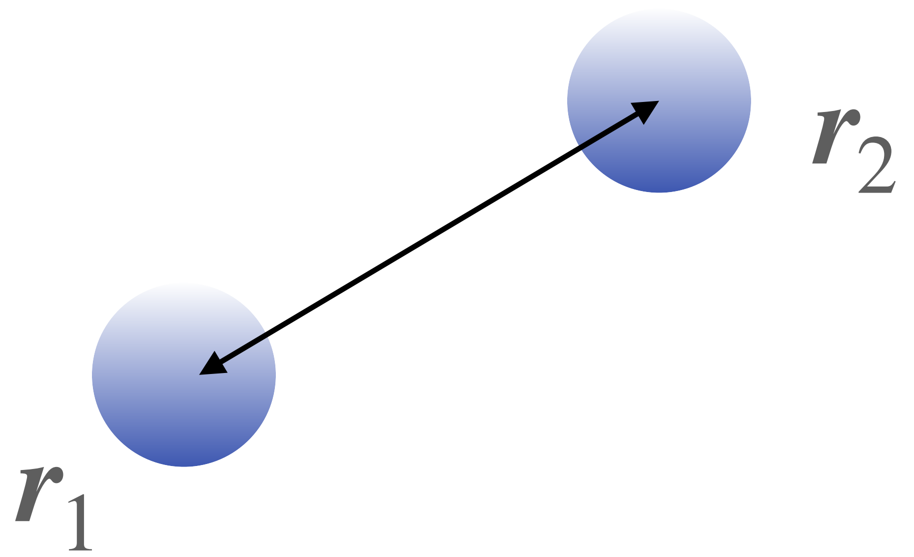
1.

Paramétrisation de l’espace

Comment écrire le plus simplement possible :

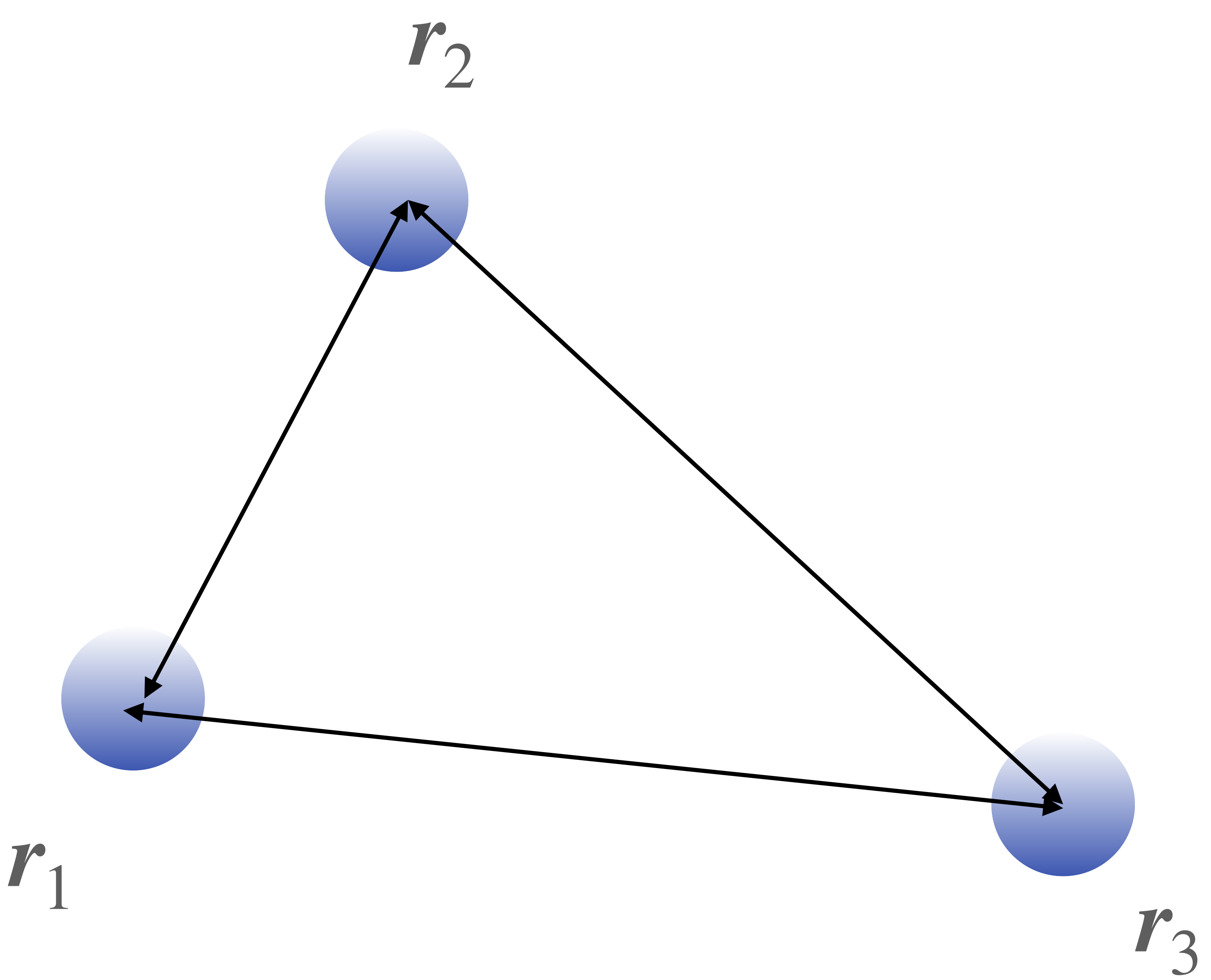
- l’équation de Schrödinger pour les trois corps
- la condition aux limites prenant en compte les interactions binaires

Les variables du problème



Pour le problème à deux corps, on a la séparation usuelle

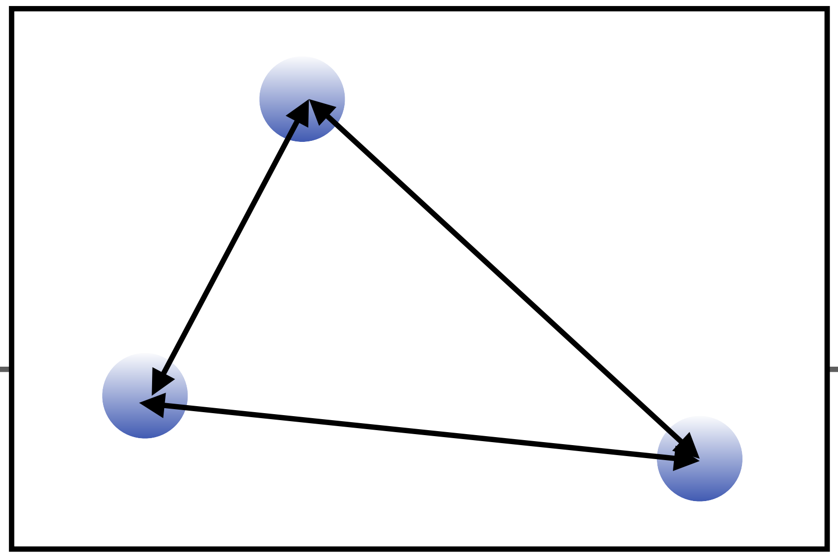
$$\{r_1, r_2\} \longrightarrow \{R_{12}, r_{12}\} \qquad \begin{cases} R_{12} = \dfrac{1}{2}(r_1 + r_2) \\ r_{12} = r_1 - r_2 \end{cases}$$



Pour le problème à trois corps :

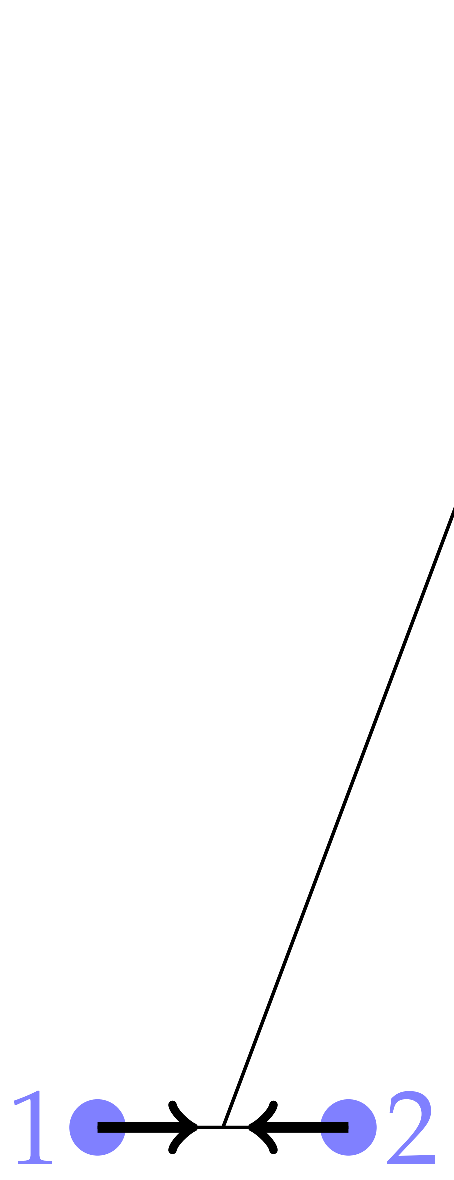
- Centre de masse : $R_{123} = \dfrac{1}{3}(r_1 + r_2 + r_3)$
- Six autres variables à choisir judicieusement

Le pseudo-potentiel pour le problème à trois corps



Interaction prise en compte par les conditions aux limites de Bethe-Peierls

On impose le comportement suivant quand deux particules s'approchent l'une de l'autre :



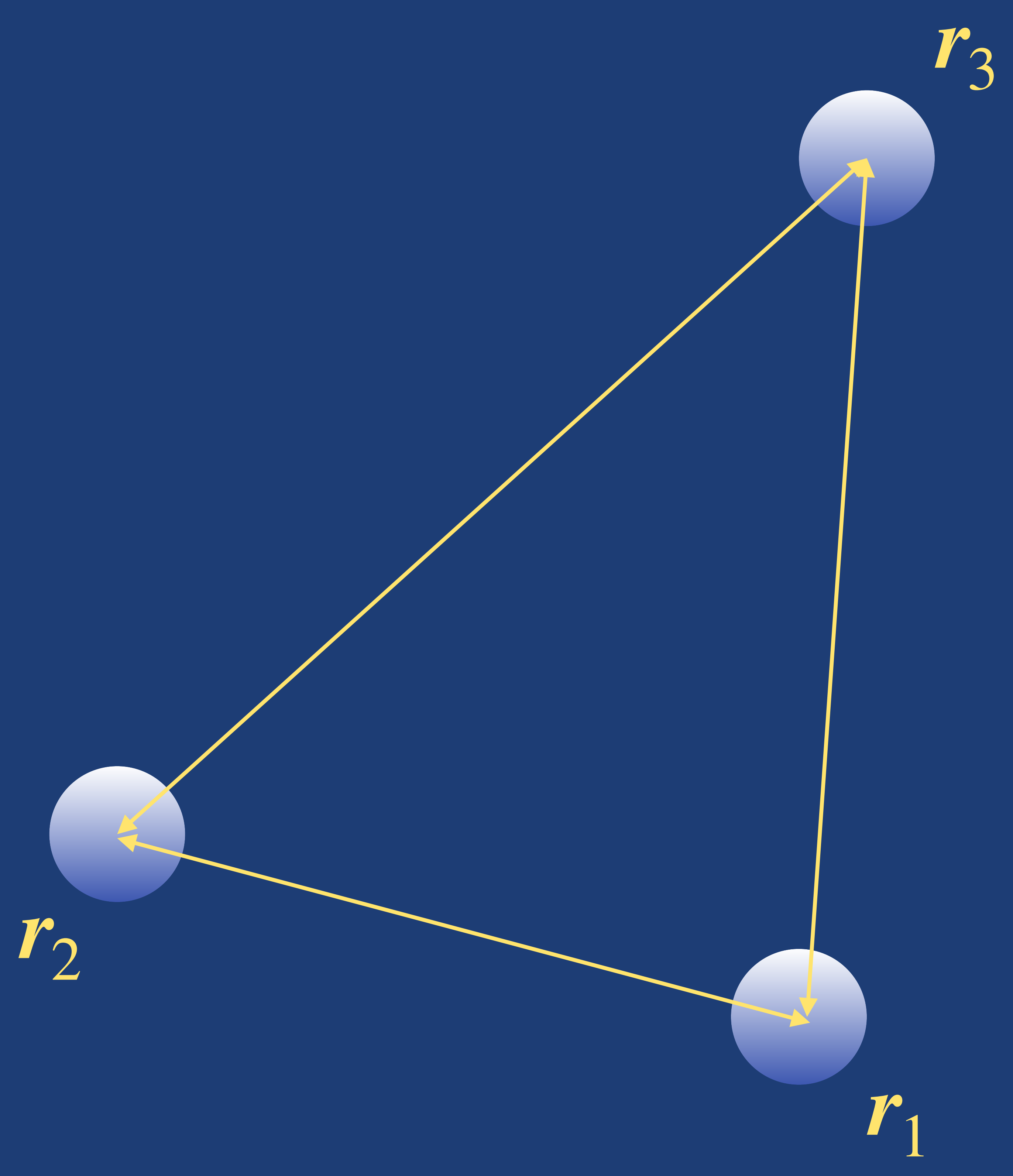
$$r_{12} \to 0 : \qquad \Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{a}\right) \Phi(\boldsymbol{R}_{12}, \boldsymbol{r}_3) + \mathcal{O}(r_{12})$$

- On impose à Ψ de diverger comme $(r_{ij})^{-1}$ quand $r_{ij} \to 0$
- Les coefficients de $(r_{ij})^{-1}$ et de $(r_{ij})^{0}$ sont dans le rapport $-\dfrac{1}{a}$

L'hamiltonien est alors purement cinétique et il faut résoudre : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\sum_{j=1}^{3} \nabla^2_{\boldsymbol{r}_j}\right)\Psi = E\,\Psi$

Hamiltonien simple : la difficulté est reportée sur la prise en compte de la condition aux limites

Les coordonnées de Jacobi



$$\boldsymbol{R}_{123} = \frac{1}{3}\left(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{r}_3\right)$$

- Un système de coordonnées possible (parmi 3)

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

- L’opérateur Laplacien pour ces coordonnées

- L’équation de Schrödinger

- Passage d’un système de Jacobi à un autre

Les composantes de Fadeev

Comment prendre en compte la condition aux limites de Bethe-Peierls avec les coordonnées de Jacobi ?

Après élimination du mouvement du centre de masse : $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = \chi(\boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3)$

La limite $r_{12} \to 0$ est immédiate, mais *quid* des deux autres limites $r_{23} \to 0$ et $r_{31} \to 0$?

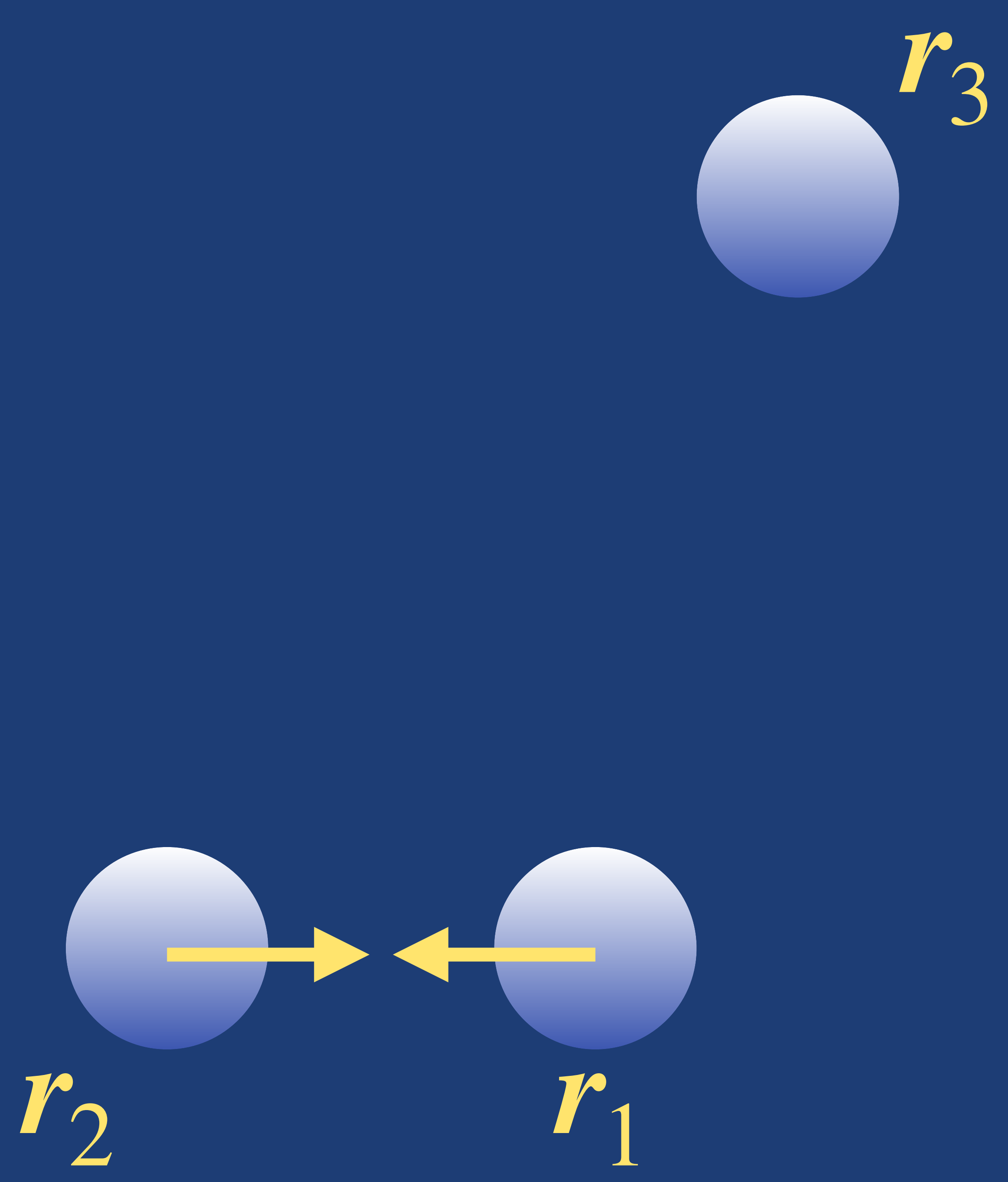
On va plutôt chercher Ψ sous la forme : $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = \chi(\boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(\boldsymbol{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1) + \chi(\boldsymbol{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2)$

avec $$-\frac{\hbar^2}{m}\left(\nabla^2_{\boldsymbol{r}} + \nabla^2_{\boldsymbol{\rho}}\right)\chi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho}) = E\,\chi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho})$$

Chaque fonction $\chi(\boldsymbol{r}_{ij}, \boldsymbol{\rho}_k)$ va prendre en charge la divergence en $(r_{ij})^{-1}$ requise :

$$\chi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho}) \text{ diverge comme } \frac{1}{r} \text{ quand } \boldsymbol{r} \to 0$$

Prise en compte de la condition aux limites de Bethe-Peierls



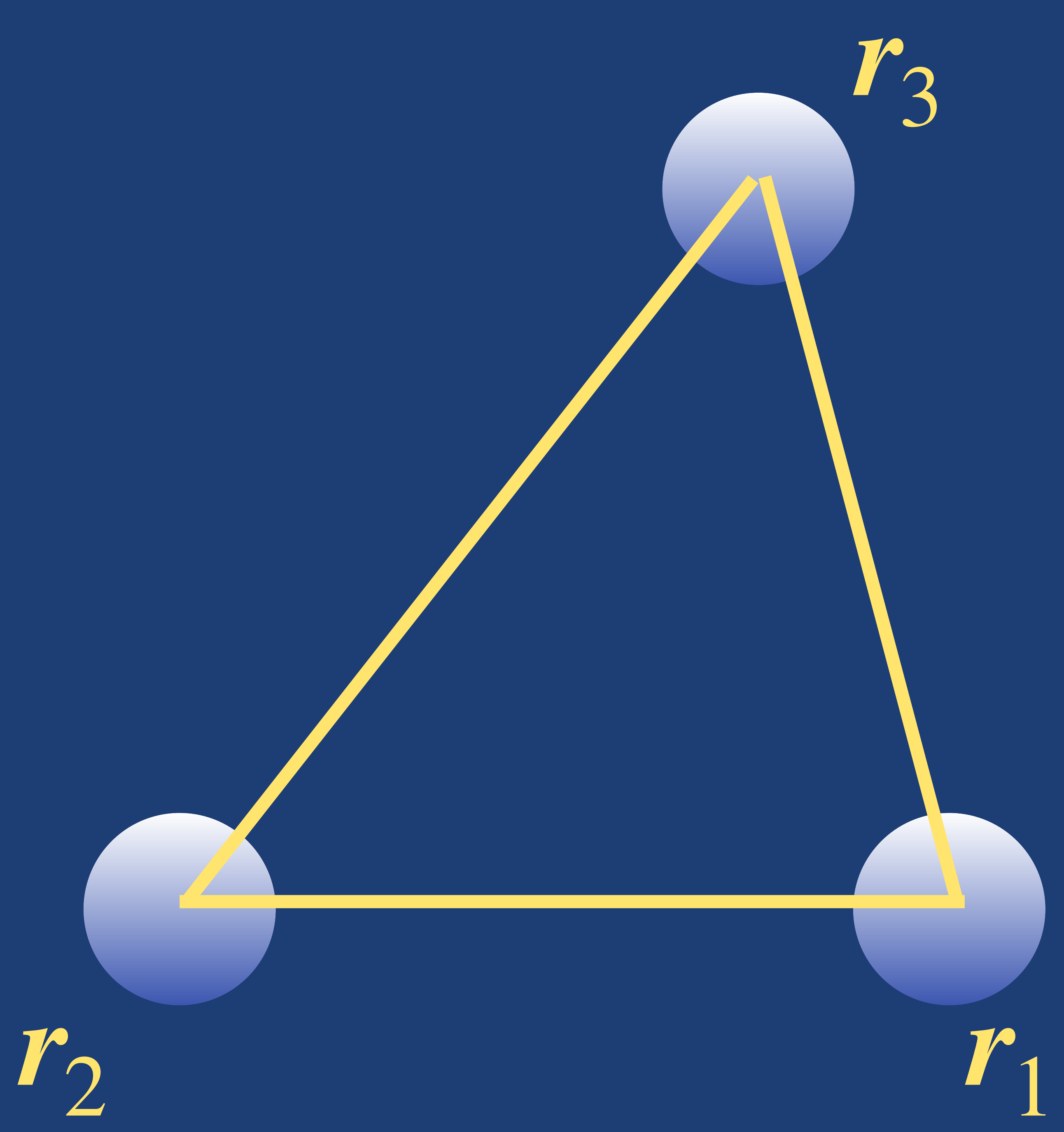
$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = \chi(\boldsymbol{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_3) + \chi(\boldsymbol{r}_{23}, \boldsymbol{\rho}_1) + \chi(\boldsymbol{r}_{31}, \boldsymbol{\rho}_2)$$

avec la forme attendue pour $\chi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho})$:

$$\boldsymbol{r} \to 0 : \qquad \chi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho}) = \frac{A(\boldsymbol{\rho})}{r} + B(\boldsymbol{\rho}) + \mathcal{O}(r)$$

Quelle est la condition à imposer sur A, B, χ ***?***

Quelles variables adopter ?



- Hyperrayon $$R^2 = \frac{2}{3}\left(r_{12}^2 + r_{23}^2 + r_{31}^2\right)$$

- Variables angulaires

  Angle de Delves α

  $\left.\begin{array}{l}\text{Angle de Jacobi } \beta \\ \text{3 angles d'Euler}\end{array}\right\} \boldsymbol{\Omega}$

L'hamiltonien (cinétique) pour les variables $\{R, \alpha, \beta, \text{ angles d'Euler}\}$

On note : $\{\beta, \text{ angles d'Euler}\} \equiv \boldsymbol{\Omega}$

$$\{\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho}\} \longrightarrow \{R, \alpha, \boldsymbol{\Omega}\}$$

Opérateur énergie cinétique : $\hat{H}_{\text{cin}} = -\dfrac{\hbar^2}{m}\left(\nabla_{\boldsymbol{r}}^2 + \nabla_{\boldsymbol{\rho}}^2\right) = \hat{T}_R + \hat{T}_\alpha + \hat{T}_\Omega$

- Composante radiale : $\hat{T}_R \Psi = -\dfrac{\hbar^2}{m}\dfrac{1}{R^5}\dfrac{\partial}{\partial R}\left(R^5 \dfrac{\partial \Psi}{\partial R}\right)$
- Composante liée à l'angle de Delves α : $\hat{T}_\alpha \Psi = -\dfrac{\hbar^2}{mR^2}\dfrac{1}{\sin^2(2\alpha)}\dfrac{\partial}{\partial \alpha}\left(\sin^2(2\alpha)\dfrac{\partial \Psi}{\partial \alpha}\right)$
- Composante liée à $\boldsymbol{\Omega}$: $\hat{T}_\Omega = \dfrac{1}{mR^2}\left[\dfrac{(\hat{\boldsymbol{J}} - \hat{\boldsymbol{L}})^2}{\cos^2\alpha} + \dfrac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{\sin^2\alpha}\right]$

$\hat{\boldsymbol{J}}$: moment cinétique des trois corps ; $\hat{\boldsymbol{L}}$: moment cinétique du dimère aligné selon $\boldsymbol{r}$

On va se placer dans le sous-espace $J = L = 0$: quatre variables en moins !

Le problème à deux variables

$\{\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\rho}\} \longrightarrow \{R, \alpha, \boldsymbol{\Omega}\}$

Opérateur énergie cinétique : $\hat{H}_{\text{cin}} = \hat{T}_R + \hat{T}_\alpha + \cancel{\hat{T}_\Omega}$

$J = L = 0$

$$\hat{T}_R \Psi = -\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{R^5}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^5 \frac{\partial \Psi}{\partial R}\right)$$

$$\hat{T}_\alpha \Psi = -\frac{\hbar^2}{mR^2}\frac{1}{\sin^2(2\alpha)}\frac{\partial}{\partial \alpha}\left(\sin^2(2\alpha)\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha}\right)$$

$$\left(\hat{T}_R + \hat{T}_\alpha\right)\chi(r,\rho) = E\,\chi(r,\rho)$$

$$r = R\sin\alpha \qquad \rho = R\cos\alpha$$

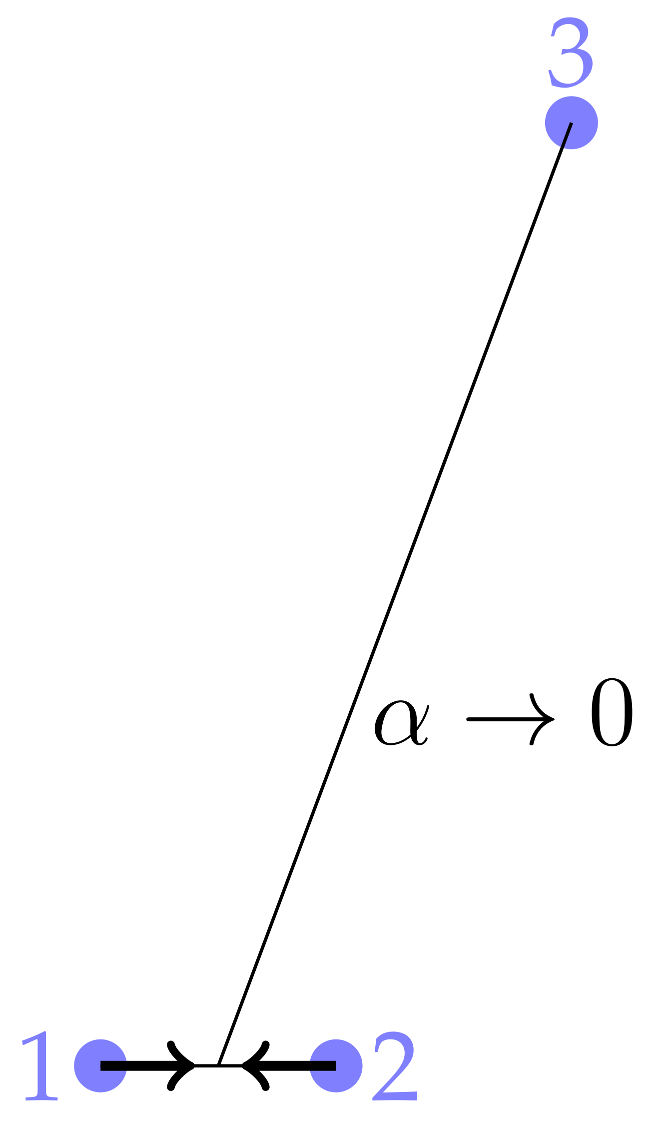
On change la fonction inconnue $\Phi(R,\alpha) = R^{5/2}\sin(2\alpha)\,\chi(r,\rho)$ pour arriver à :

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

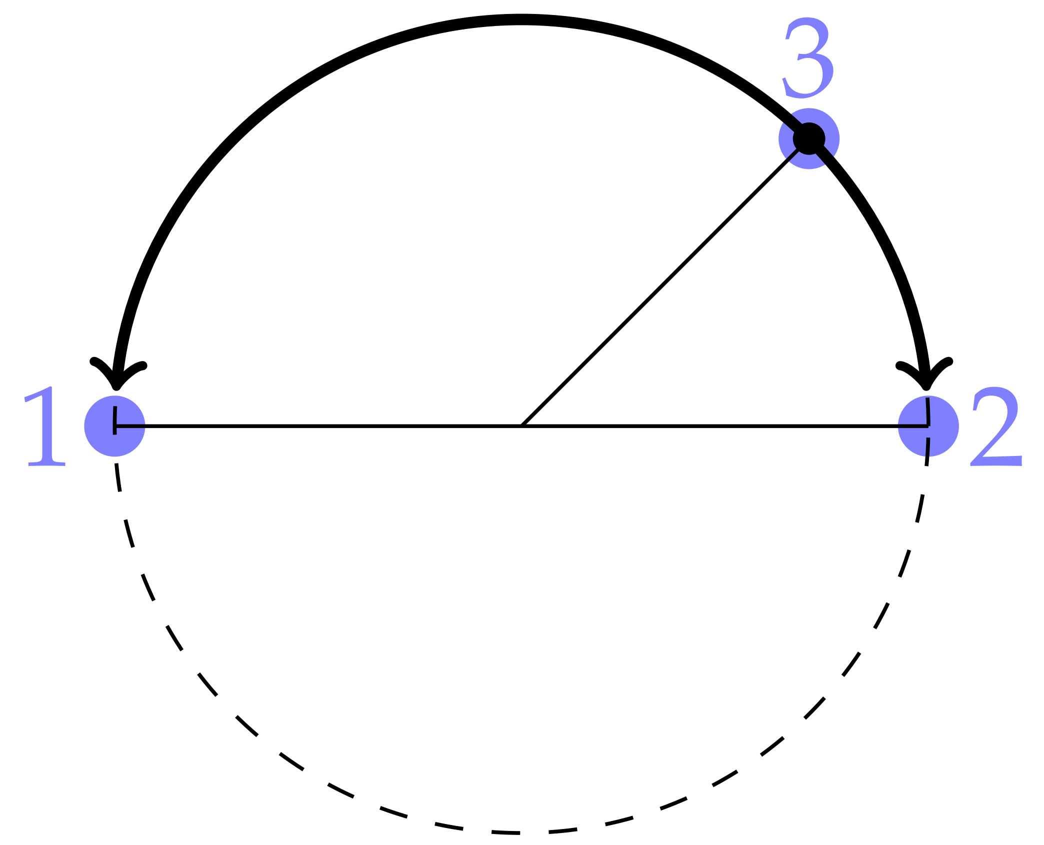
Se prête bien à une résolution séquentielle : d'abord α, puis R, si la condition aux limites le permet

La condition aux limites de Bethe-Peierls pour (R, α)

Contribution du cas $r_{12} \to 0$



Contribution du cas $r_{23} \to 0$ ou $r_{31} \to 0$



$\alpha = \pi/3$

$$\frac{1}{R}\left[\frac{\partial \Phi(R,\alpha)}{\partial \alpha}\right]_{\alpha\to 0} \quad + \quad 2\times\frac{4}{R\sqrt{3}}\Phi\left(R,\frac{\pi}{3}\right) = -\frac{1}{a}\Phi(R,0)$$

Le choix de fonction $\Phi(R,\alpha) = R^{5/2}\sin(2\alpha)\,\chi(r,\rho)$ impose par ailleurs $\Phi\left(R,\frac{\pi}{2}\right) = 0$

2.

Le cas résonnant $|a| = +\infty$

Simplification de la condition aux limites de Bethe-Peierls

$$\frac{1}{R}\left[\frac{\partial \Phi(R,\alpha)}{\partial \alpha}\right]_{\alpha\to 0} \quad + \quad 2\times\frac{4}{R\sqrt{3}}\Phi\left(R,\frac{\pi}{3}\right) = -\frac{1}{a}\Phi(R,0)$$

$$\xrightarrow{\;|a| = +\infty\;} \quad \left[\frac{\partial \Phi(R,\alpha)}{\partial \alpha}\right]_{\alpha\to 0} \quad + \quad 2\times\frac{4}{\sqrt{3}}\Phi\left(R,\frac{\pi}{3}\right) = 0$$

avec toujours : $\Phi\left(R,\frac{\pi}{2}\right) = 0$

La variable R est "spectatrice"

La disparition de l'échelle de longueur a permet de chercher les solutions sous forme factorisée :

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

Bilan pour le cas $|a| = +\infty$

On cherche une solution factorisée $\Phi(R,\alpha) = \phi(R)\ F(\alpha)$ à l'équation de Schrödinger

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

avec les conditions aux limites

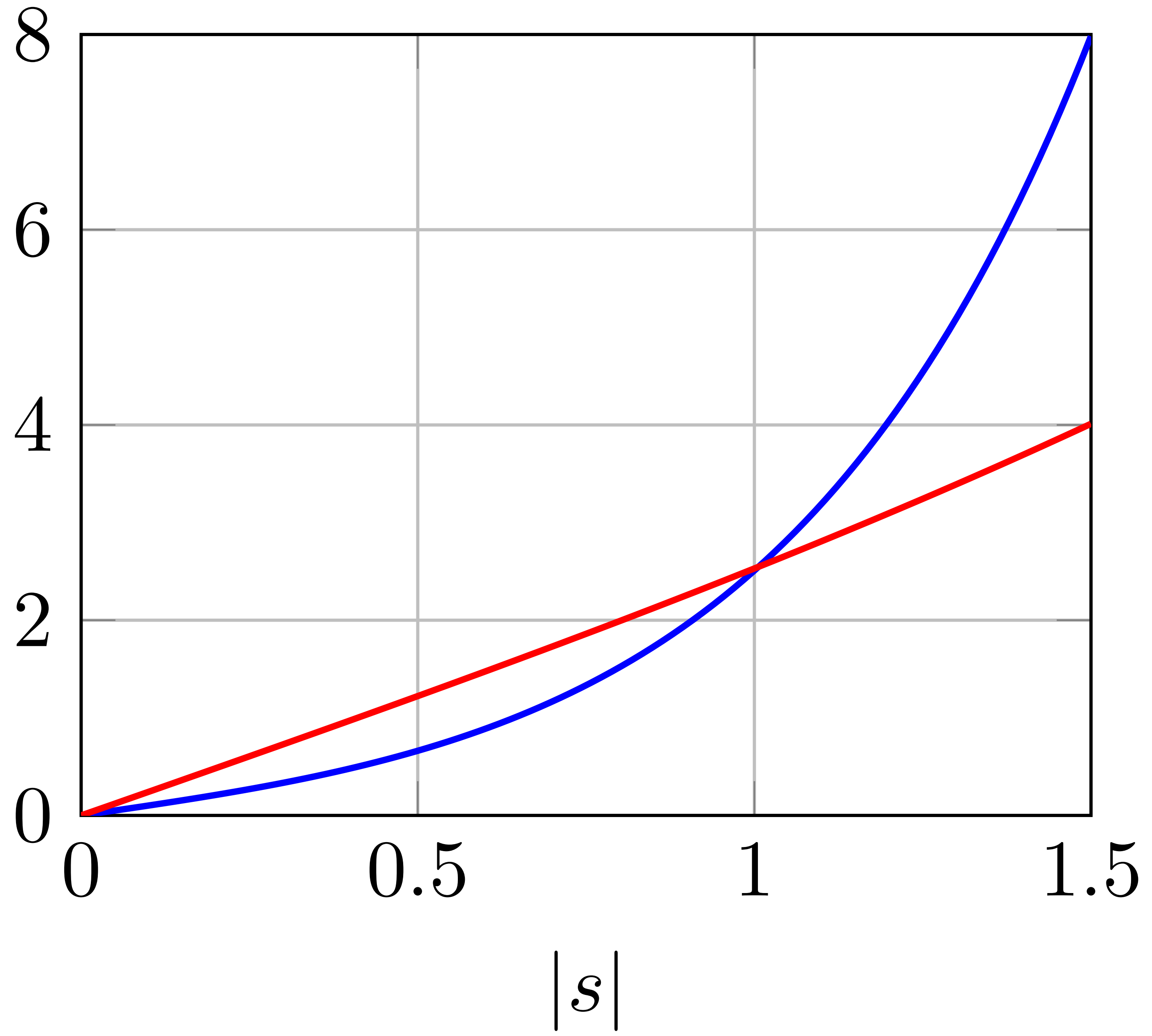
$$\begin{cases} \left[\dfrac{\partial\Phi(R,\alpha)}{\partial\alpha}\right]_{\alpha\to 0} + \dfrac{8}{\sqrt{3}}\Phi\left(R,\dfrac{\pi}{3}\right) = 0 \\ \Phi\left(R,\dfrac{\pi}{2}\right) = 0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} F'(0) + \dfrac{8}{\sqrt{3}}F\left(\dfrac{\pi}{3}\right) = 0 \\ F\left(\dfrac{\pi}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

On commence par résoudre le problème angulaire , $-\partial_\alpha^2 F = s^2\, F$, avec s^2 le plus petit possible, donc négatif

Solution du problème angulaire $-F''(\alpha) = -|s|^2 F$

On écrit la solution $F(\alpha)$ sous la forme $F(\alpha) = \sinh\left[|s|\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right)\right]$

où $|s|$ est solution de : $|s|\cosh(|s|\pi/2) = \frac{8}{\sqrt{3}}\sinh(|s|\pi/6)$



Une solution unique : $|s_0| = 1.00624\cdots$

Toutes les autres solutions correspondent à $s^2 > 0$ et ne conduisent pas à des états liés.

La solution du problème radial

Retour vers l'équation initiale

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

avec

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

$$-\partial_\alpha^2 F = -\,|\,s_0\,|^2\,F$$

Equation vérifiée par ϕ :

$$-\phi''(R) - \frac{|\,s_0\,|^2 + 1/4}{R^2}\phi(R) = \frac{mE}{\hbar^2}\,\phi(R)$$

Interaction binaire
à courte portée,
mais résonante

→

Interaction effective
à trois corps à longue portée :

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

propriété
"émergente"

Un terrain familier…

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

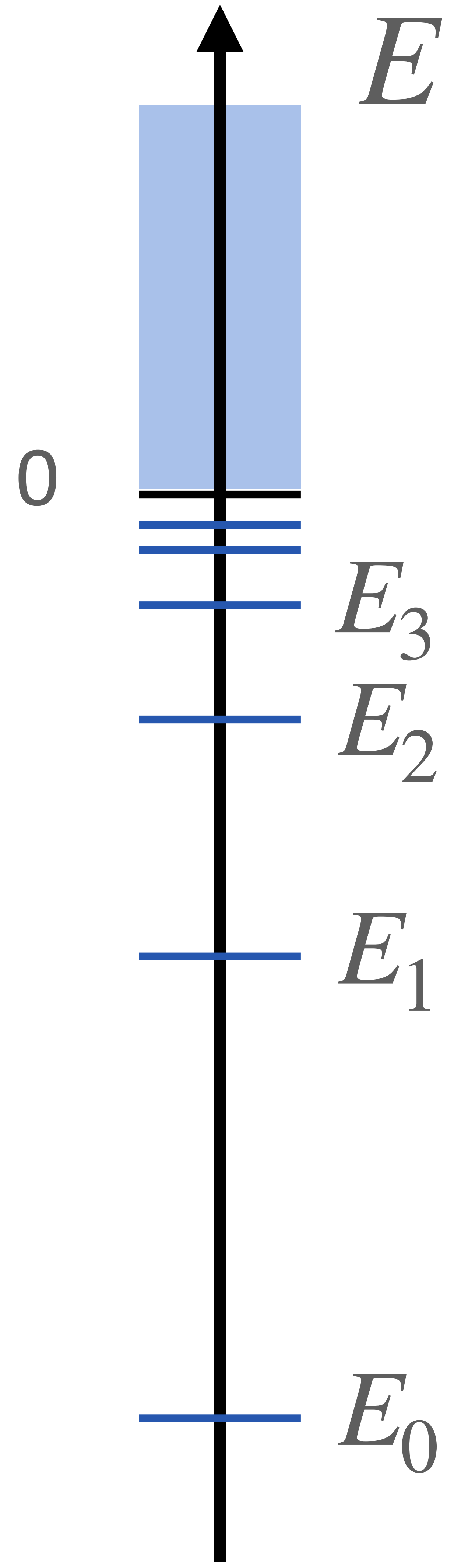
Equation vérifiée par ϕ : $$-\phi''(R) - \frac{|s_0|^2 + 1/4}{R^2}\phi(R) = \frac{mE}{\hbar^2}\ \phi(R)$$

- Il faut introduire un paramètre à trois corps R_0 (par exemple un cœur dur) pour empêcher la “chute vers le centre”

- Nombre infinis d’états liés, avec des énergies formant une suite géométrique

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} \approx \frac{1}{\lambda^2} \qquad \text{avec} \qquad \lambda = \mathrm{e}^{\pi/|s_0|} \approx 22.7, \qquad \lambda^2 \approx 515$$

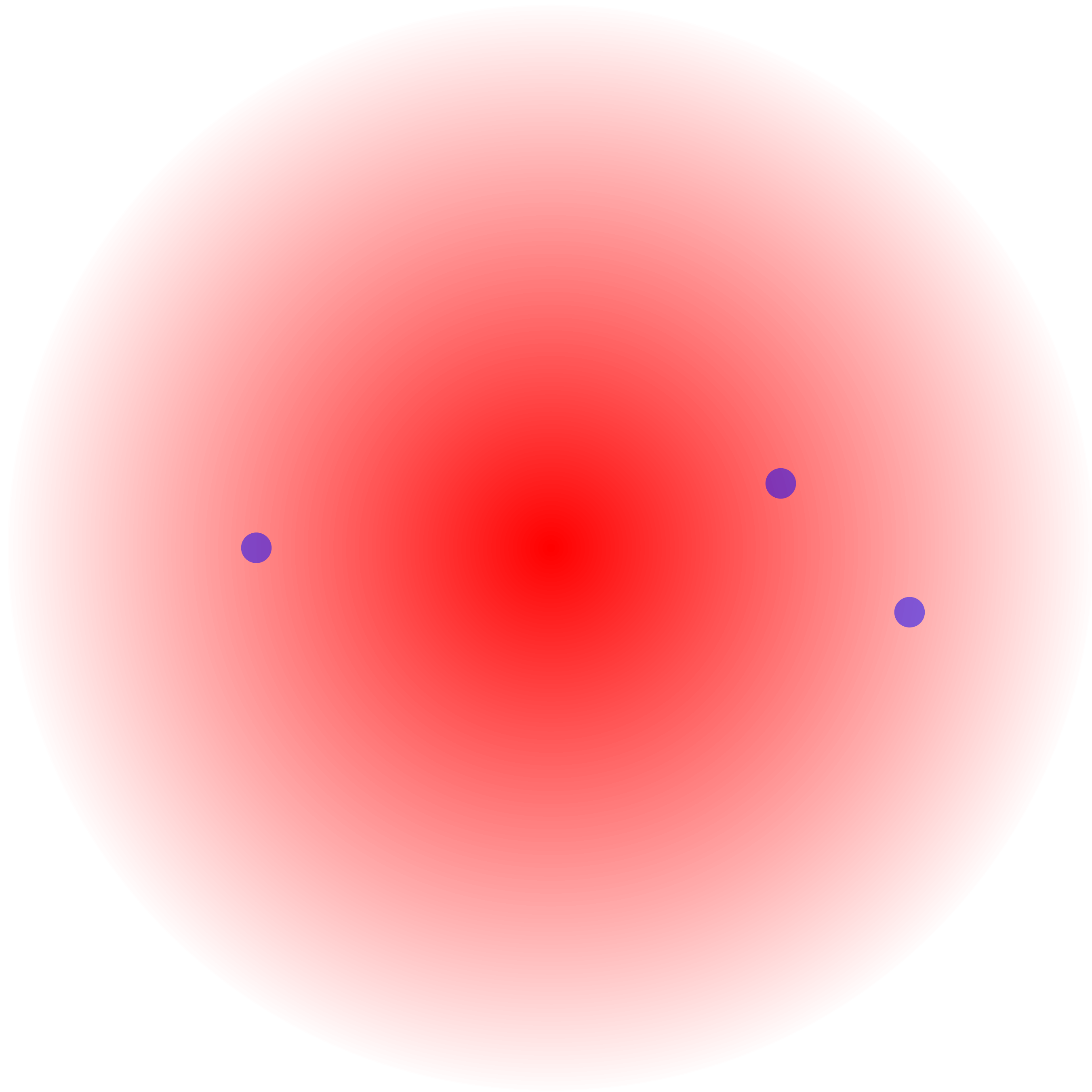
$$|s_0| = 1.00624\cdots$$



La structure géométrique des états liés

Forme factorisée pour la fonction d'onde : $\Phi(R,\alpha) = \phi(R)\ F(\alpha)$

- Les états liés ne diffèrent les uns des autres que par leur taille : ils ont la même répartition angulaire



- La fonction $F(\alpha) = \sinh\left[\,|s|\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right)\right]$ est "piquée"

  autour de $\alpha = 0$: favorise des configurations allongées

3.

Le cas général $a > 0$ ou $a < 0$

La séparation hyperayon (R) — angle (α)

L'équation de Schrödinger (purement cinétique) reste inchangée

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

mais la condition aux limites de Bethe-Peierls couple maintenant l'angle de Delves et l'hyperrayon :

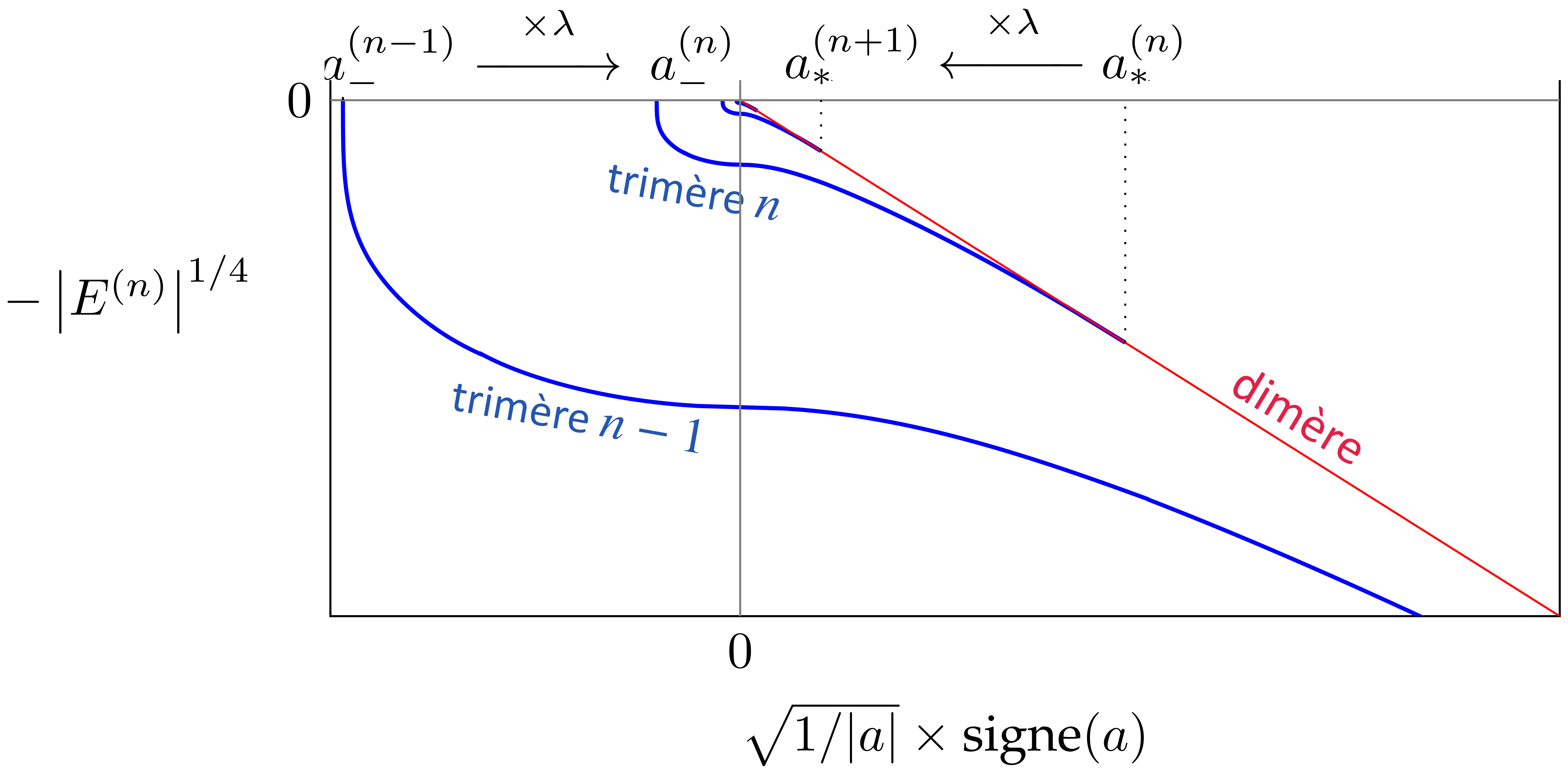
$$\left[\frac{\partial\Phi(R,\alpha)}{\partial\alpha}\right]_{\alpha\to 0} \quad + \quad \frac{8}{\sqrt{3}}\Phi\left(R,\frac{\pi}{3}\right) = -\frac{R}{a}\,\Phi(R,0)$$

Approche semi-analytique possible, de type “adiabatique”

- Résolution du problème angulaire avec R fixé [on traite α comme une variable rapide]
- On injecte le résultat angulaire dans l'équation pour l'hyperrayon

Le spectre en énergie des trimères d'Efimov (semblable au cas mMM)

Choix de coordonnées linéaires "resserrées" $\left(\frac{1}{a}, E\right) \longrightarrow \left(\frac{\text{signe}(a)}{\sqrt{|a|}}, -|E|^{1/4}\right)$



A résonance :

$$\frac{E_{n+1}}{E_n} = \frac{1}{\lambda^2}$$

$$\lambda = e^{\pi/|s_0|} \approx 22.7$$

$$\lambda^2 \approx 515$$

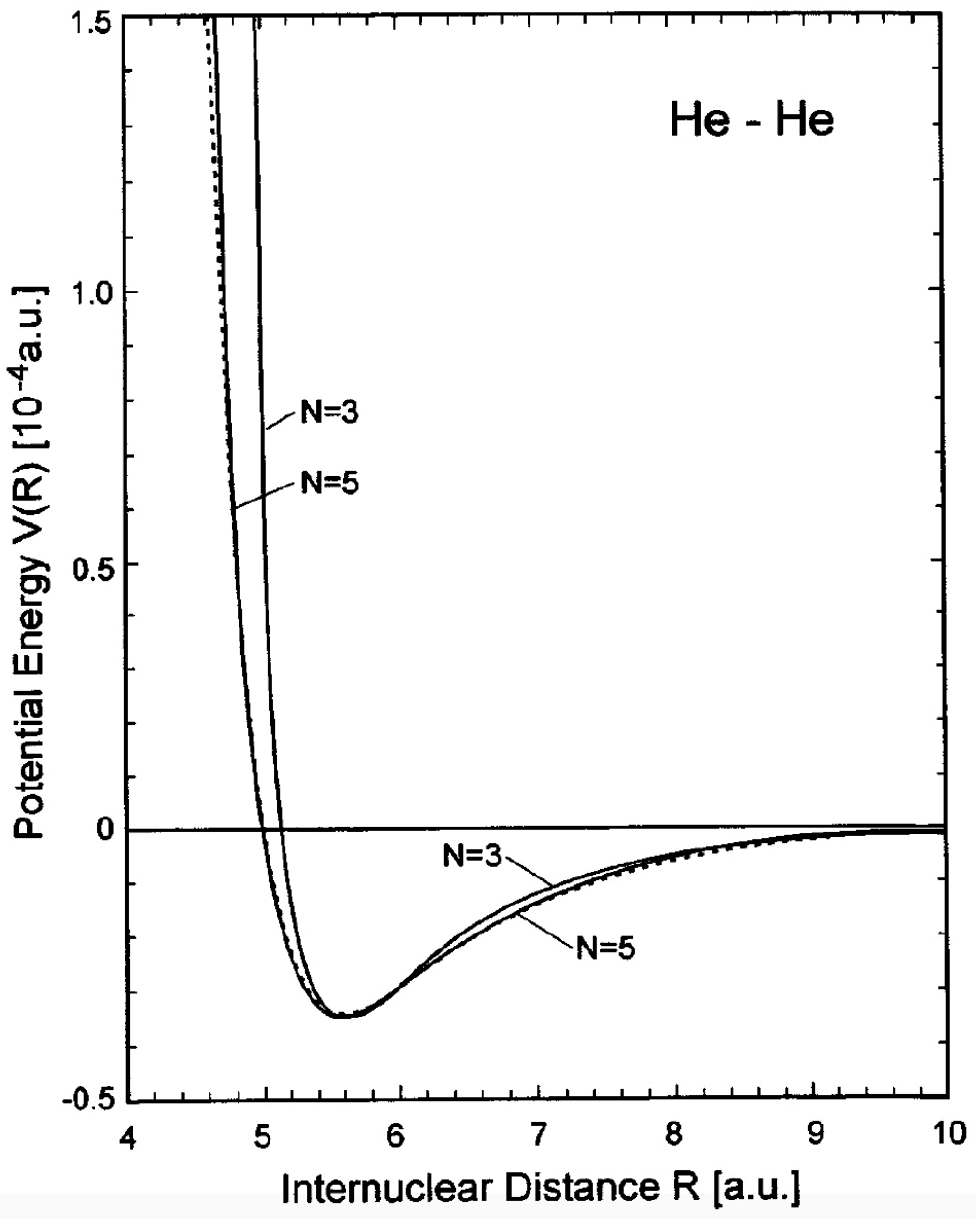
Lien entre les deux ailes :

$$a_*^{(n+1)} \approx |a_-^{(n)}|$$

4.

Les trimères d’hélium

Interaction entre deux atomes d'hélium



Tang & Toennies, 2003

Rayon de van der Waals caractérisant la portée b du potentiel :

$$R_{\mathrm{vdW}} = 0.27\,\mathrm{nm}$$

Longueur de diffusion : $a = 9.04\,\mathrm{nm}$

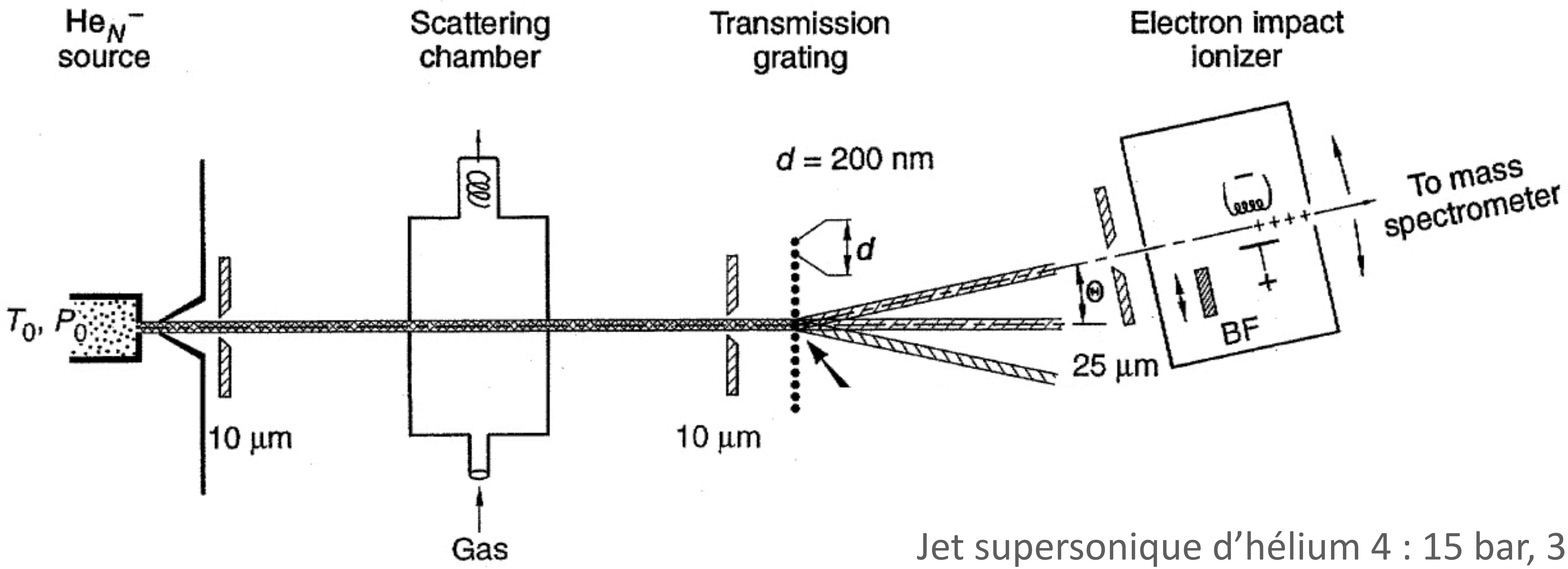
L'hypothèse de résonance de diffusion $|a| \gg b$ *est bien vérifiée*

On prédit un seul état lié à deux corps :

$$E_{\mathrm{dimere}} \sim 10^{-7}\,\mathrm{eV} \quad \ll \quad V_0 \sim 10^{-3}\,\mathrm{eV}$$

La détection des dimères et des trimères

Schöllkopf & Toennies, Science (1994)

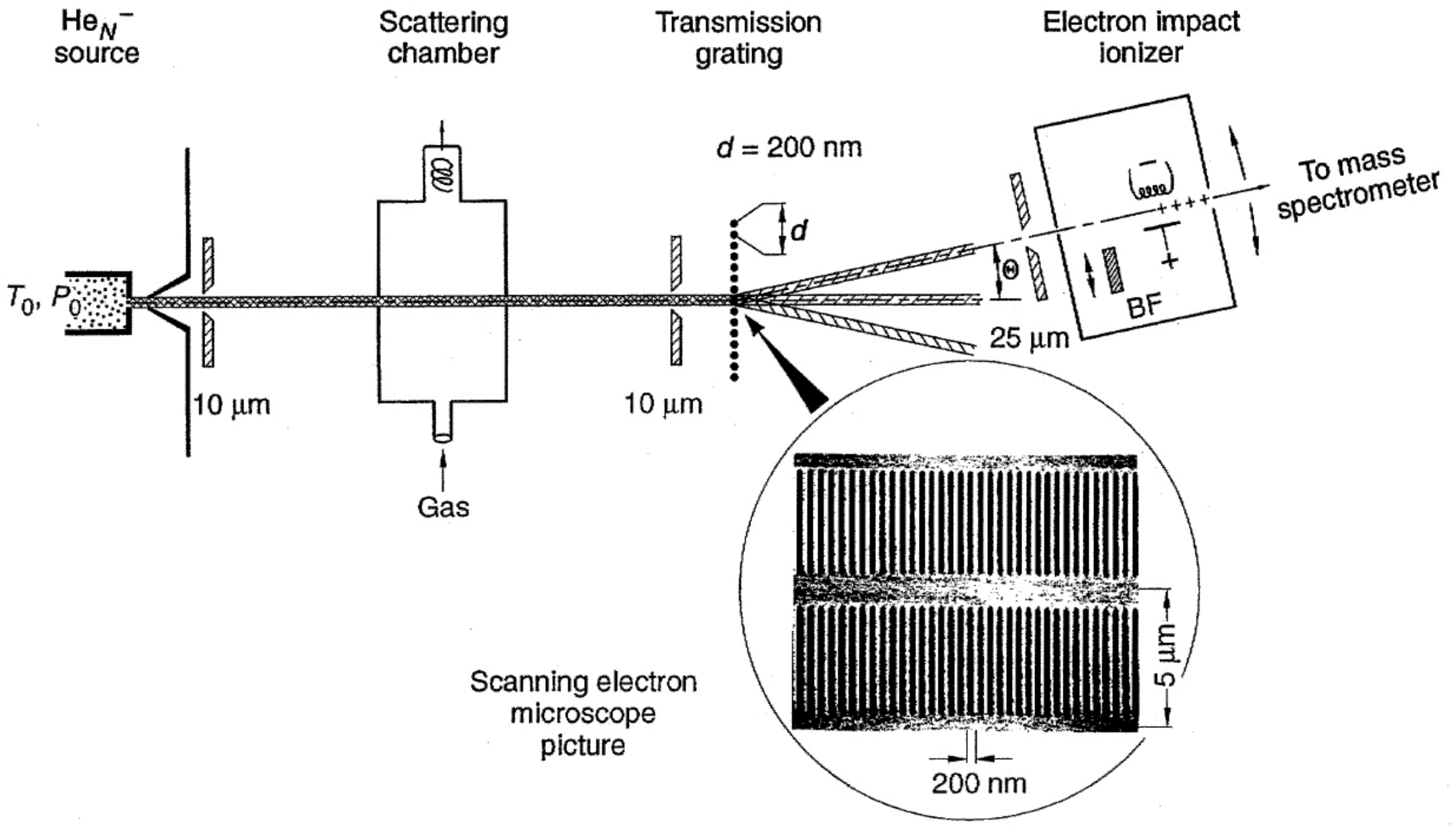


Jet supersonique d'hélium 4 : 15 bar, 30 Kelvins

$\Delta v/v \sim 0.15$: longueur de de Broglie bien définie $\lambda_{\rm dB} = 0.18$ nm

Collimation par deux fentes de 10 μm séparées de 47 cm

Le signal de diffraction d'ondes de matière



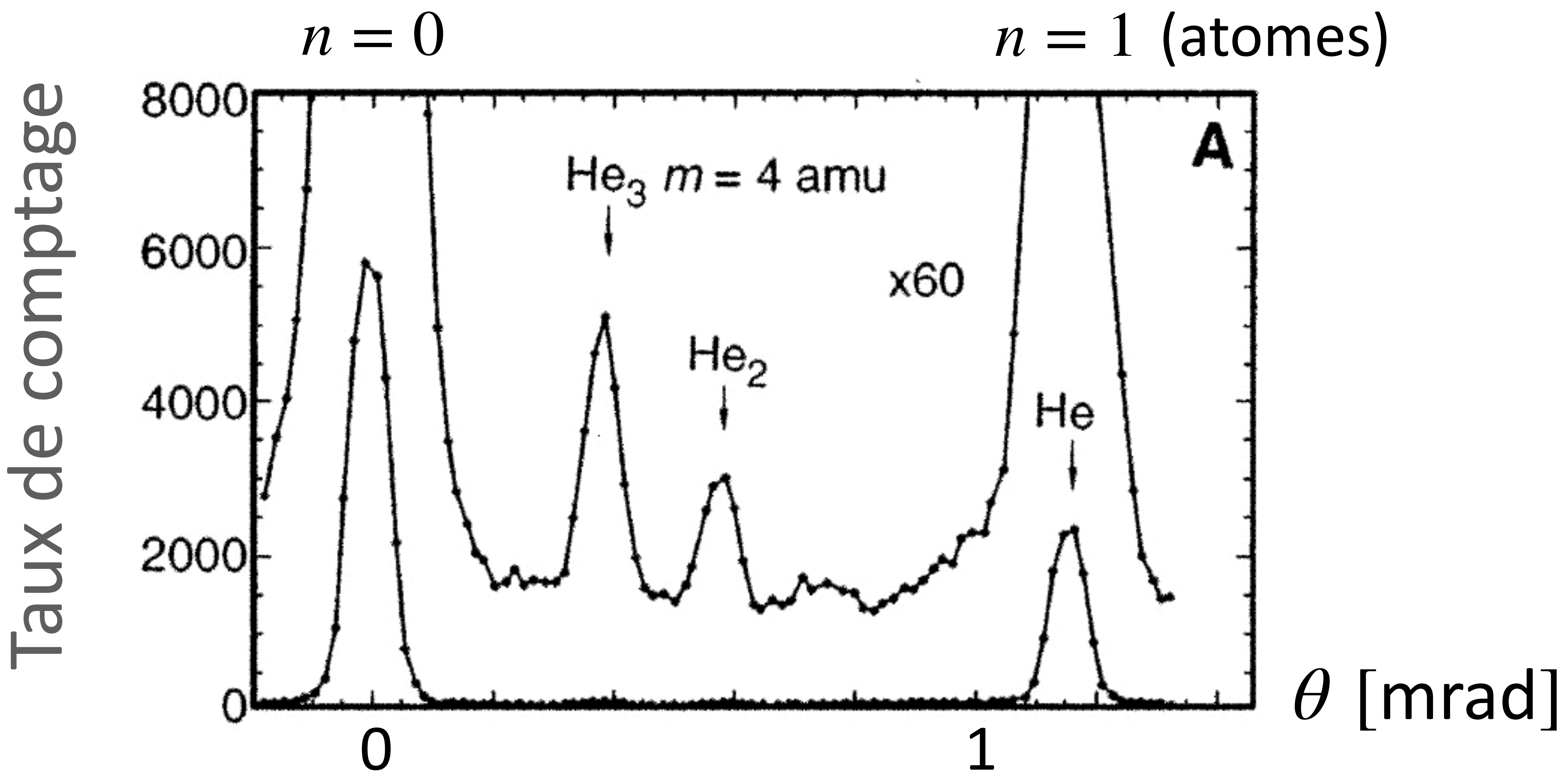
Réseau de période d=200 nm

Angle de diffraction : $\theta = n\dfrac{\lambda_{\mathrm{dB}}}{d}$

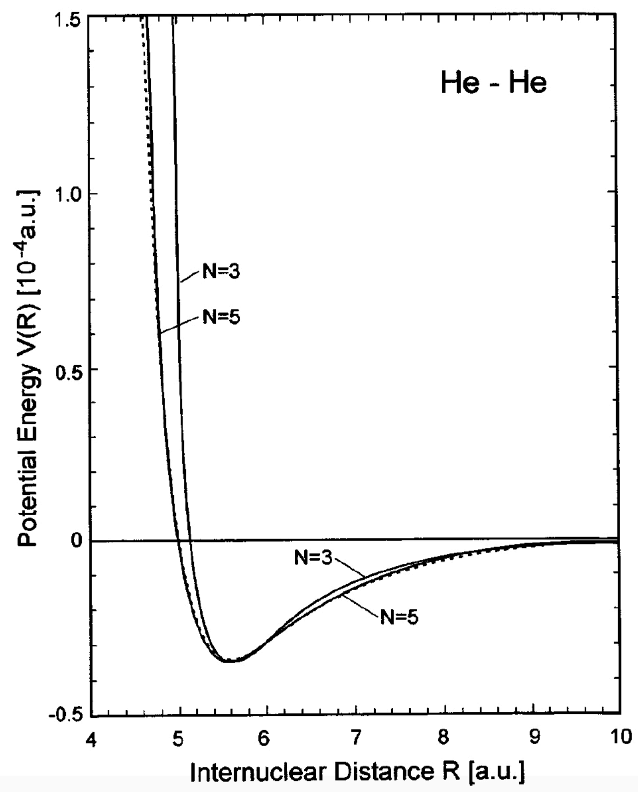
Observation du dimère et du trimère

$$\lambda_{\mathrm{dB}} = \frac{h}{mv}$$

Est-ce un trimère d'Efimov ?



Le paysage énergétique pour l'hélium

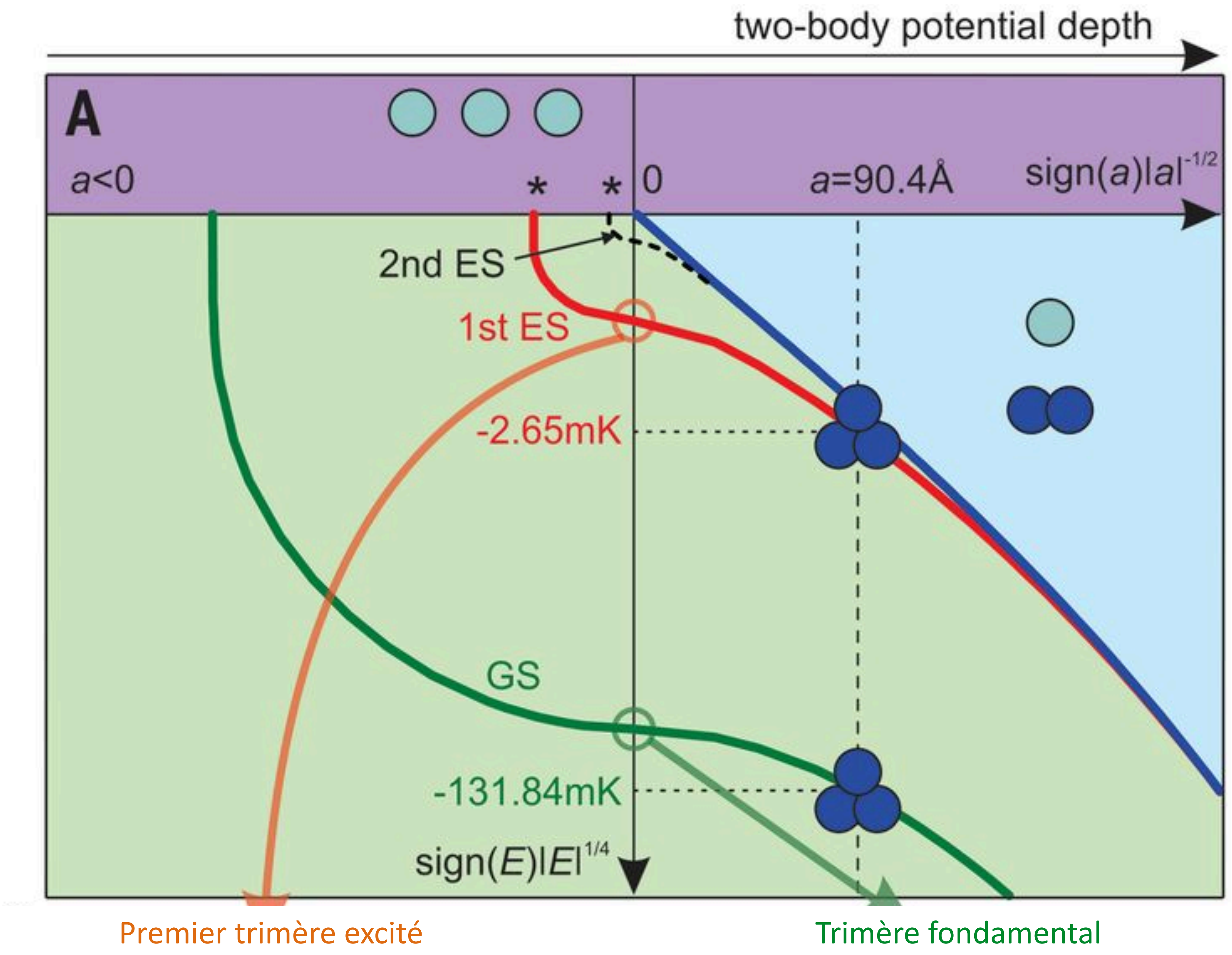


On multiplie le "vrai" potentiel par un facteur ζ

- Pour $\zeta = 1$, on prédit l'existence de deux trimères
- Résonance $|a| = +\infty$ pour $\zeta = 0.97$

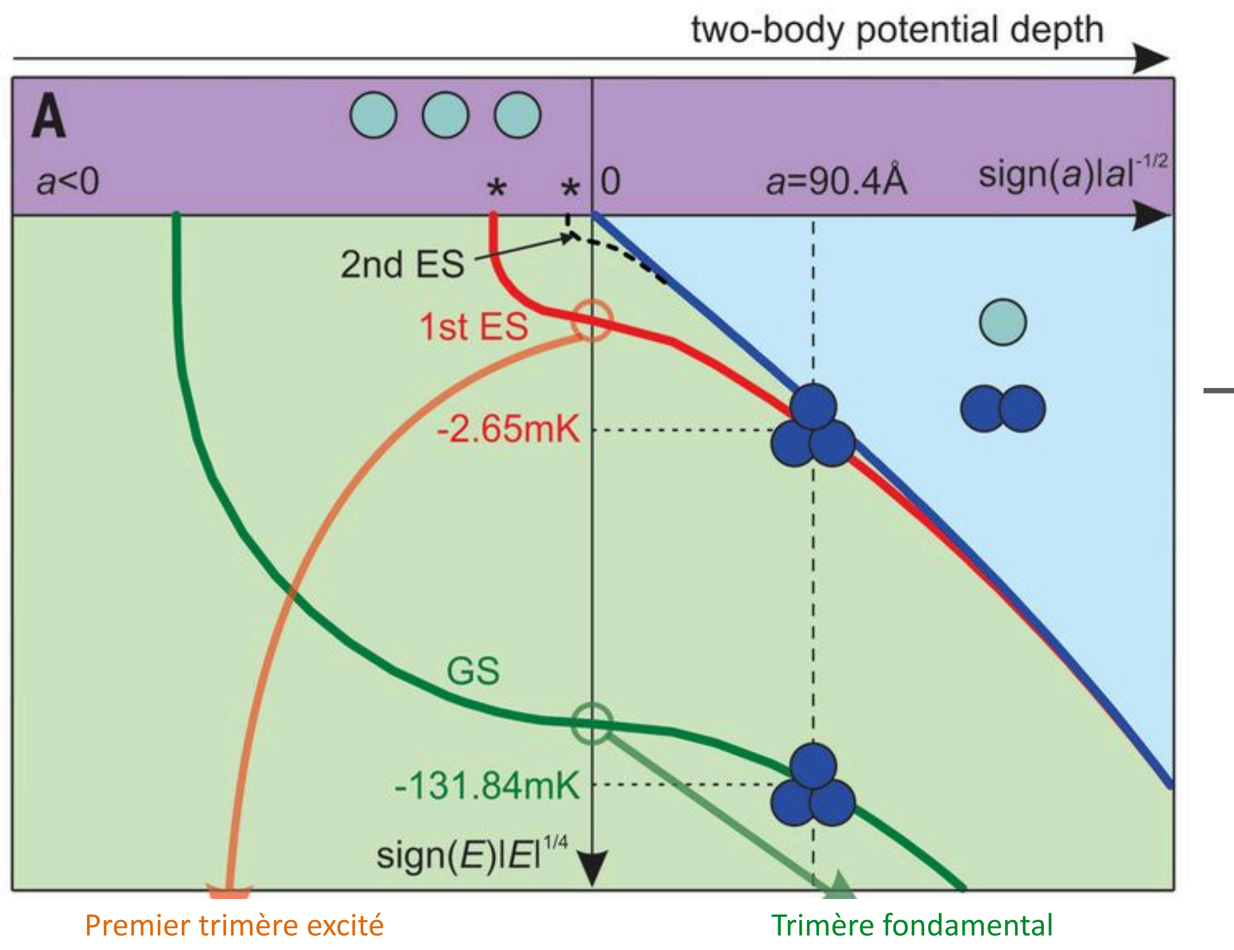
  $\frac{E_1}{E_0} = 570$ (à comparer à 515 pour une portée nulle)

- Pour $\zeta \approx 0.90$, le trimère fondamental disparaît



Kunitski et al, Science 2015

Le trimère observé est-il un trimère d'Efimov ?



Arguments pour :

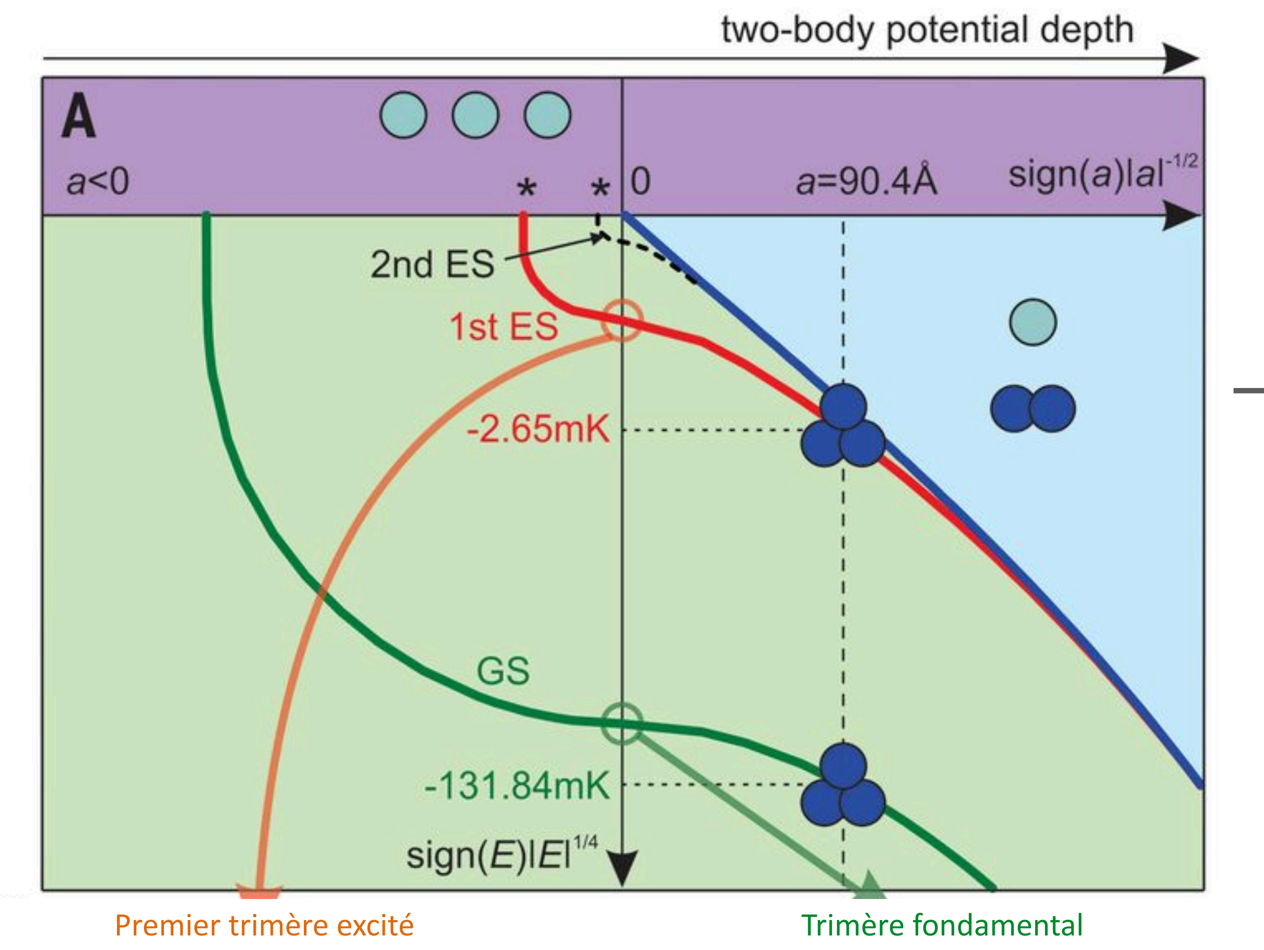
- On est bien dans la situation d'une longueur de diffusion grande devant la portée du potentiel $(a \gg b)$
- Quasiment le bon rapport d'énergie si on "amène" le potentiel à résonance

Arguments contre :

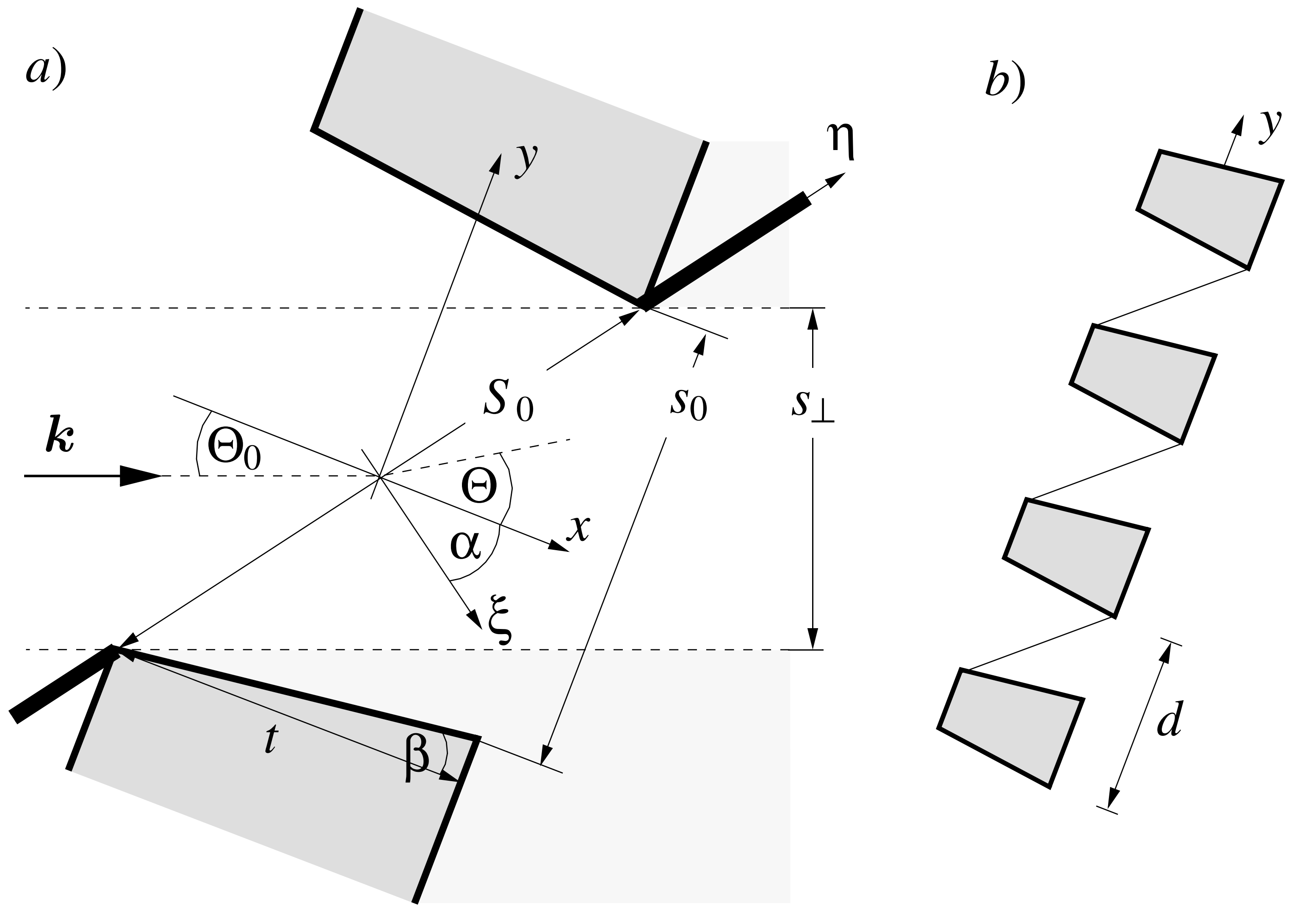
- Pour $\zeta > 1$, le trimère fondamental reste toujours sous le dimère (contrairement au cas d'une portée nulle)
- La géométrie calculée pour le trimère est proche d'un triangle équilatéral (on attend un triangle allongé pour un trimère d'Efimov)

Ces arguments "contre" ne s'appliqueraient pas au deuxième trimère

Recherche du trimère excité



Brühl et al, 2005 (Göttingen)



Expérience de diffraction avec un réseau incliné (1bar, 7 K)

Effet passoire : le trimère excité (beaucoup plus gros que le fondamental) ne doit pas passer si l'angle d'inclinaison dépasse une valeur critique

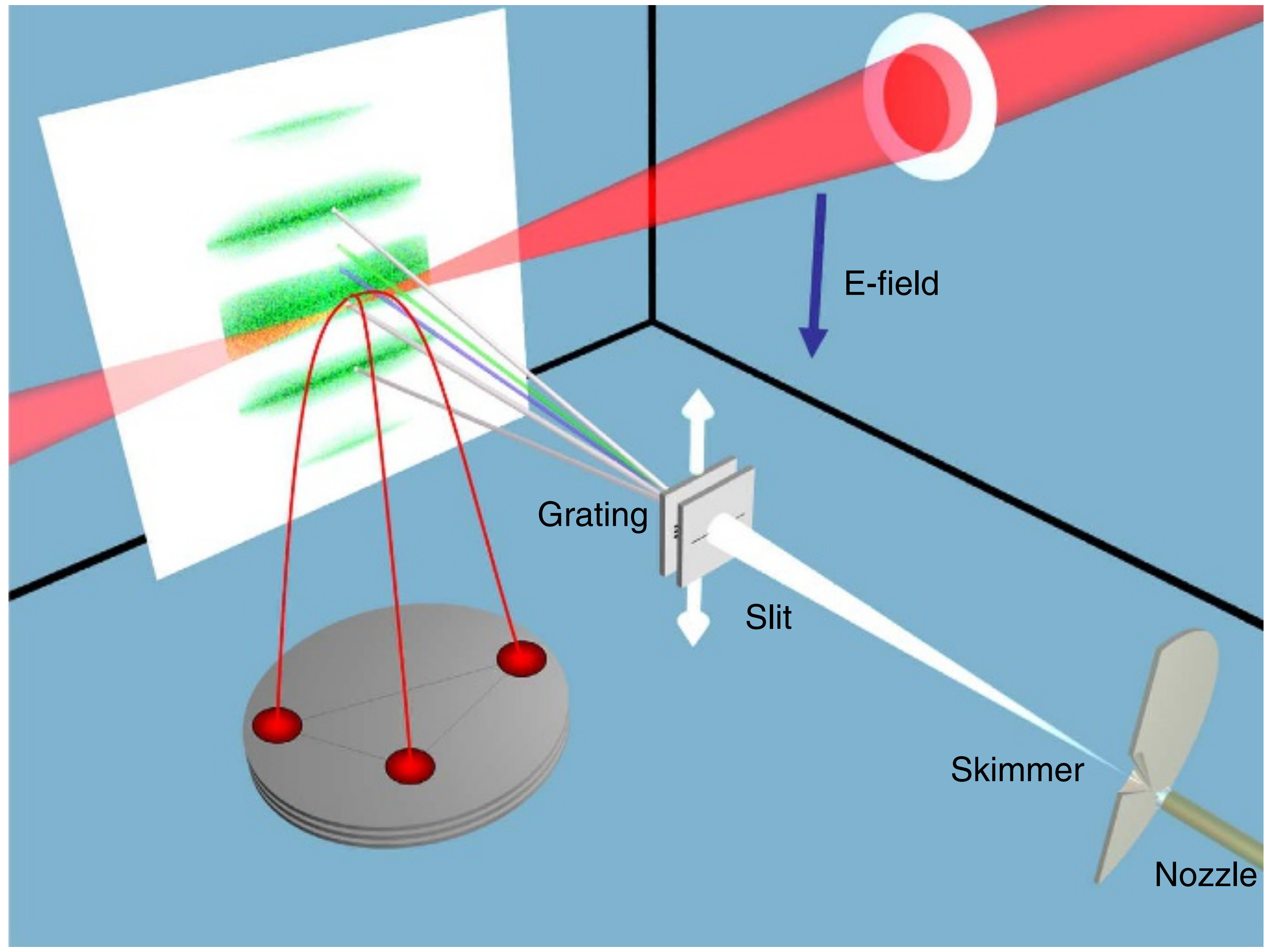
Résultat négatif…

"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 He_3 Efimov state does, in fact, not exist despite the over 40 theory publications which have appeared since 1977."

L’observation du deuxième trimère

Le trimère excité ne se forme qu’à faible pression (~ 0.3 bar) du jet supersonique

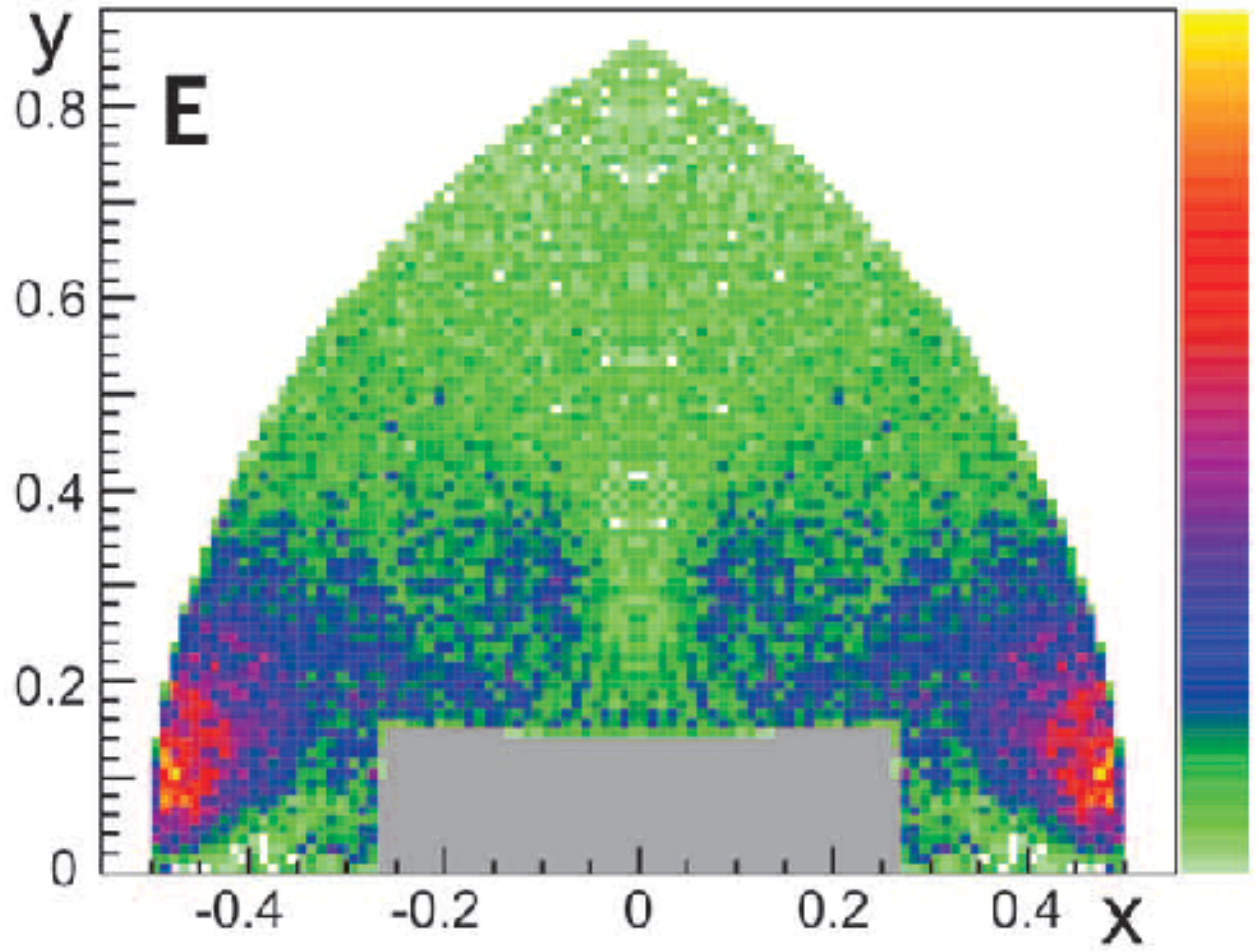
On le détecte par explosion coulombienne : ionisation des trois atomes par une impulsion laser



Trimère fondamental : atomes proches $\Rightarrow$ grande énergie libérée (5 eV)

Trimère excité : atomes lointains $\Rightarrow$ faible énergie libérée (0.57 eV)

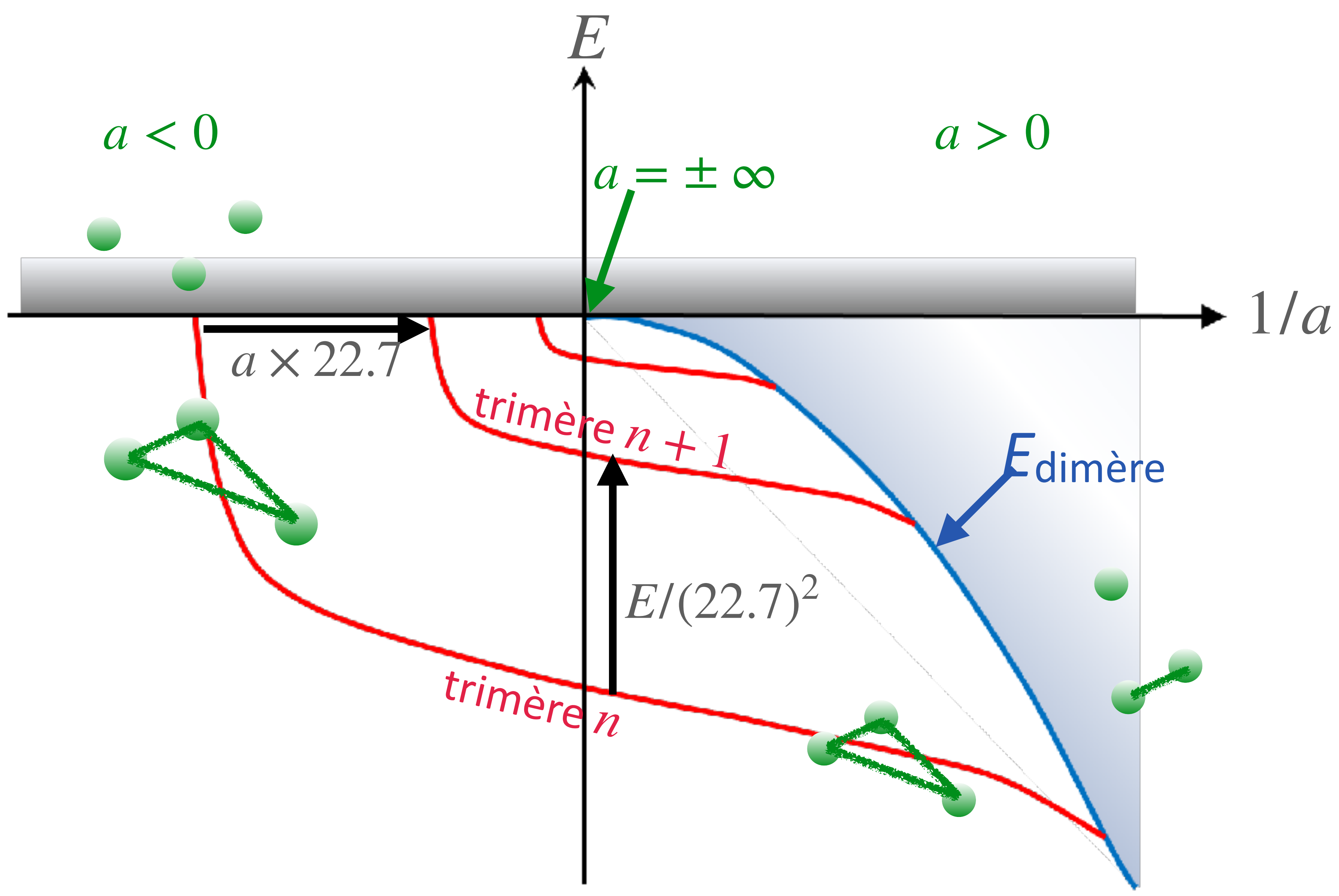
Le trimère excité a bien la structure allongée attendue ⟶



Conclusions (provisoires)

- Emergence du potentiel en $1/R^2$ pour trois corps en interaction binaire résonnante

- Schéma énergétique autour de la résonance similaire à celui trouvé pour le problème mMM, mais avec un paramètre d'échelle fixe $\lambda = 22.7$



- Premières expériences sur l'hélium (1994 → 2015)

Prochain cours : les études récentes sur les alcalins avec une surprise

Et si le paramètre à trois corps était "universel" ?