



HAL
open science

Quatrièmes coefficients d'amas et du viriel d'un gaz unitaire de fermions pour un rapport de masse quelconque

Shimpei Endo, Yvan Castin

► **To cite this version:**

Shimpei Endo, Yvan Castin. Quatrièmes coefficients d'amas et du viriel d'un gaz unitaire de fermions pour un rapport de masse quelconque. *Comptes Rendus. Physique*, 2022, 23, pp.41. 10.5802/cr-phys.108 . hal-03592961v2

HAL Id: hal-03592961

<https://hal.science/hal-03592961v2>

Submitted on 8 Sep 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Quatrièmes coefficients d'amas et du viriel d'un gaz unitaire de fermions pour un rapport de masse quelconque

Shimpei Endo^a, Yvan Castin^b

^aDépartement de physique, Université de Tohoku, Sendai, Japon

^bLaboratoire Kastler Brossel, ENS-Université PSL, CNRS, Université de la Sorbonne et Collège de France, 24 rue Lhomond, 75231 Paris, France

Résumé

Nous calculons les quatrièmes coefficients d'amas du gaz unitaire homogène de fermions de spin 1/2 en fonction du rapport de masse entre les deux états de spin \uparrow et \downarrow , sur des intervalles limités par les seuils de l'effet Efimov à trois ou à quatre corps. Nous utilisons pour cela notre conjecture de 2016 (validée dans le cas de masses égales par le calcul direct de Hou et Drut de 2020) dans une formulation numériquement très efficace à base d'accélération de convergence de la somme sur le moment cinétique, un atout précieux à grand rapport de masse. Le coefficient d'amas moyen, défini pour des potentiels chimiques égaux, n'est pas de signe constant et s'accroît rapidement près des seuils. Nous déterminons aussi les quatrièmes coefficients du viriel, souvent évoqués mais jamais calculés, et que nous trouvons être de très mauvais indicateurs des corrélations à quatre corps induites par les interactions. En passant, nous calculons analytiquement pour tout n les coefficients d'amas d'ordre $n + 1$ dans la limite où la masse du fermion seul dans son état de spin tend vers l'infini, et trouvons pour $n = 3$ qu'il y a accord avec la conjecture. Enfin, dans un potentiel harmonique, nous prédisons un comportement inattendu, non monotone, du coefficient d'amas d'ordre $3 + 1$ avec la raideur du piège, près des rapports de masse annulant ce coefficient dans le cas homogène.

Mots-clés : gaz de fermions ; limite unitaire ; invariance d'échelle ; développement du viriel ; développement en amas

1. Présentation du problème et principaux résultats

Le système. Notre objet d'étude est un gaz tridimensionnel de fermions neutres non relativistes à deux états de spin \uparrow et \downarrow dans le régime d'interaction maximale permise en phase gazeuse c'est-à-dire dans la limite dite unitaire [1, 2] : il n'y a pas d'interaction entre fermions dans le même état de spin mais une interaction binaire de portée nulle, exclusivement dans l'onde s et de longueur de diffusion infinie entre fermions d'états de spin différents \uparrow et \downarrow .¹ Nous considérons le cas général où les masses m_\uparrow et m_\downarrow d'un fermion peuvent être différentes dans les deux états de spin, ce qui fait l'originalité de notre travail. Ce système, loin d'être une vue de l'esprit, est réalisable en laboratoire avec des gaz d'atomes froids piégés. Ses principales propriétés à l'équilibre ont été déterminées expérimentalement pour des masses égales $m_\uparrow = m_\downarrow$, en particulier sa superfluidité à basse température dans le cas non polarisé (à nombres de fermions égaux dans \uparrow et \downarrow) [3, 4] et son équation d'état à température et polarisation quelconques [5, 6, 7]. Le cas $m_\uparrow \neq m_\downarrow$ reste à explorer ; une façon naturelle de l'obtenir est d'utiliser un mélange de deux espèces atomiques fermioniques complètement polarisées, comme il a été fait dans les références [8, 9, 10].

Développements en amas et du viriel. Compte tenu de la force des interactions, qui ne fournit aucun petit paramètre évident, il y a peu d'outils théoriques permettant des prédictions quantitativement fiables sur le gaz unitaire qu'on puisse comparer aux mesures. L'un d'entre eux est la simulation de Monte-Carlo diagrammatique du problème à N

1. Cette situation correspond au remplacement du potentiel d'interaction par les conditions de contact de Wigner-Bethe-Peierls sur la fonction d'onde ψ du système dans chaque configuration de spin $|\uparrow \dots \uparrow \downarrow \dots \downarrow\rangle = |\uparrow\rangle^{\otimes n_\uparrow} |\downarrow\rangle^{\otimes n_\downarrow}$: lorsque la distance r_{ij} entre la particule i dans l'état de spin \uparrow et la particule j dans l'état de spin \downarrow tend vers zéro à position fixée \mathbf{R}_{ij} de leur centre de masse, les positions \mathbf{r}_k des autres particules étant fixées à des valeurs différentes de \mathbf{R}_{ij} , il existe une constante A_{ij} (fonction de \mathbf{R}_{ij} et des \mathbf{r}_k) telle que $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{n_\uparrow+n_\downarrow}) = A_{ij}(a^{-1} - r_{ij}^{-1}) + O(r_{ij})$ où a est la longueur de diffusion, et ceci pour tout i et pour tout j . Ici, nous sommes dans la limite unitaire $1/a = 0$.

corps sur ordinateur [11, 12]. Un autre est le développement en amas ou du viriel [13], c'est-à-dire le développement de la pression P du gaz infini spatialement homogène en puissances des fugacités $z_\sigma = \exp(\beta\mu_\sigma)$ ou des densités dans l'espace des phases $\rho_\sigma \lambda_\sigma^3$ dans le régime fortement non dégénéré où elles tendent vers zéro, avec ρ_σ la densité de la composante $\sigma = \uparrow, \downarrow$ dans l'espace réel, μ_σ son potentiel chimique, $\lambda_\sigma = (2\pi\hbar^2/m_\sigma k_B T)^{1/2}$ sa longueur d'onde thermique de de Broglie à la température T et $\beta = 1/k_B T$ [14] :

$$\frac{P\lambda^3}{k_B T} = \sum_{(n_\uparrow, n_\downarrow) \in \mathbb{N}^{2^*}} b_{n_\uparrow, n_\downarrow} z_\uparrow^{n_\uparrow} z_\downarrow^{n_\downarrow} = \sum_{(n_\uparrow, n_\downarrow) \in \mathbb{N}^{2^*}} c_{n_\uparrow, n_\downarrow} (\rho_\uparrow \lambda_\uparrow^3)^{n_\uparrow} (\rho_\downarrow \lambda_\downarrow^3)^{n_\downarrow} \quad (1)$$

Pour adimensionner la pression, il a fallu introduire une longueur d'onde thermique de de Broglie de référence $\lambda = (2\pi\hbar^2/\bar{m}k_B T)^{1/2}$ dépendant d'une masse moyenne \bar{m} à préciser (voir l'équation (12)). On peut alors tenter d'extrapoler au régime non trivial $z_\sigma \approx 1$ avec des recettes heuristiques comme l'approximant de Padé [15] ou des méthodes de resommation optimisées [16] qui tiennent compte du comportement des coefficients aux grands ordres. Le développement en amas ou du viriel a notre préférence ici sur la simulation Monte-Carlo car il est plus proche du calcul analytique, les coefficients d'ordre n se déduisant de la solution d'un problème à au plus n fermions en interaction, à petit nombre de corps donc : pour obtenir $b_{n_\uparrow, n_\downarrow}$, il suffit de déterminer les fonctions de partition canoniques de tous les systèmes ayant un nombre de fermions inférieur ou égal à n_σ dans chaque état de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Simplicité de la limite unitaire. L'invariance d'échelle du gaz unitaire simplifie considérablement le calcul des coefficients d'amas pour $n > 2$ (l'ordre deux, donné en toute généralité par la formule de Beth-Uhlenbeck [17, 18, 19], ne fait pas débat). Ainsi, les coefficients d'ordre trois sont connus analytiquement, même s'il y a brisure de l'invariance d'échelle au niveau du trois corps par l'effet Efimov [20, 21], en net contraste avec le modèle d'une interaction de sphère dure de rayon a où les coefficients ne sont connus analytiquement (pour des bosons) que dans les cas limites $\lambda/a \ll 1$ [22, 23, 24, 25] ou $\gg 1$ [26, 27, 28, 29]. La méthode du régulateur harmonique [30, 31, 32, 33], consistant à piéger chaque composante du gaz dans un potentiel harmonique isotrope fictif, $U_\sigma(\mathbf{r}) = m_\sigma \omega^2 r^2/2$, dont on fait tendre vers zéro la pulsation de piégeage ω (commune aux deux états de spin) à la fin des calculs, permet de tirer parti au mieux de l'invariance d'échelle puisque le spectre à n corps dans le piège se déduit de l'ensemble discret des exposants d'échelle s_i des états propres d'énergie nulle dans l'espace libre [1, 34]. Plus précisément, on généralise le développement en amas au cas piégé, en remplaçant la pression par le grand potentiel Ω et en la ramenant à la fonction de partition $Z_1 = 1/[2 \text{sh}(\bar{\omega}/2)]^3$ d'un fermion seul,² si bien que

$$\frac{-\Omega}{k_B T Z_1} = \sum_{(n_\uparrow, n_\downarrow) \in \mathbb{N}^{2^*}} B_{n_\uparrow, n_\downarrow}(\bar{\omega}) z_\uparrow^{n_\uparrow} z_\downarrow^{n_\downarrow} \quad (2)$$

Les coefficients du cas piégé, repérés par une lettre majuscule pour éviter toute confusion, dépendent seulement du rapport sans dimension $\bar{\omega} = \hbar\omega/k_B T$ par invariance d'échelle du gaz unitaire. On les relie à ceux du cas homogène au moyen de l'approximation d'homogénéité locale, exacte dans la limite $\omega \rightarrow 0$ [32, 33], pour obtenir [21]

$$b_{n_\uparrow, n_\downarrow} = \frac{(n_\uparrow m_\uparrow + n_\downarrow m_\downarrow)^{3/2}}{\bar{m}^{3/2}} B_{n_\uparrow, n_\downarrow}(0^+) \quad (3)$$

Cette méthode conduit à une expression analytique intégrale des coefficients d'ordre trois car la fonction transcendante d'Efimov $\Lambda(s)$, dont les exposants d'échelle s_i sont les racines, est connue explicitement [35, 36, 37, 38] ce qui permet d'exprimer les coefficients sous forme d'une intégrale de contour autour de \mathbb{R}^+ au moyen du théorème des résidus puis de rabattre le contour sur l'axe imaginaire pur par analyticité sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ [20]. En revanche, pour les coefficients d'ordre quatre non triviaux,³ la fonction d'Efimov est le déterminant d'opérateurs $M_{3,1}(s)$ [39] ou $M_{2,2}(s)$ [40] dépendant paramétriquement de s , que l'on sait calculer numériquement seulement sur l'axe imaginaire pur $s = iS$ et dont les propriétés analytiques dans le plan complexe, imparfaitement connues, ne permettent pas une utilisation sûre du théorème des résidus. Aussi la référence [41] n'a-t-elle pu produire qu'une conjecture, que nous rappelons brièvement.

2. En effet, le numérateur au premier membre de l'équation (1) peut être vu, dans une boîte de quantification de volume V arbitrairement grand, comme le rapport entre l'opposé PV du grand potentiel du gaz et la fonction de partition V/λ^3 d'une particule seule fictive de masse \bar{m} .

3. Si l'un des n_σ est nul, les fermions du problème à n corps sont sans interaction et le coefficient B correspondant se réduit à celui du gaz parfait. On trouve ainsi $B_{n,0}(0^+) = B_{0,n}(0^+) = (-1)^{n+1}/n^4$ et, au moyen de la relation (3), $b_{n,0} = (m_\uparrow/\bar{m})^{3/2}(-1)^{n+1}/n^{5/2}$ et $b_{0,n} = (m_\downarrow/\bar{m})^{3/2}(-1)^{n+1}/n^{5/2}$.

Notre conjecture de 2016 sur les quatrièmes coefficients d'amas. Comme dans la référence [40], on introduit l'expression intégrale calquée sur celle des coefficients d'ordre trois (on y remplace $\Lambda(s)$ par un déterminant d'opérateur) :

$$I_{n_\uparrow, n_\downarrow}(\bar{\omega}) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{\varepsilon} (\ell + 1/2) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dS}{2\pi} \frac{\sin(\bar{\omega}S)}{\text{sh } \bar{\omega}} \frac{d}{dS} \ln \det[M_{n_\uparrow, n_\downarrow}^{(\ell, \varepsilon)}(iS)] \quad (4)$$

où la somme porte sur le moment cinétique ℓ interne (c'est-à-dire après séparation du centre de masse) des états propres à quatre corps et sur leur parité interne $\varepsilon = \pm 1$ (limitée à $\varepsilon = 1$ pour $\ell = 0$), et où l'opérateur $M_{n_\uparrow, n_\downarrow}(iS)$ est restreint au sous-espace (ℓ, ε) correspondant. Alors $I_{n_\uparrow, n_\downarrow}(\bar{\omega})$ donne exactement $B_{n_\uparrow, n_\downarrow}(\bar{\omega})$ (comme c'est le cas à l'ordre trois) lorsque les objets asymptotiques découplés (des paquets indépendants non monoatomiques de fermions fortement corrélés par les interactions, en termes desquels s'expriment les états propres très excités) sont discernables ; sinon, il manque l'effet de statistique quantique lié à l'indiscernabilité de ces objets, qui contribue au coefficient d'amas même s'ils n'interagissent pas entre eux, pour la même raison que les coefficients d'amas du gaz parfait quantique diffèrent de ceux du gaz parfait classique. Dans la configuration $(n_\uparrow, n_\downarrow) = (3, 1)$, dite désormais 3 + 1 pour abrégé, les objets asymptotiques possibles sont un triplon $\uparrow\uparrow\downarrow$ ou un paireon $\uparrow\downarrow$ de fermions fortement corrélés ; il ne peut y en avoir qu'un à la fois, ce qui exclut tout effet de statistique quantique. En revanche, dans la configuration 2 + 2, les fermions peuvent également se découpler en deux paireons $\uparrow\downarrow$ de fermions corrélés, qui sont des bosons indiscernables ; comme ces bosons n'interagissent pas, on calcule facilement leur fonction de partition [41]. La conjecture de la référence [41] s'écrit en définitive :

$$B_{3,1}(\bar{\omega}) = I_{3,1}(\bar{\omega}) \quad ; \quad B_{2,2}(\bar{\omega}) = I_{2,2}(\bar{\omega}) + \frac{1}{32} \frac{1}{\text{ch } \bar{\omega} \text{ ch}^3(\bar{\omega}/2)} \quad (5)$$

le cas 1 + 3 se déduisant du cas 3 + 1 par échange des deux états de spin donc changement du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$ en son inverse $1/\alpha$. Pour $\alpha = 1$, la conjecture (5) est en accord avec le calcul de Monte-Carlo quantique de la référence [42] jusqu'à la valeur minimale de $\bar{\omega}$ accessible, $\bar{\omega} \approx 1$; elle est en accord avec un calcul numérique récent plus performant jusqu'à des valeurs de $\bar{\omega} \ll 1$ [43, 44]. Après utilisation de la relation (3), elle est aussi en accord avec le même calcul numérique performant effectué directement dans le cas spatialement homogène d'une boîte de quantification [45]. La conjecture (5) est donc confirmée pour des masses égales.

Contenu de l'étude. L'idée du présent travail est de croire à la validité de la conjecture (5) pour un rapport de masse quelconque α et d'accéder aux quatrièmes coefficients d'amas et du viriel correspondants, en calculant numériquement le déterminant des opérateurs $M_{n_\uparrow, n_\downarrow}^{(\ell, \varepsilon)}(iS)$, puis en intégrant sur S et en sommant sur ℓ et ε dans l'expression (4). En réalité, il nous faut quand même mettre des bornes sur le rapport de masse, car la méthode de résolution du problème à quatre corps dans un piège harmonique, à la base de l'expression (5), suppose la séparabilité de l'équation de Schrödinger interne en coordonnées hypersphériques ; ceci n'est vrai que s'il n'y a pas de brisure d'invariance d'échelle par effet Efimov au niveau du trois corps, ce qui nous contraint aux intervalles

$$\text{pour } B_{3,1} : \alpha < \alpha_c^{3\text{corps}} \simeq 13,60697 \quad ; \quad \text{pour } B_{1,3} : \alpha > \frac{1}{\alpha_c^{3\text{corps}}} \simeq 0,0734917 \quad ; \quad \text{pour } B_{2,2} : \frac{1}{\alpha_c^{3\text{corps}}} < \alpha < \alpha_c^{3\text{corps}} \quad (6)$$

où $\alpha_c^{3\text{corps}}$, encore noté $\alpha_c^{2,1}$, est le seuil d'apparition de l'effet Efimov à trois corps dans le système $\uparrow\uparrow\downarrow$, qui se produit dans la voie de moment cinétique interne à trois corps $L = 1$ [35, 46]. Sous la forme (5), la conjecture suppose aussi qu'il n'y a pas d'effet Efimov à quatre corps ;⁴ un tel effet ne se produit que dans la configuration 3 + 1 ou 1 + 3 [39, 40], au rapport de masse $\alpha_c^{4\text{corps}} = \alpha_c^{3,1}$ ou à son inverse, d'où les conditions supplémentaires

$$\text{pour } B_{3,1} : \alpha < \alpha_c^{4\text{corps}} \simeq 13,3842 \quad ; \quad \text{pour } B_{1,3} : \alpha > \frac{1}{\alpha_c^{4\text{corps}}} \simeq 0,074715 \quad (7)$$

4. De plus, notre hypothèse d'une interaction strictement invariante d'échelle devient difficile à satisfaire expérimentalement si α , bien que du côté non efimovien, est trop proche du seuil d'apparition des tétramères. Pour s'affranchir de ces limitations, on pourrait compléter la condition de contact à 3 + 1 corps de l'habituel modèle d'interaction de portée nulle de la note 1 au moyen d'une longueur appelée « paramètre à 3 + 1 corps » dans la voie $(\ell, \varepsilon) = (1, +1)$ [39] où se produit l'effet Efimov à 3 + 1 corps. Dans ce cas, $B_{3,1}(0^+)$ et $b_{3,1}$ seraient des fonctions lisses de α en $\alpha = \alpha_c^{4\text{corps}}$. La référence [21] met en œuvre ce programme pour $B_{2,1}(0^+)$ c'est-à-dire dans le problème à 2 + 1 corps.

Une fois le développement en amas connu, les coefficients du viriel $c_{n_\uparrow, n_\downarrow}$ s'en déduisent aisément, sous la forme de fonctions rationnelles des coefficients d'amas $b_{n_\uparrow, n_\downarrow}$ d'ordre total $n_\uparrow + n_\downarrow$ inférieur ou égal à $n_\uparrow + n_\downarrow$:⁵

$$c_{1,0} = b_{1,0} \quad ; \quad c_{2,0} = -b_{2,0} \quad ; \quad c_{3,0} = \frac{4b_{2,0}^2}{b_{1,0}} - 2b_{3,0} \quad ; \quad c_{4,0} = -3b_{4,0} - \frac{20b_{2,0}^3}{b_{1,0}^2} + \frac{18b_{3,0}b_{2,0}}{b_{1,0}} \quad ; \quad c_{1,1} = -b_{1,1} \quad (8)$$

$$c_{2,1} = -2b_{2,1} + \frac{4b_{1,1}b_{2,0}}{b_{1,0}} + \frac{b_{1,1}^2}{b_{0,1}} \quad ; \quad c_{3,1} = -3b_{3,1} - \frac{b_{1,1}^3}{b_{0,1}^2} - \frac{6b_{1,1}^2b_{2,0}}{b_{1,0}b_{0,1}} - \frac{24b_{1,1}b_{2,0}^2}{b_{1,0}^2} + \frac{3b_{1,1}b_{2,1}}{b_{0,1}} + \frac{12b_{2,0}b_{2,1}}{b_{1,0}} + \frac{9b_{1,1}b_{3,0}}{b_{1,0}} \quad (9)$$

$$c_{2,2} = -3b_{2,2} - \frac{3b_{1,1}^3}{b_{0,1}b_{1,0}} - 9b_{1,1}^2 \left(\frac{b_{0,2}}{b_{0,1}^2} + \frac{b_{2,0}}{b_{1,0}^2} \right) + 6b_{1,1} \left(\frac{b_{1,2}}{b_{0,1}} - \frac{2b_{0,2}b_{2,0}}{b_{0,1}b_{1,0}} + \frac{b_{2,1}}{b_{1,0}} \right) + \frac{6b_{0,2}b_{2,1}}{b_{0,1}} + \frac{6b_{1,2}b_{2,0}}{b_{1,0}} \quad (10)$$

plus les équations obtenues en échangeant les deux états de spin \uparrow et \downarrow . Nos expressions des $c_{n,0}$ sont en accord avec l'équation (10.33) de la référence [13], si ce n'est qu'elles l'étendent à un rapport m_\uparrow/\bar{m} différent de un au travers du coefficient $b_{1,0} = \lambda^3/\lambda_\uparrow^3$.

Avant de présenter nos résultats, nous devons choisir la masse de référence \bar{m} . Pour ce faire, nous nous appuyons sur la forme particulière du développement en amas communément utilisée dans la littérature pour des fugacités égales, qui met en facteur de la série le nombre d'états de spin des fermions,

$$\frac{P\lambda^3}{k_B T} \stackrel{z_\sigma=z}{\equiv} 2 \sum_{n=1}^{+\infty} b_n z^n \quad \text{avec} \quad b_n = \frac{1}{2} \sum_{n_\uparrow=0}^n b_{n_\uparrow, n-n_\uparrow} \quad (11)$$

voir en particulier les références [5, 7] où b_4 est mesuré pour des masses égales.⁶ Avoir sorti un tel facteur n'a d'intérêt que si le coefficient b_1 prend la valeur très simple égale à un. De la note 3 en bas de page, nous tirons donc le choix naturel⁷

$$b_1 = 1 \quad \implies \quad \bar{m}^{3/2} = \frac{1}{2}(m_\uparrow^{3/2} + m_\downarrow^{3/2}) \quad \text{d'où} \quad \frac{1}{\lambda^3} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\lambda_\uparrow^3} + \frac{1}{\lambda_\downarrow^3} \right) \quad (12)$$

Ce choix rend également très simple le développement du viriel dans le cas de densités dans l'espace des phases égales dans les deux états de spin : on dispose alors de la belle expression $\rho_\sigma \lambda_\sigma^3 = \rho \lambda^3/2$ pour la valeur commune, où $\rho = \rho_\uparrow + \rho_\downarrow$ est la densité totale, et l'on pose comme dans l'équation (11) :

$$\frac{P\lambda^3}{k_B T} \stackrel{\rho_\sigma \lambda_\sigma^3 = \rho \lambda^3/2}{\equiv} 2 \sum_{n=1}^{+\infty} c_n (\rho \lambda^3/2)^n \quad \text{avec} \quad c_n = \frac{1}{2} \sum_{n_\uparrow=0}^n c_{n_\uparrow, n-n_\uparrow} \quad (13)$$

5. Pour les obtenir, on remplace dans le développement de la pression au troisième membre de l'équation (1) les densités par leur développement du viriel $\rho_\sigma \lambda_\sigma^3 = \sum_{(n_\uparrow, n_\downarrow) \in \mathbb{N}^{2s}} n_\sigma b_{n_\uparrow, n_\downarrow} z_\uparrow^{n_\uparrow} z_\downarrow^{n_\downarrow}$ tiré de la relation thermodynamique $\rho_\sigma = \partial P / \partial \mu_\sigma$, et l'on ajuste les $c_{n_\uparrow, n_\downarrow}$ ordre par ordre pour retrouver le développement au second membre de l'équation (1). Il est plus simple, dans un premier temps, d'écrire le développement du viriel sous la forme $P\lambda^3/k_B T = \sum_{(n_\uparrow, n_\downarrow) \in \mathbb{N}^{2s}} a_{n_\uparrow, n_\downarrow} (\rho_\uparrow \lambda_\uparrow^3)^{n_\uparrow} (\rho_\downarrow \lambda_\downarrow^3)^{n_\downarrow}$ puis, une fois les coefficients $a_{n_\uparrow, n_\downarrow}$ calculés, d'utiliser la relation $c_{n_\uparrow, n_\downarrow} = a_{n_\uparrow, n_\downarrow} / (t_\uparrow^{n_\uparrow} t_\downarrow^{n_\downarrow})$ où l'on a posé $t_\sigma = (\bar{m}/m_\sigma)^{3/2}$. On notera que $b_{1,0} t_\uparrow = b_{0,1} t_\downarrow = 1$, et que $a_{1,0} = a_{0,1} = 1$ quelle que soit la masse de référence \bar{m} en vertu de la loi du gaz parfait $P = (\rho_\uparrow + \rho_\downarrow) k_B T$. En remplaçant les $b_{n,0}$ et $b_{0,n}$ par leurs expressions données dans la note 3, il vient finalement $c_{3,1} = (-3/4 + 1/\sqrt{3})b_{1,1} - (3/\sqrt{2})b_{2,1} - 3b_{3,1} + 3b_{1,1}(b_{2,1} + b_{1,1}/\sqrt{8})t_\downarrow - b_{1,1}^3 t_\downarrow^2$, $c_{2,2} = -3[b_{2,2} + (b_{1,2} + b_{2,1})/\sqrt{8} + b_{1,1}/8] + (9\sqrt{2}/8)b_{1,1}^2(t_\uparrow + t_\downarrow) + 6b_{1,1}(b_{2,1}t_\uparrow + b_{1,2}t_\downarrow) - 3b_{1,1}^3 t_\uparrow t_\downarrow$ (les coefficients du gaz parfait $c_{4,0}$ et $c_{0,4}$ sont donnés sous forme explicite plus loin dans le texte principal). On tire facilement $b_{1,1}$ de l'équation (3) sachant que $B_{1,1}(0^+) = 1/2$. En revanche, $b_{2,1}$ et $b_{1,2}$ sont calculés numériquement à partir des expressions intégrales explicites de la référence [21].

6. Les valeurs de b_4 mesurées à l'ENS et au MIT sont en accord entre elles mais à un facteur ≈ 2 et respectivement à $\approx 2\sigma$ et à $\approx 3,5\sigma$ de la valeur désormais acceptée [45], où σ est l'incertitude expérimentale. Dans le cas de l'ENS, l'écart est dû au fait que toutes les données utilisables sur la pression sont de fugacité $z > 1$ et que leur extrapolation naïve à $z = 0$ échoue. En effet, la série (11) converge lentement et ne peut être tronquée avec une bonne approximation à $n = 4$ même pour une valeur aussi petite que $z = 0,22$, voir la version augmentée [47] de la publication [41] qui tire cette conclusion de l'équation d'état à haute précision obtenue par Monte-Carlo diagrammatique [16, 11].

7. Dans le contexte de la note 2, ce choix revient à prendre comme fonction de partition à un corps de référence \bar{Z}_1 la moyenne arithmétique de $Z_{1\uparrow}$ et $Z_{1\downarrow}$. Il se réduit bien à $\bar{m} = m$ dans le cas de masses égales $m_\uparrow = m_\downarrow = m$. Il assure que le facteur faisant passer du cas piégé au cas homogène dans l'équation (3) est une fonction uniformément bornée des masses (majorée par $2(n_\uparrow^3 + n_\downarrow^3)^{1/2}$ d'après l'inégalité de Hölder de paramètres $p = 3/2$ et $q = 3$). Ces conditions ne sont pas satisfaites si l'on prend pour \bar{m} la masse réduite de deux fermions \uparrow et \downarrow comme dans la référence [21].

Les résultats. Nous représentons les quatrièmes coefficients d'amas du gaz unitaire non triviaux (différents de ceux du gaz parfait) en fonction du rapport de masse α sur la figure 1a (les valeurs $b_{4,0} = -(m_1/\bar{m})^{3/2}/32$ et $b_{0,4} = -(m_1/\bar{m})^{3/2}/32$ tirées de la note 3 ne sont donc pas représentées mais contribuent bien entendu à b_4). L'échelle logarithmique utilisée sur l'axe des abscisses met en évidence la symétrie $\alpha \leftrightarrow 1/\alpha$. Pour un rapport de masse $\alpha = 1$, nous retrouvons la valeur $b_4 = 0,030(1)$ conjecturée par la référence [41] et confirmée numériquement par la référence [45]. Lorsqu'on s'éloigne de ce point, le comportement de b_4 est d'abord dicté par $b_{2,2}$ qui le fait changer de signe (la courbe noire et la courbe verte sont presque parallèles), avant que $b_{3,1}$ ou $b_{1,3}$ ne l'emporte aux rapports de masse élevés α ou $1/\alpha$ et ne fasse remonter b_4 à des valeurs grandes et positives. Aux seuils $\alpha_c^{4\text{corps}}$ ou $1/\alpha_c^{4\text{corps}}$ de l'effet Efimov à 3 + 1 ou 1 + 3 corps, repérés par des lignes verticales pointillées, b_4 admet une limite finie mais une dérivée infinie comme $b_{3,1}$ ou $b_{1,3}$, voir la section 2 ci-dessous et la note 4 en bas de page. En revanche, $b_{2,2}$ reste une fonction lisse, et ne présenterait une dérivée infinie qu'aux seuils de l'effet Efimov à trois corps, voir la section 3. Sur la figure 1b, on constate que les quatrièmes coefficients du viriel non triviaux (autres que $c_{4,0} = A_4(m_1/\bar{m})^{3/2}$ et $c_{0,4} = A_4(m_1/\bar{m})^{3/2}$, avec $A_4 = (18 + 15\sqrt{2} - 16\sqrt{6})/192 \simeq 1,11 \times 10^{-4}$) ont une structure similaire même s'ils sont de signe constant. On remarque aussi que le coefficient c_4 dépend peu ou très peu des corrélations à quatre corps induites par les interactions : une approximation de c_4 négligeant les contributions des coefficients d'amas $b_{3,1}$, $b_{2,2}$ et $b_{1,3}$, représentée en tireté sur la figure 1b, est partout proche ou très proche de c_4 . Même si la possibilité assez récente de préparer des gaz d'atomes froids spatialement homogènes dans une boîte de potentiel à fond plat [48, 49] rend la mesure des coefficients du viriel c_n très naturelle, puisque les densités ρ_σ y sont directement accessibles, cette dernière prédiction la rend moins motivante que la mesure des coefficients d'amas b_n dans un gaz inhomogène selon la technique spécifique au cas harmoniquement piégé de la référence [5], dans laquelle ce sont les potentiels chimiques μ_σ qui s'imposent comme variables pertinentes.⁸ À toutes fins utiles, nous donnons aussi les quatrièmes coefficients d'amas et du viriel sous forme numérique dans la table 1.

Plan du reste de l'article. Dans la suite, nous expliquons comment nous avons pu obtenir des résultats précis en un temps de calcul raisonnable, en particulier au moyen d'une accélération de convergence de la somme sur ℓ dans l'expression (4) s'appuyant sur un développement asymptotique du sommande et jouant un rôle essentiel près des seuils efimoviens. Il nous a fallu pour cela généraliser la méthode analytique de la référence [40], mise en œuvre pour 3 + 1 corps, au cas beaucoup plus difficile de 2 + 2 corps. Dans le cas à 3 + 1 corps, nous mettons aussi en évidence une dépendance non monotone inattendue de $B_{3,1}(\bar{\omega})$ en $\bar{\omega}$, avec changement de signe, pour des rapports de masse α proches de 3,5 ou 6,6. La section 2 traite du cas à 3 + 1 corps et la section 3 du cas à 2 + 2 corps dans un potentiel harmonique.

2. Coefficient d'amas à 3 + 1 fermions dans un piège

Nous expliquons dans cette section comment calculer numériquement, mais de manière efficace, la quantité $I_{3,1}(\bar{\omega})$ définie par l'équation (4), pour une valeur quelconque (nulle ou strictement positive) de la pulsation de piégeage réduite $\bar{\omega} = \hbar\omega/k_B T$. Le coefficient d'amas $B_{3,1}(\bar{\omega})$ cherché en découle directement d'après la conjecture (5).

Formulation du problème. Rappelons d'abord l'expression de l'opérateur $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ intervenant dans l'équation (4), telle qu'elle apparaît dans la référence [39]. Nous avons affaire à la somme d'une partie diagonale $\mathcal{D}_{3,1}$ et d'un opérateur à noyau $\mathcal{K}_{3,1}$ agissant sur les fonctions $f_{m_z}(x, u)$ de deux variables continues, le logarithme du rapport des normes de deux vecteurs d'onde $x \in \mathbb{R}^+$ et le cosinus de l'angle entre eux $u = \cos\theta \in [-1, 1]$, et d'une variable discrète, le nombre quantique magnétique m_z selon l'axe de quantification Oz , variant par pas de deux entre $-\ell$ et ℓ pour la parité $\varepsilon = (-1)^\ell$, et entre $-\ell + 1$ et $\ell - 1$ pour la parité $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ et $\ell \neq 0$. Il vient dans une notation mixte de Dirac et de Schrödinger :

$$\langle x, u | \ell, m_z | M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS) | f \rangle = \mathcal{D}_{3,1}(x, u) f_{m_z}(x, u) + \int_0^{+\infty} dx' \int_{-1}^1 du' \sum_{\substack{m'_z \\ (-1)^{m'_z} = \varepsilon}} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) f_{m'_z}(x', u') \quad (14)$$

8. Dans un potentiel de piégeage $U(\mathbf{r})$ commun aux deux états de spin et très allongé selon l'axe propre Oz , les gaz d'atomes froids sont bien décrits par l'approximation d'homogénéité locale, et ont donc des potentiels chimiques locaux sur l'axe bien définis $\mu_\sigma^{\text{loc}}(z) = \mu_\sigma - U(0, 0, z)$, ce qui rend très directe la mesure de l'équation d'état grand-canonique, donc des coefficients d'amas, en suivant la proposition astucieuse de la référence [50], qui est utilisable cependant seulement dans le cas où $U(\mathbf{r})$ est harmonique.

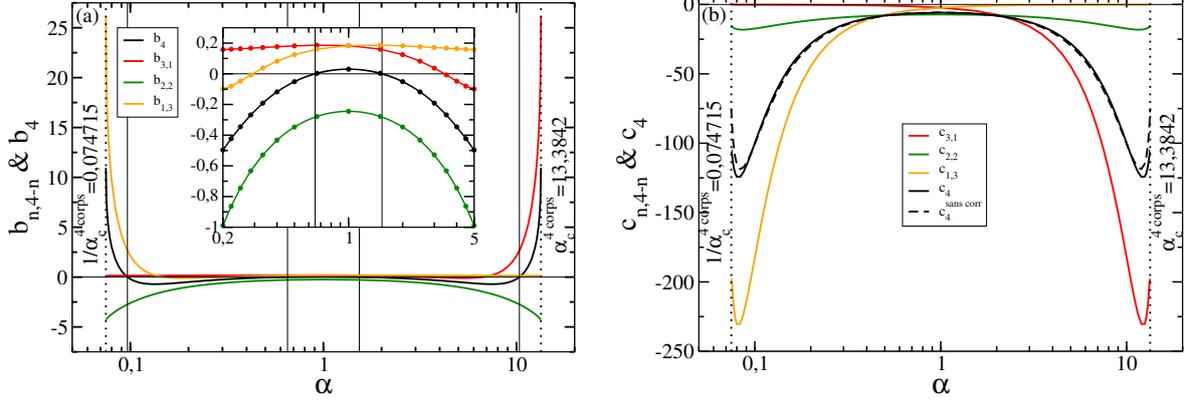


FIGURE 1: Pour un gaz unitaire spatialement homogène de fermions à deux états de spin \uparrow et \downarrow , quatrièmes coefficients d'amas (a) et du viriel (b) définis par les équations (1,11,13) et prédits par la conjecture (5) de la référence [41], en fonction du rapport de masse $\alpha = m_{\uparrow}/m_{\downarrow}$. L'interaction $\uparrow\downarrow$ de portée nulle est supposée être invariante d'échelle dans le problème à quatre corps, ce qui oblige à se limiter aux rapports de masse compris entre les valeurs critiques de l'effet Efimov à 3+1 et à 1+3 corps, indiquées par les pointillés verticaux. En (a), les traits verticaux fins repèrent les points où b_4 s'annule (toujours avec changement de signe), à savoir $\alpha \approx 1,535$ et $\alpha \approx 10,355$ du côté $\alpha > 1$, et la vignette est un agrandissement (les points calculés y sont représentés par des disques sur des lignes d'interpolation). En (b), la courbe tiretée néglige dans c_4 la composante véritablement à quatre corps issue des interactions, celle $c_4^{\text{corr}} = -3(b_{1,3} + b_{2,2} + b_{3,1})/2$ qui dépend de $b_{3,1}$, $b_{2,2}$ ou $b_{1,3}$, pour représenter $c_4^{\text{sans corr}} = c_4 - c_4^{\text{corr}}$.

La partie diagonale est indépendante du moment cinétique et de l'exposant d'échelle iS , et le noyau $\mathcal{K}_{3,1}$ s'obtient par symétrisation d'un noyau primitif $K_{3,1}$ car on a tiré parti de la symétrie d'échange fermionique du vecteur d'état pour se restreindre à $x > 0$:⁹

$$\mathcal{D}_{3,1}(x, u) = \frac{(1 + 2\alpha + \alpha u / \text{ch } x)^{1/2}}{1 + \alpha} \quad ; \quad \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) = \sum_{\eta, \eta' = \pm 1} (\eta\eta')^{\ell+1} K_{3,1}^{(\ell)}(\eta x, u, \eta m_z; \eta' x', u', \eta' m'_z) \quad (15)$$

Les éléments de matrice du noyau primitif dépendent de iS et contiennent une intégrale sur un angle de rotation ϕ autour de l'axe Ox , L_x étant l'opérateur moment cinétique selon cette direction :

$$K_{3,1}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) = \frac{(\lambda\lambda')^{3/2}}{[(1 + \lambda^2)(1 + \lambda'^2)]^{1/4}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi^2} \frac{(1 + \lambda^2)^{iS/2} e^{-im_z\theta/2} \langle l, m_z | e^{i\phi L_x / \hbar} | l, m'_z \rangle e^{im'_z\theta'/2} (1 + \lambda'^2)^{-iS/2}}{1 + \lambda^2 + \lambda'^2 + \frac{2\alpha}{1+\alpha} [\lambda u + \lambda' u' + \lambda\lambda'(uu' + vv' \cos \phi)]} \quad (16)$$

où, comme dans la référence [39], nous avons posé pour abrégier :

$$\lambda = e^x, \quad \lambda' = e^{x'}, \quad \theta = \arccos u \in [0, \pi], \quad \theta' = \arccos u' \in [0, \pi], \quad v = \sin \theta, \quad v' = \sin \theta' \quad (17)$$

Pour évaluer $I_{3,1}(\bar{\omega})$ sur ordinateur, il faut d'abord remplacer l'opérateur par une matrice de taille finie, en tronquant la variable x à x_{max} et en la discrétisant suivant la méthode d'intégration du point milieu, puis en discrétisant la variable θ (que nous préférons à la variable u car elle conduit à un intégrande lisse) suivant la méthode d'intégration de Gauss-Legendre. On calcule ensuite le déterminant de la matrice en la mettant sous la forme de Cholesky, pour tirer parti du fait que l'opérateur $M_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(iS)$ est défini positif en l'absence d'effet Efimov à 3+1 corps. Enfin, on calcule l'intégrale sur S dans l'intervalle $[0, S_{\text{max}}]$ par la méthode du point milieu (il faut connaître le logarithme du déterminant aux multiples entiers du pas d'intégration dS pour obtenir sa dérivée aux multiples demi-entiers) et on tient compte de la contribution de l'intervalle omis $[S_{\text{max}}, +\infty[$ au moyen d'une approximation exponentielle $A \exp(-BS)$ de la dérivée logarithmique du déterminant, justifiée par la référence [40] et dont les coefficients A et B sont estimés par ajustement sur un voisinage de S_{max} , ici l'intervalle $[S_{\text{max}} - 5/2, S_{\text{max}}]$.

9. En notation de Dirac, $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} = (1 + U)K_{3,1}^{(\ell)}(1 + U)$ avec l'involution hermitienne $U = -P_x e^{i\pi L_x / \hbar}$, l'opérateur de parité P_x changeant $|x\rangle$ en $|-x\rangle$ et l'opérateur de rotation d'axe Ox d'angle π tel que $\exp(i\pi L_x / \hbar) |l, m_z\rangle = (-1)^{\ell} |l, -m_z\rangle$ [40].

α	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5	5,5
$b_{3,1}$	0,1837	0,1604	0,1247	0,08238	0,03726	-0,007203	-0,04762	-0,07982	-0,09941	-0,1016
$b_{1,3}$	0,18374	0,18672	0,18199	0,17641	0,17133	0,16696	0,16325	0,16010	0,15740	0,15508
$b_{2,2}$	-0,2445	-0,2781	-0,3469	-0,4321	-0,5283	-0,6328	-0,7448	-0,8637	-0,9890	-1,1209
b_4	0,03026	0,003256	-0,05135	-0,1179	-0,19110	-0,2678	-0,3458	-0,4229	-0,4968	-0,5649
$c_{3,1}$	-2,2558	-4,4056	-7,3318	-11,100	-15,773	-21,407	-28,050	-35,737	-44,495	-54,332
$c_{1,3}$	-2,2558	-1,2265	-0,8296	-0,6292	-0,5114	-0,4350	-0,3820	-0,3433	-0,3139	-0,2910
$c_{2,2}$	-7,1913	-7,3897	-7,7991	-8,3081	-8,8748	-9,4800	-10,111	-10,758	-11,415	-12,078
c_4	-5,8513	-6,5108	-7,9801	-10,018	-12,580	-15,661	-19,271	-23,419	-28,112	-33,350
α	6	6,5	7	7,5	8	8,5	9	9,5	10	10,5
$b_{3,1}$	-0,07925	-0,02715	0,06412	0,2022	0,4010	0,6724	1,0339	1,5059	2,1195	2,9095
$b_{1,3}$	0,15305	0,15128	0,14972	0,14833	0,14708	0,14597	0,14496	0,14404	0,14321	0,14244
$b_{2,2}$	-1,2590	-1,4034	-1,5542	-1,7113	-1,8749	-2,0452	-2,2223	-2,4077	-2,6003	-2,8015
b_4	-0,6239	-0,6709	-0,7014	-0,7116	-0,6947	-0,6447	-0,5530	-0,4101	-0,2001	0,09397
$c_{3,1}$	-65,248	-77,214	-90,190	-104,10	-118,85	-134,28	-150,20	-166,33	-182,32	-197,64
$c_{1,3}$	-0,2725	-0,2574	-0,2449	-0,2343	-0,2252	-0,2174	-0,2105	-0,2045	-0,1991	-0,1944
$c_{2,2}$	-12,740	-13,397	-14,044	-14,676	-15,288	-15,873	-16,423	-16,926	-17,374	-17,747
c_4	-39,130	-45,434	-52,239	-59,505	-67,180	-75,184	-83,417	-91,733	-99,948	-107,79
α	11	11,5	12	12,5	12,75	13	13,1	13,2	13,3	13,3842
$b_{3,1}$	3,9362	5,2839	7,0993	9,7004	11,522	14,042	15,402	17,152	19,728	26,101
$b_{1,3}$	0,14174	0,14109	0,14049	0,13993	0,13967	0,13941	0,13932	0,13922	0,13912	0,13904
$b_{2,2}$	-3,0120	-3,2360	-3,4725	-3,7278	-3,8654	-4,0133	-4,0767	-4,1430	-4,2140	-4,2784
b_4	0,5017	1,0632	1,8524	3,0250	3,8667	5,0528	5,7008	6,5428	7,7951	10,950
$c_{3,1}$	-211,58	-223,04	-230,30	-230,37	-225,99	-217,03	-211,71	-205,24	-198,00	-200,77
$c_{1,3}$	-0,1901	-0,1863	-0,1828	-0,1796	-0,1781	-0,1766	-0,1761	-0,1756	-0,1750	-0,1746
$c_{2,2}$	-18,025	-18,163	-18,114	-17,767	-17,414	-16,864	-16,561	-16,189	-15,720	-15,213
c_4	-114,90	-120,69	-124,30	-124,16	-121,79	-117,04	-114,22	-110,80	-106,95	-108,08

TABLE 1: Valeurs numériques des quatrièmes coefficients d'amas $b_{n,4-n}$ et du viriel $c_{n,4-n}$ du gaz unitaire spatialement homogène de fermions à deux états de spin \uparrow et \downarrow , tabulées en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$, pour le choix (12) de la masse de référence \bar{m} . Comme on passe de $b_{n,4-n}$ à $b_{4-n,n}$ et de $c_{n,4-n}$ à $c_{4-n,n}$ en changeant α en $1/\alpha$, nous nous sommes limités à $\alpha \geq 1$. Nous ne donnons pas les coefficients associés aux entiers $n = 0$ et $n = 4$ car ils sont identiques à ceux du gaz parfait, mais nous donnons les coefficients moyens b_4 et c_4 utiles dans le cas de fugacités ou de densités dans l'espace des phases égales dans les deux états de spin, voir les équations (11) et (13). Les incertitudes sur $b_{3,1}$, $b_{1,3}$ et $b_{2,2}$, non précisées, sont inférieures au pour cent. Les valeurs données sont représentées graphiquement sur la figure 1.

Approximant asymptotique et applications. Il reste à tenir compte de la troncature sur le moment cinétique ℓ à un certain ℓ_{\max} , inévitable dans un calcul numérique. En pratique, il n'est pas raisonnable d'aller au-delà de $\ell_{\max} = 15$, les valeurs élevées de ℓ conduisant à une complexité $O(\ell^3)$ et étant très coûteuses en temps. Malheureusement, cette coupure ne suffit pas pour de grands rapports de masse $\alpha \gg 1$ si l'on vise une précision sur $B_{3,1}(0^+)$ meilleure que le pour cent. L'idée salvatrice est de déterminer un approximant asymptotique $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ de la contribution $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ de moment cinétique ℓ et de parité ε à la quantité cherchée $I_{3,1}(\bar{\omega})$. Alors, au lieu de négliger complètement les termes $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ pour $\ell > \ell_{\max}$, on les remplace par $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ comme suit,

$$I_{3,1}(\bar{\omega}) \simeq \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \sum_{\varepsilon} I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega}) + \sum_{\ell=\ell_{\max}+1}^{+\infty} \sum_{\varepsilon} J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega}) = \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \sum_{\varepsilon} [I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega}) - J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})] + \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{\varepsilon} J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega}) \quad (18)$$

ce qui constitue une méthode d'accélération de convergence de la série, l'erreur commise tendant vers zéro plus rapidement avec ℓ_{\max} . On obtient un approximant asymptotique exact à l'ordre sous-dominant en ℓ en généralisant à $\bar{\omega} \neq 0$ l'application de la méthode de la référence [40], qui prend le noyau $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ comme petit paramètre formel et développe le logarithme du déterminant de $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ au second ordre :

$$\ln \det M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)} = \ln \det^\varepsilon [\mathcal{D}_{3,1} + \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}] = \ln \det^\varepsilon [\mathcal{D}_{3,1}] + \ln \det^\varepsilon [\mathbb{I} + \mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}] = \text{cte} + \text{Tr}^\varepsilon \left[\mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} - \frac{1}{2} \mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} \mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} + \dots \right] \quad (19)$$

où le symbole ε en exposant de la trace ou du déterminant signifie qu'on se limite au sous-espace des valeurs de m_z compatibles avec la parité ε . Le calcul, un peu long, est effectué dans l'Annexe A, et l'expression correspondante

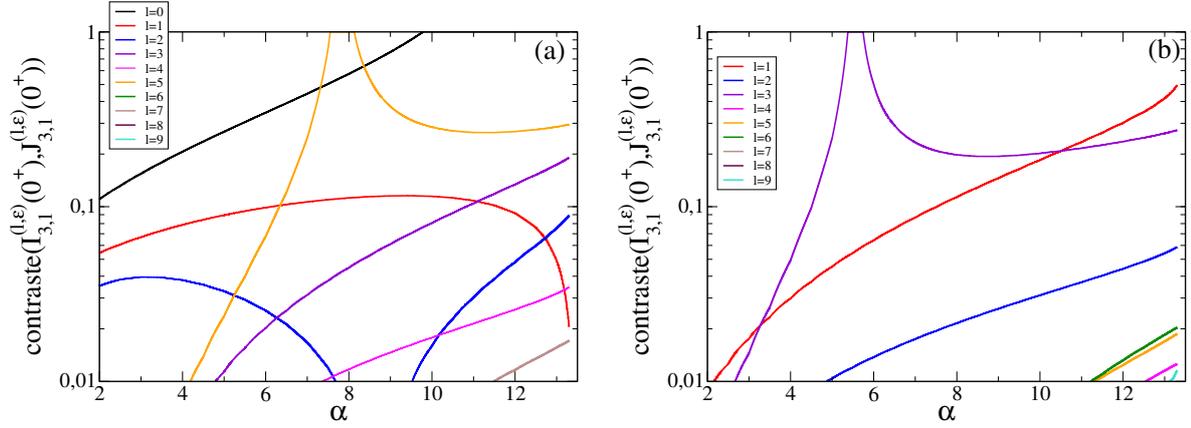


FIGURE 2: Contraste entre la contribution $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ de la voie de moment cinétique ℓ et de parité ε à $I_{3,1}$ et son approximant asymptotique $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ donné par l'équation (47), en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$ et de ℓ , dans la limite $\bar{\omega} = 0^+$. On entend ici par contraste entre deux quantités réelles a et b le rapport $|a - b|/(|a| + |b|)$. (a) Cas $\varepsilon = (-1)^\ell$. (b) Cas $\varepsilon = (-1)^{(\ell+1)}$ (ce qui impose $\ell > 0$). Les paramètres de troncature et de discrétisation numériques sont ceux de la figure 3. Le contraste sature à un (comme ceci se produit pour $\ell = 0$ et $\ell = 5$ sur (a), pour $\ell = 3$ sur (b)) lorsque les deux quantités comparées sont de signes opposés.

de $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ est donnée dans l'équation (47) sous forme d'intégrales multiples. Pour ce choix déjà très élaboré, les premières valeurs de l'approximant ($0 \leq \ell \leq \ell_{\max}$) restent faciles à calculer numériquement avec la même troncature et discrétisation que pour le déterminant complet, mais il serait pénible d'aller au-delà, ce qu'exige pourtant la seconde somme au deuxième membre de l'équation (18); heureusement, la série infinie au troisième membre de l'équation (18) admet une expression intégrale simple, voir l'équation (59), que l'on peut même exprimer analytiquement pour $\bar{\omega} = 0^+$ en termes de fonctions connues comme la fonction dilogarithme, voir l'équation (60). Le lecteur pourra juger de la qualité de notre approximant asymptotique sur la figure 2, où il est comparé au résultat numérique. La figure montre, en fonction du rapport de masse α , dans quelles voies de moment cinétique ℓ l'approximant dévie de plus d'un pour cent de la valeur exacte (c'est la précision cible sur le coefficient d'amas); ces voies doivent absolument être incluses dans la somme numérique de 0 à ℓ_{\max} .

Une retombée intéressante de notre méthode d'accélération de convergence est l'obtention d'un équivalent asymptotique de la contribution de moment cinétique ℓ et de parité ε au coefficient d'amas $B_{3,1}(0^+)$; il suffit de garder la contribution linéaire en $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}$ dans l'équation (19) et de déterminer son comportement dominant à grand ℓ avec le théorème intégral de Cauchy, comme il est fait dans l'Annexe A. On trouve :

$$I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+) \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{1}{2} \left\{ \frac{(1+\alpha)^2}{\sqrt{\alpha(1+3\alpha)}} \operatorname{Im} \left[\left(\frac{\ell}{6\pi C_0} \right)^{1/2} \frac{z_0}{1+z_0} z_0^\ell \right] + \varepsilon \frac{(1+\alpha)^2}{\alpha^{3/2}} \operatorname{Re} \left[\left(\frac{\ell}{2\pi C_1} \right)^{1/2} \frac{(1-z_1)}{\sqrt{1-\cos \xi_1}} z_1^\ell \right] \right\} \quad (20)$$

où

$$C_0 = \frac{(1-\cos \xi_0)(5/4 + \cos \xi_0)}{(1/2 + \cos \xi_0)(z_0 - 1/z_0)} \quad \text{et} \quad C_1 = 4(z_1 - 1/z_1)(\cos \xi_1 - 1/2) \left[(1 + \alpha^{-1}) \cos \xi_1 + \frac{1 + 3\alpha^{-1}}{4} \right] \quad (21)$$

avec le raccourci de notation $\cos \xi_n \equiv (z_n + 1/z_n)/2$, $n = 0$ ou 1 , le nombre complexe z_0 donné par l'équation (66) et le nombre complexe $z_1 = -z_0^*$. C'est la généralisation à $3 + 1$ fermions d'un résultat obtenu pour trois bosons dans la référence [20], voir l'équation (42) de cette référence. Ainsi, à un facteur en loi de puissance près, $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ tend exponentiellement vers zéro avec ℓ , avec des oscillations irrégulières dues au fait que l'argument de z_0 n'est en général pas commensurable à π .

Régime de Born-Oppenheimer. Dans la limite $\alpha \rightarrow 0$, on remarque que z_0 tend vers zéro dans l'équation (66), $z_0 \sim i\sqrt{\alpha/3}$, donc on s'attend à ce que la suppression exponentielle du sommande dans (4) devienne très rapide pour $3 + 1$ fermions. Cette attente est confirmée numériquement et, pour $\alpha = 0$, seule la voie $\ell = 0$ contribue. Dans ce cas, l'unique fermion \downarrow est infiniment massif et se comporte pour les fermions \uparrow comme un diffuseur ponctuel fixe,

de longueur de diffusion infinie dans l'onde s et placé au centre du piège. L'approximation de Born-Oppenheimer devient exacte et donne l'équation de Schrödinger indépendante du temps sur la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}_\downarrow)$ de la particule lourde :¹⁰

$$E_{\text{BO}}\Psi(\mathbf{r}_\downarrow) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_\downarrow}\Delta_{\mathbf{r}_\downarrow} + \frac{1}{2}m_\downarrow\omega^2 r_\downarrow^2 + W(\mathbf{0}) \right] \Psi(\mathbf{r}_\downarrow) \quad (m_\downarrow \rightarrow +\infty) \quad (22)$$

Dans le problème piégé à $n_\uparrow + 1$ fermions, $W(\mathbf{0})$ est l'énergie d'un état propre de n_\uparrow fermions \uparrow sans interaction en présence du centre diffuseur. Un fermion \uparrow de nombres quantiques orbitaux (n, ℓ, m_z) ne voit le centre diffuseur que si $\ell = 0$, auquel cas son spectre est abaissé de $\hbar\omega$, donc admet les niveaux d'énergie

$$\varepsilon_{n,\ell,m_z} = \begin{cases} (2n + \ell + 3/2)\hbar\omega & \text{si } \ell > 0 \\ (2n + 1/2)\hbar\omega & \text{si } \ell = 0 \end{cases} \quad (n \in \mathbb{N}, -\ell \leq m_z \leq \ell) \quad (23)$$

Comme l'énergie propre de Born-Oppenheimer E_{BO} est somme de $W(\mathbf{0})$ et d'un niveau d'énergie vibrationnel d'une particule \downarrow dans le piège, nous concluons que

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} Z_{n_\uparrow,1} = Z_1 Z_{n_\uparrow}^{\text{diff}} \quad (24)$$

où $Z_{n_\uparrow}^{\text{diff}}$ est la fonction de partition canonique d'un gaz parfait de n_\uparrow fermions de spectre (23), en présence donc du diffuseur fixe, Z_1 est comme dans l'équation (2) la fonction de partition d'un fermion seul et $Z_{n_\uparrow,1}$ est celle du gaz unitaire de $n_\uparrow + 1$ fermions piégés. Il est commode de calculer son écart $\Delta Z_{n_\uparrow,1}$ à celle du gaz parfait de $n_\uparrow + 1$ fermions piégés, puisque (23) diffère du spectre ordinaire seulement dans la voie de moment cinétique nul. En tenant compte de la statistique de Fermi via le principe d'exclusion de Pauli, et des équations (80) à (83) de la référence [41] qui relie les coefficients d'amas du système piégé aux fonctions de partition à petit nombre de corps, nous trouvons que

$$B_{1,1}(\bar{\omega}) = Z_1^{-1} \Delta Z_{1,1} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{2 \text{ch}(\bar{\omega}/2)} \quad ; \quad B_{2,1}(\bar{\omega}) = Z_1^{-1} \Delta Z_{2,1} - Z_1 B_{1,1} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0^+} -\frac{1}{8 \text{ch}^2(\bar{\omega}/2) \text{ch} \bar{\omega}} \quad (25)$$

$$B_{3,1}(\bar{\omega}) = Z_1^{-1} \Delta Z_{3,1} - Z_{2,0} B_{1,1} - Z_1 B_{2,1} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{16 \text{ch}^3(\bar{\omega}/2) (\text{ch} \bar{\omega}) (2 \text{ch} \bar{\omega} - 1)} \quad (26)$$

La valeur (26) de la limite est en accord parfait avec notre calcul numérique de l'expression (4), non seulement pour $\bar{\omega} = 0^+$, où $B_{3,1}(0^+) \rightarrow 1/16 = 0,0625$, comme on le voit sur la figure 3a, mais, comme nous l'avons vérifié, pour tout $\bar{\omega}$, ce qui constitue un test supplémentaire de la conjecture (5) dans le cas à 3 + 1 corps.¹¹ Signalons en passant qu'il est possible d'aller aux ordres suivants en utilisant la version grand-canonique de l'équation (24),

$$\Xi_{z_\downarrow \rightarrow 0} \underset{\text{puis } \alpha \rightarrow 0^+}{=} \Xi_\uparrow + z_\downarrow Z_1 \Xi_\uparrow^{\text{diff}} + O(z_\downarrow^2) \quad (27)$$

où Ξ_\uparrow ($\Xi_\uparrow^{\text{diff}}$) est la grande fonction de partition du gaz parfait de fermions \uparrow de fugacité z_\uparrow en absence (en présence) du centre diffuseur et Ξ est celle du gaz unitaire à deux composantes. En développant le grand potentiel $\Omega = -k_B T \ln \Xi$ comme dans l'équation (2), nous obtenons¹²

$$\sum_{n_\uparrow=0}^{+\infty} z_\uparrow^{n_\uparrow} \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} B_{n_\uparrow,1}(\bar{\omega}) = \frac{\Xi_\uparrow^{\text{diff}}}{\Xi_\uparrow} = \prod_{n=0}^{+\infty} \frac{1 + z_\uparrow e^{-(2n+1/2)\bar{\omega}}}{1 + z_\uparrow e^{-(2n+3/2)\bar{\omega}}} = \exp \left[\sum_{s=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{s+1} z_\uparrow^s}{2s \text{ch}(s\bar{\omega}/2)} \right] \quad (28)$$

10. Les particules sont à température fixée T donc, dans la limite $m_\downarrow \rightarrow +\infty$, le fermion \downarrow occupe une région autour du centre du piège de rayon $R = O((k_B T / m_\downarrow \omega^2)^{1/2})$. En revanche, le potentiel de Born-Oppenheimer $W(\mathbf{r}_\downarrow)$ a une échelle d'énergie $k_B T$ et varie avec une échelle de longueur λ_\uparrow , la longueur d'onde thermique de de Broglie des fermions légers, si $k_B T > \hbar\omega$, et est de l'ordre de $\hbar\omega$ et varie avec une échelle de longueur $(\hbar/m_\uparrow \omega)^{1/2}$, la taille de l'état vibrationnel fondamental d'un fermion léger, sinon. La variation de $W(\mathbf{r}_\downarrow)$ devient négligeable dans tous les cas et on peut le remplacer par $W(\mathbf{0})$. Pour la même raison, le potentiel dit scalaire ou topologique, qui s'ajoute au potentiel W dans l'approximation adiabatique complète [51], peut être omis.

11. Dans le cas à 2 + 1 corps, en partant de l'expression analytique intégrale de $B_{2,1}(\bar{\omega})$ de la référence [21] en termes de la fonction transcendante d'Efimov $\Lambda_{2,1}^{(\ell)}$ sur l'axe imaginaire pur, et en montrant dans la limite $\alpha \rightarrow 0^+$ que $\Lambda_{2,1}^{(\ell)}(iS)$ tend vers 1 pour $\ell > 0$ et tend vers $1 + 1/\text{ch}(\pi S/2)$ pour $\ell = 0$ (par exemple au moyen de l'équation (46) de la référence [38]), on retrouve le second résultat dans l'équation (25).

12. On a fait apparaître une somme sur un entier s dans le quatrième membre en prenant le logarithme du produit infini dans le troisième membre, en développant autour de 1 la fonction \ln en série entière d'indice s puis en sommant sur n les séries géométriques qui en résultent.

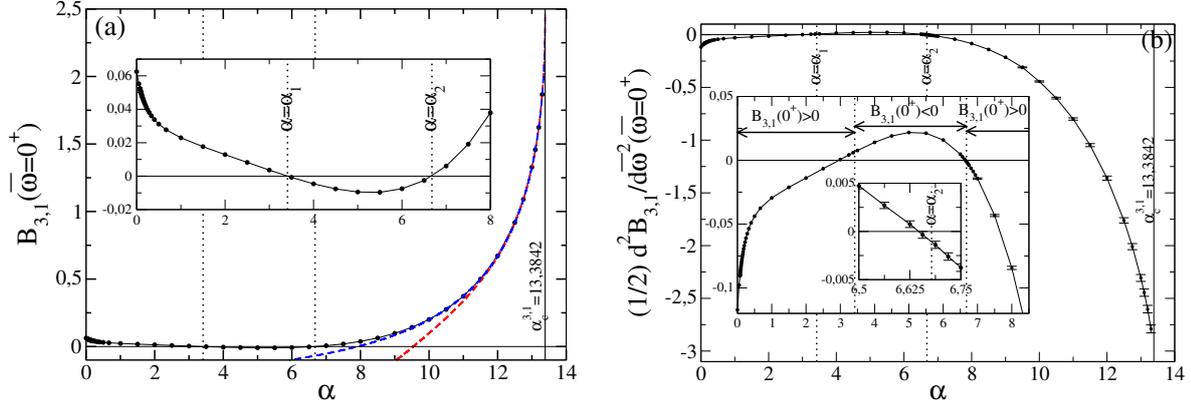


FIGURE 3: (a) Quatrième coefficient d’amas $B_{3,1}(0^+)$ du gaz unitaire de fermions dans un piège harmonique de raideur infinitésimale, en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$. Disques (reliés par un trait fin) : notre calcul numérique de l’expression (4) pour $(n_\uparrow, n_\downarrow) = (3, 1)$ et application de la conjecture (5), avec les paramètres de troncature $x_{\max} = 5$, $S_{\max} = 25$, $\ell_{\max} = 15$ et de discrétisation $dx = 1/10$, $dS = 1/8$, $n_\theta = 37$ (c’est le nombre de valeurs de θ dans la méthode d’intégration de Gauss-Legendre); pour $\alpha > 10$ et $0 \leq \ell \leq 5$, nous prenons plutôt $x_{\max} = 20$ et $n_\theta = 25$ pour maintenir l’erreur inférieure au pour cent. On utilise la méthode d’accélération de convergence (18) et on extrapole à $S_{\max} = +\infty$ comme expliqué dans le texte. Tireté bleu : ajustement cubique en la variable $X = (\alpha_c^{4\text{ corps}} - \alpha)^{1/2}$ sur l’intervalle $10 \leq \alpha \leq 13,3$, à savoir $B_{3,1}(0^+) = 2,4401 - 2,1627X + 0,64137X^2 - 0,069596X^3$, où $\alpha_c^{4\text{ corps}} \approx 13,3842$ est le seuil efimovien à $3 + 1$ corps (trait plein vertical). Tireté rouge : idem sur l’intervalle $12,5 \leq \alpha \leq 13,3$, à savoir $B_{3,1}(0^+) = 2,4637 - 2,2834X + 0,82318X^2 - 0,15269X^3$. La vignette est un agrandissement montrant mieux les annulations avec changement de signe de $B_{3,1}(0^+)$ en $\alpha_1 \approx 3,412$ et $\alpha_2 \approx 6,678$ (pointillés noirs verticaux). (b) Idem pour la demi-dérivée seconde $(1/2)B'_{3,1}(0^+)$ du coefficient d’amas par rapport à la pulsation de piégeage réduite $\bar{\omega} = \hbar\omega/k_B T$, aux différences près que (i) nous ne donnons pas d’ajustement en la variable X , (ii) nous mettons des barres d’erreur car l’incertitude relative peut maintenant dépasser le pour cent, (iii) nous incluons un agrandissement dans l’agrandissement pour bien faire voir que le second point d’annulation (avec changement de signe) de $(1/2)B'_{3,1}(0^+)$ est très proche mais distinct de celui de $B_{3,1}(0^+)$ (toujours indiqué par un pointillé vertical).

Dans le cas particulier $\bar{\omega} = 0^+$, l’exponentielle au quatrième membre de (28) se réduit à $\sqrt{1 + z_\uparrow}$, facile à développer en puissances de z_\uparrow , d’où le résultat à tous les ordres en termes de la fonction Γ d’Euler :

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} B_{n_\uparrow, 1}(0^+) = \frac{(-1)^{n_\uparrow} \Gamma(n_\uparrow - 1/2)}{n_\uparrow! \Gamma(-1/2)} \quad \forall n_\uparrow \in \mathbb{N} \quad (29)$$

Les résultats. Nos résultats numériques pour $I_{3,1}(0^+)$, donc pour le coefficient d’amas $B_{3,1}(0^+)$ d’après l’équation (5), sont donnés explicitement dans la table 2 et sont représentés en fonction du rapport de masse sur la figure 3a, sans barres d’erreur mais avec une incertitude inférieure au pour cent. Nous trouvons que $B_{3,1}(0^+)$ est positif, sauf sur un intervalle $[\alpha_1, \alpha_2]$, comme on le voit mieux sur l’agrandissement inclus dans la figure. Aux grandes valeurs de α , $B_{3,1}(0^+)$ présente une croissance marquée que nous attribuons à l’effet Efimov à trois corps, mais admet une limite finie au seuil de l’effet Efimov à $3 + 1$ corps où doit s’arrêter notre calcul, atteinte avec une pente infinie et que nous déterminons par extrapolation, voir les courbes en tireté sur la figure 3a et les explications qui suivent,

$$B_{3,1}(0^+) \xrightarrow{\alpha \rightarrow (\alpha_c^{4\text{ corps}})^-} 2,47 \pm 0,03 \quad (30)$$

Près du seuil efimovien à $3 + 1$ corps. La limite $\alpha \rightarrow (\alpha_c^{4\text{ corps}})^-$ dans l’équation (30) est difficile à atteindre numériquement avec précision pour plusieurs raisons. Premièrement, si $\alpha \rightarrow +\infty$, le taux de décroissance exponentielle $\ln(1/|z_0|)$ dans l’équation (20) tend vers zéro comme $\alpha^{-1/2}$ donc la convergence de la série $I_{3,1}(0^+)$ devient de plus en plus lente avec ℓ ; heureusement, comme le rapport de masse α reste inférieur au seuil efimovien à quatre corps, $\ln(1/|z_0|)$ ne devient pas si petit que ça (il reste supérieur à 0,267) et le problème est résolu par l’accélération de convergence (18) si l’on se contente d’une erreur sur $B_{3,1}(0^+)$ inférieure au pour cent (voir la figure 2). Deuxièmement, l’effet Efimov à $3 + 1$ corps sur le point d’apparaître dans la voie $\ell = 1, \varepsilon = +1$ oblige à augmenter x_{\max} aux valeurs considérées dans la référence [39], du moins dans les voies de moment cinétique $\ell \leq 5$, ce qui augmente beaucoup le temps de

α	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5	5,5
$B_{3,1}$	0,02297	0,01764	0,01289	0,008233	0,003651	-0,000697	-0,004571	-0,007623	-0,00946	-0,00964
$B_{1,3}$	0,02297	0,02775	0,03116	0,03387	0,03611	0,03802	0,03967	0,04110	0,04236	0,04349
α	6	6,5	7	7,5	8	8,5	9	9,5	10	10,5
$B_{3,1}$	-0,00751	-0,00257	0,006065	0,01912	0,0379	0,06354	0,09769	0,1423	0,2003	0,275
$B_{1,3}$	0,04449	0,04539	0,04621	0,04695	0,04763	0,04825	0,04882	0,04935	0,04983	0,05029
α	11	11,5	12	12,5	12,75	13	13,1	13,2	13,3	20
$B_{3,1}$	0,3721	0,4996	0,6714	0,9176	1,090	1,329	1,457	1,623	1,867	
$B_{1,3}$	0,05071	0,05110	0,05147	0,05182	0,05198	0,05214	0,05220	0,05227	0,05233	0,05523

TABLE 2: Valeurs numériques des quatrième coefficients d'amas $B_{3,1}(0^+)$ et $B_{1,3}(0^+)$ du gaz unitaire de fermions dans un piège de raideur infinitésimale, tabulées en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$. Comme on passe d'un coefficient à l'autre en changeant α en $1/\alpha$, nous nous sommes limités à $\alpha \geq 1$. Les incertitudes, non précisées, sont inférieures au pour cent. Ces valeurs sont représentées graphiquement sur la figure 3a.

calcul et conduit à une singularité de type $(\alpha_c^{4\text{corps}} - \alpha)^{1/2}$ dont il faut tenir compte dans l'extrapolation de $B_{3,1}(0^+)$ à $\alpha = \alpha_c^{4\text{corps}}$, voir les tiretés sur la figure 3a et la légende de la figure. ¹³ Troisièmement, le seuil de l'effet Efimov à trois corps $\alpha_c^{2,1} \approx 13,60697$ est proche et affecte toutes les voies de moment cinétique ℓ du problème à quatre corps [40], même s'il se produit dans la voie de moment cinétique $L = 1$ du problème à 2 + 1 fermions. En effet, le spectre continu de l'opérateur $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ est la réunion de continus correspondant à 2 + 1 fermions fortement corrélés par les interactions et un fermion \uparrow découplé, donc paramétrés par un moment cinétique L à trois corps [39]. La contribution du continuum de moment cinétique L au coefficient d'amas 3 + 1 dans la voie (ℓ, ε) s'écrit à un facteur près [40] :

$$I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)|_{C^{0,L}} \propto \int_{\mathbb{R}} dS \int_{\mathbb{R}^+} dk S \partial_S \theta_L(k, S) \frac{d}{dk} \ln \Lambda_{2,1}^{(L)}(ik) \quad (31)$$

Les modes propres du continuum ont asymptotiquement une structure d'onde plane dans l'espace de la variable x , c'est-à-dire qu'ils sont superposition, lorsque $x \rightarrow +\infty$, d'une onde incidente $\exp(-ikx)$ et d'une onde réfléchie $-\exp[i\theta_L(k, S)] \exp(ikx)$ où le déphasage $\theta_L(k, S)$ est fonction du nombre d'onde $k > 0$ (fictif car x n'est pas une vraie position), de l'exposant d'échelle imaginaire pur iS et du moment cinétique à trois corps L . On voit apparaître dans l'expression (31) la fonction transcendante d'Efimov $\Lambda_{2,1}^{(L)}$ dont les exposants d'échelle du problème unitaire à 2 + 1 corps de moment cinétique L sont les racines. Ceci est dû au fait que les modes du continuum de nombre d'onde k sont associés à la valeur propre $\Lambda_{2,1}^{(L)}(ik)$ de $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ [39]. ¹⁴ Le point clé est maintenant que le bord inférieur du continuum de $L = 1$, à savoir le minimum de $\Lambda_{2,1}^{L=1}(ik)$ par rapport à la variable k , tend vers zéro lorsque $\alpha \rightarrow \alpha_c^{2,1}$ à cause de l'effet Efimov à 2 + 1 corps. Ceci a deux conséquences. D'abord, une conséquence pratique dans le calcul de $I_{3,1}$ sur ordinateur : comme le continuum est rendu discret par la troncature de x à x_{\max} , son bord inférieur s'écarte du vrai bord d'environ $1/x_{\max}^2$; ¹⁵ cet artefact numérique oblige à augmenter significativement x_{\max} , heureusement seulement pour les voies de moment cinétique à quatre corps $\ell \leq 5$ tant que $\alpha \leq 13,3$. Ensuite, une conséquence physique : une seconde singularité apparaît dans $I_{3,1}(0^+)$, de la forme $(\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$, donc elle aussi en racine carrée mais centrée sur le seuil efimovien à trois corps. ¹⁶ Cette singularité à trois corps se produit en un point très proche de la singularité à quatre corps, ce qui jette un doute sur la précision de l'extrapolation faite dans la figure 3a qui n'en

13. Cette singularité est présente dans l'un des exposants d'échelle s_i du problème unitaire à 3 + 1 corps, celui s_0 dont le carré s'annule en changeant de signe au seuil efimovien, dans la voie $\ell_0 = 1$ [39]. Or $B_{3,1}(0^+)$ dépend linéairement des exposants d'échelle. On le voit bien sur la composante universelle du troisième coefficient d'amas du gaz unitaire de bosons dans l'équation (36) de la référence [20] en faisant tendre $\bar{\omega}$ (noté x dans cette référence) vers zéro; on le voit aussi pour 2 + 1 fermions dans la référence [21]. Plus précisément, $B_{3,1}(0^+) = -(\ell_0 + 1/2)s_0 + \dots$ où l'ellipse est une fonction lisse de α au voisinage de $\alpha_c^{3,1}$. Comme $s_0^2 \approx c_0(\alpha_c^{3,1} - \alpha)$ avec $c_0 \approx 2,2$ près du seuil [39], on trouve que $dB_{3,1}(0^+)/dX = -(\ell_0 + 1/2)c_0^{1/2} \approx -2,2$ en $X \equiv (\alpha_c^{3,1} - \alpha)^{1/2} = 0$. Cette contrainte est assez bien satisfaite par les ajustements de la figure 3a.

14. En l'absence de coupure dans l'espace des x ($x_{\max} = +\infty$), on tombe sur un paradoxe : k décrit l'ensemble continu \mathbb{R}^+ indépendamment de la variable S et la dérivée de la valeur propre $\Lambda_{2,1}^{(L)}(ik)$ par rapport à S est nulle, donc le continuum ne devrait pas contribuer à $I_{3,1}$ dans l'équation (4). La bonne façon de raisonner est de mettre une coupure x_{\max} que l'on fait tendre vers l'infini à la fin, avec la condition que les modes propres s'annulent en $x = x_{\max}$. L'équation $\theta_L(k, S) = -2kx_{\max}$ [2 π] qui en résulte quantifie k , c'est-à-dire le restreint à un ensemble discret, et le fait dépendre de S si le déphasage $\theta_L(k, S)$ en dépend [40].

15. En effet, le nombre d'onde k varie par pas de l'ordre de $1/x_{\max}$, comme le montre la note 14, et $\Lambda_{2,1}^{L=1}(ik)$ varie quadratiquement près de son minimum.

16. À gauche de ce seuil, on écrit à la Weierstrass $\ln \Lambda_{2,1}^{(L=1)}(ik) = \ln[(k^2 + \sigma_0^2)/(k^2 + 1)] + \dots$ où l'ellipse est une fonction régulière de α même au seuil et $\sigma_0 > 0$ est l'exposant d'échelle du problème à 2 + 1 corps dont le carré s'annule en changeant de signe au seuil. Tout près du seuil, $\sigma_0 \ll 1$

tenait pas compte. Nous y remédions par des fonctions d'ajustement incluant les deux singularités, polynomiales en les quantités $X = (\alpha_c^{3,1} - \alpha)^{1/2}$ et $Y = (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$:

$$I_{3,1}(0^+) = A_0 + A_1X + A_2(Y - Y_0) + A_3X^2 \quad \text{et} \quad I_{3,1}(0^+) = A_0 + A_1X + A_2(Y - Y_0) + A_3X^2 + A_4X^3 + A_5(Y^3 - Y_0^3) \quad (32)$$

où $Y_0 = (Y^2 - X^2)^{1/2} = (\alpha_c^{2,1} - \alpha_c^{3,1})^{1/2}$ est aussi la valeur de Y en $X = 0$. Sur l'intervalle $10 \leq \alpha \leq 13,3$, ceci conduit à $A_0 = 2,495$ et $A_0 = 2,447$ d'où le résultat final (30), qui conforte celui plus naïf de la figure 3a.

Cas $\bar{\omega} \neq 0$. Pour terminer cette section, étudions brièvement la dépendance du coefficient d'amas $B_{3,1}(\bar{\omega})$ en la raideur du piège. Une façon d'en rendre compte qui soit utile aux expériences sur les gaz d'atomes froids est de calculer le premier écart à la limite de raideur nulle, de degré pair en $\bar{\omega}$ puisque l'intégrande de l'équation (4) est une fonction paire de $\bar{\omega}$:

$$B_{3,1}(\bar{\omega}) \underset{\bar{\omega} \rightarrow 0^+}{=} B_{3,1}(0^+) + \frac{1}{2}B''_{3,1}(0^+)\bar{\omega}^2 + O(\bar{\omega}^4) \quad (33)$$

Ceci permet en effet de quantifier l'erreur due à l'approximation d'homogénéité locale, systématiquement utilisée dans l'expérience, et qui revient à garder seulement le premier terme du développement de Taylor (33). Il est d'ailleurs facile de voir que le petit paramètre contrôlant cette approximation ne peut être que $\bar{\omega}$ à la limite unitaire : l'approximation n'a de sens que si la longueur de corrélation à l'équilibre du gaz homogène dans chaque état de spin σ , ici nécessairement la longueur thermique de de Broglie λ_σ par invariance d'échelle dans le cas non dégénéré, est beaucoup plus petite que le rayon spatial du gaz piégé $R_\sigma = (k_B T / m_\sigma \omega^2)^{1/2}$; on a bien $\lambda_\sigma / R_\sigma \propto \hbar \omega / k_B T = \bar{\omega} \ll 1$. Pour obtenir une expression intégrale de la dérivée seconde $B''_{3,1}(0^+)$ et mettre en œuvre une accélération de convergence, il suffit de dériver deux fois par rapport à $\bar{\omega}$ l'équation (4) sous le signe intégral, l'équation (18) sous le signe somme et les expressions (47,59) puis de faire tendre $\bar{\omega}$ vers zéro.

Le résultat est représenté en fonction du rapport de masse sur la figure 3b.¹⁷ Cherchons à l'interpréter dans un scénario très simple : comme dans le cas des masses égales $m_\uparrow = m_\downarrow$ étudié dans la référence [41], $B_{3,1}(\bar{\omega})$ serait une fonction monotone de $\bar{\omega}$, bien entendu de limite nulle à l'infini. La dérivée seconde en l'origine serait alors toujours de signe opposé à la valeur en $\bar{\omega} = 0$. Ceci explique la figure 3b si on la regarde à grande échelle : $B''_{3,1}(0^+)$ semble effectivement s'annuler en changeant de signe aux mêmes rapports de masse $\alpha = \alpha_1$ et $\alpha = \alpha_2$ que $B_{3,1}(0^+)$. On voit cependant sur un premier agrandissement, en vignette dans la figure 3b, que ce scénario est pris en défaut en α_1 (il semble toujours tenir la route en α_2). En effet, comme le montre la figure 4a, lorsque α se rapproche de $\alpha_1 \simeq 3,412$ par valeurs inférieures (courbes de haut en bas), la fonction $\bar{\omega} \mapsto B_{3,1}(\bar{\omega})$ cesse d'être monotone, devient convexe près de l'origine et atteint un maximum absolu (positif) en un point $\bar{\omega}_0 > 0$ parti de zéro avant que $B_{3,1}(0^+)$ ne devienne < 0 . Ce maximum absolu se maintient quand α continue de croître au-delà de α_1 , mais sa position se déplace vers $+\infty$ et sort de la figure 4a. Un second agrandissement, dans la vignette de la figure 3b, montre que le scénario simple échoue également (mais de peu) au second point d'annulation $\alpha_2 \simeq 6,678$: lorsque α se rapproche de α_2 par valeurs supérieures (courbes de haut en bas sur la figure 4b¹⁸), un minimum absolu (négatif) venu du côté $\bar{\omega} = +\infty$ se rapproche de l'origine et devient plus prononcé, avant que $B_{3,1}(0^+)$ ne devienne à son tour < 0 . Par commodité, nous donnons les valeurs de $B_{3,1}(\bar{\omega})$ et de sa demi-dérivée seconde en $\bar{\omega} = 0^+$ sous forme numérique dans la table 3, pour les rapports de masse de la figure 4. Soulignons pour terminer que le scénario simple de départ était en réalité hautement improbable car il impliquait que le coefficient d'amas à 3+1 corps dans le piège était nul pour toute raideur, $B_{3,1}(\bar{\omega}) \equiv 0$, aux rapports de masse où $B_{3,1}(0^+) = 0$.

et, en admettant comme dans la référence [40] que $\theta_{L=1}(k, S) \sim b(S)k$ lorsque $k \rightarrow 0$, où le rayon de diffusion $b(S)$ est une fonction inconnue de S , on trouve que $I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon) \neq (1, +)}(0^+)$ contient une singularité $\propto \int_0^{+\infty} dk [k^2 / (k^2 + \sigma_0^2) - k^2 / (k^2 + 1)] \propto 1 - \sigma_0$ où $\sigma_0 \sim \gamma_0 (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$ et $\gamma_0 \simeq 0,438$. Nous avons confirmé cette prédiction par un calcul numérique spécifique de $I_{3,1}(0^+)$ dans la voie $\ell = 0$ tout près du seuil, allant jusqu'à $\alpha = 13,59$; une belle loi linéaire en Y est observée et un ajustement donne $I_{3,1}^{(\ell=0)}(0^+) \simeq 0,026 + 0,040Y$ où la variable Y est celle de l'équation (32).

17. Pour les valeurs de α proches de α_2 , nous améliorons la méthode d'accélération de convergence en approximant $[I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}]''(0^+) - [J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}]''(0^+)$ pour $\ell > \ell_{\max}$ par $A\ell^\gamma \text{Re}(e^{i\psi} z_0^\ell)$ plutôt que par 0 comme dans l'équation (18); les paramètres réels A , ψ et γ sont obtenus par ajustement sur l'intervalle $6 \leq \ell \leq \ell_{\max}$, et le nombre complexe z_0 est celui de la loi asymptotique (20).

18. En faisant varier tous les paramètres de troncature et de discrétisation dans le calcul numérique, nous estimons à 2×10^{-5} l'incertitude sur les courbes de la figure 4b les plus proches de l'axe horizontal (par exemple pour $\alpha = 6,6875$); les dépendances en $\bar{\omega}$ représentées sont donc significatives.

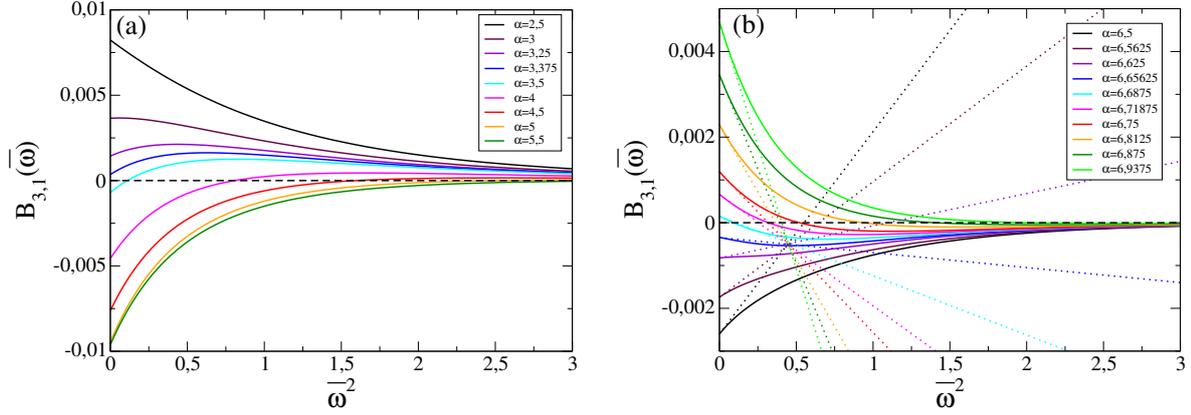


FIGURE 4: Quatrième coefficient d'amas $B_{3,1}(\bar{\omega})$ du gaz unitaire de fermions piégé en fonction de la raideur réduite $\bar{\omega}^2 = (\hbar\omega/k_B T)^2$ des potentiels harmoniques, pour différents rapports de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$ proches des points d'annulation $\alpha_1 \approx 3,412$ (a) et $\alpha_2 \approx 6,678$ (b) de $B_{3,1}(0^+)$, ce qui est utile à la compréhension des agrandissements sur la figure 3b, c'est-à-dire du rapport entre les signes de la valeur et de la courbure de $B_{3,1}(\bar{\omega})$ en l'origine. Dans (b), les pentes des tangentes à l'origine (en pointillé) sont tirées de la figure 3b.

α	2,5	3	3,25	3,375	3,5	4	4,5	5	5,5	
$B_{3,1}$	0,00823	0,00365	0,00143	0,00035	-0,00070	-0,00457	-0,00763	-0,00947	-0,00963	
$\frac{1}{2}B'_{3,1}$	-0,00660	0,00055	0,00420	0,00596	0,00766	0,0140	0,0190	0,0217	0,0212	
α	6,5	6,5625	6,625	6,65625	6,6875	6,71875	6,75	6,8125	6,875	6,9375
$B_{3,1}$	-0,00260	-0,00174	-0,00083	-0,00035	0,00015	0,00066	0,00119	0,00229	0,00346	0,00469
$\frac{1}{2}B'_{3,1}$	0,0047	0,0027	0,0007	-0,0003	-0,0013	-0,0026	-0,0037	-0,0063	-0,0088	-0,0115

TABLE 3: Valeurs numériques du quatrième coefficient d'amas $B_{3,1}(0^+)$ et de sa demi-dérivée seconde $(1/2)B'_{3,1}(0^+)$ par rapport à $\bar{\omega}$, données avec leurs chiffres significatifs, pour les rapports de masse de la figure 4. Les demi-dérivées sont représentées graphiquement (pour certaines avec une barre d'erreur) sur la figure 3b.

3. Coefficient d'amas à 2 + 2 fermions dans un piège

Nous expliquons dans cette section comment effectuer un calcul numérique efficace de la quantité $I_{2,2}(\bar{\omega})$ définie par l'équation (4), en nous limitant pour simplifier au cas $\bar{\omega} = 0^+$, c'est-à-dire à un piège de raideur infinitésimale. Le coefficient d'amas $B_{2,2}(0^+)$ du gaz unitaire s'en déduit par la conjecture (5). Comme les deux états de spin \uparrow et \downarrow jouent ici des rôles parfaitement symétriques, $B_{2,2}(0^+)$ est invariant par changement du rapport de masse α en son inverse $1/\alpha$ et l'on peut limiter les calculs numériques au cas $\alpha \geq 1$. Au contraire de la section 2 précédente, on peut aller jusqu'au seuil efimovien à trois corps, $\alpha < \alpha_c^{2,1}$, puisqu'il n'existe pas d'effet Efimov à 2 + 2 corps [40].

Formulation du problème. Rappelons l'expression de l'opérateur hermitien $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ donnée dans la référence [40] pour le moment cinétique ℓ , la parité $\varepsilon = \pm$ (limitée à \pm si $\ell = 0$) et l'exposant d'échelle imaginaire pur iS , avec la même notation de Schrödinger-Dirac que dans l'équation (14) mais la différence que la variable x varie sur la droite réelle tout entière :

$$\langle x, u | \langle \ell, m_z | M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS) | f \rangle = \mathcal{D}_{2,2}(x, u) f_{m_z}(x, u) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-1}^1 du' \sum_{m'_z | (-1)^{m'_z} = \varepsilon} K_{2,2}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) f_{m'_z}(x', u') \quad (34)$$

avec une partie diagonale indépendante de iS , du moment cinétique et du nombre quantique magnétique m_z :

$$\mathcal{D}_{2,2}(x, u) = \left[\frac{\alpha}{(1+\alpha)^2} \left(1 + \frac{u}{\text{ch } x} \right) + \frac{e^{-x} + \alpha e^x}{2(\alpha+1) \text{ch } x} \right]^{1/2} \quad (35)$$

et un noyau intégral matriciel décomposé en trois contributions $K_{2,2} = K_1 + K_2 + K_3$ écrites ligne par ligne dans cet ordre :

$$\begin{aligned}
K_{2,2}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) &= \left(\frac{e^x \operatorname{ch} x'}{e^{x'} \operatorname{ch} x} \right)^{iS/2} \left(\frac{e^{x+x'}}{4 \operatorname{ch} x \operatorname{ch} x'} \right)^{1/4} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(2\pi)^2} \frac{e^{-im_z\theta/2} \langle \ell, m_z | e^{i\phi L_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle e^{im'_z\theta'/2}}{\operatorname{ch}(x-x') + \frac{1}{1+\alpha} [(u+e^{-x})(u'+e^{-x'}) + v v' \cos \phi]} \\
&+ \left(\frac{e^{-x} \operatorname{ch} x'}{e^{-x'} \operatorname{ch} x} \right)^{iS/2} \left(\frac{e^{-x-x'}}{4 \operatorname{ch} x \operatorname{ch} x'} \right)^{1/4} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(2\pi)^2} \frac{e^{im_z\theta/2} \langle \ell, m_z | e^{i\phi L_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle e^{-im'_z\theta'/2}}{\operatorname{ch}(x-x') + \frac{\alpha}{1+\alpha} [(u+e^x)(u'+e^{x'}) + v v' \cos \phi]} \\
&+ \frac{(-1)^{\ell+1}}{4\pi[(u+\operatorname{ch} x)(u'+\operatorname{ch} x') \operatorname{ch} x \operatorname{ch} x']^{1/4}} \left(\frac{u'+\operatorname{ch} x'}{(u+\operatorname{ch} x) \operatorname{ch} x} \right)^{iS/2} \frac{e^{im_z\gamma(x,u)} \langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle \langle \ell, m_x = 0 | \ell, m'_z \rangle e^{-im'_z\gamma(x',u')}}{\left(\frac{e^{-x'+\alpha e^{x'}}}{1+\alpha} \right) (u+\operatorname{ch} x) + \left(\frac{e^{-x+\alpha e^x}}{1+\alpha} \right) (u'+\operatorname{ch} x')}
\end{aligned} \tag{36}$$

avec l'angle $\gamma(x, u) = \arctan\{\operatorname{th}(x/2)[(1-u)/(1+u)]^{1/2}\}$, l'angle $\theta \in [0, \pi]$ tel que $u = \cos \theta$ et la notation $v = \sin \theta$. La troisième contribution K_3 est non nulle seulement dans le secteur de parité $\varepsilon = (-1)^\ell$ (dans l'autre secteur, on a $\langle \ell, m_x = 0 | \ell, m_z \rangle \equiv 0$). Contrairement aux deux premières, c'est une fonction singulière des coordonnées (x, u) et (x', u') , divergente au point $(x = 0, u = -1)$, ou si l'on préfère $(x = 0, \theta = \pi)$. Dans le calcul numérique, limité au rectangle $(x, \theta) \in [-x_{\max}, x_{\max}] \times [0, \pi]$, on isole la singularité par un demi-disque de rayon R et de centre $(0, \pi)$, dans lequel on utilise une grille logarithmico-polaire comme dans la référence [40]¹⁹, et au-dehors duquel on utilise le même type de grille que dans la section 2.

Approximant asymptotique. Il reste à mettre en œuvre la même technique d'accélération de convergence que dans l'équation (18) dans le cas particulier $\bar{\omega} = 0^+$,

$$I_{2,2}(0^+) \simeq \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} \sum_{\varepsilon} [J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+) - J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)] + \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{\varepsilon} J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+) \tag{37}$$

où, comme dans la section 2, $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ est la contribution de la voie de moment cinétique ℓ et de parité ε à la quantité cherchée $I_{2,2}(0^+)$, et $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ en est un approximant asymptotique, valable à grand moment cinétique. La référence [40] donne un tel approximant seulement dans le secteur de parité gentil $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ (l'opposé de la parité naturelle) où $K_3 \equiv 0$, en traitant perturbativement K_1 et K_2 au second ordre dans le logarithme du déterminant de $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$. Le calcul ressemble beaucoup à l'équation (19), avec la simplification que les termes linéaires et les termes carrés sont indépendants de S et peuvent être absorbés dans la constante, si bien qu'il ne reste que les termes rectangles [40] :

$$\ln \det[M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)] \stackrel{\varepsilon=(-1)^{\ell-1}}{=} \text{cte} - \operatorname{Tr}^\varepsilon \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_1 \mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_2 \right] + \dots \tag{38}$$

Dans le secteur de parité méchant $\varepsilon = (-1)^\ell$ (celui de la parité naturelle), une difficulté surgit : à cause de son caractère divergent, on ne peut pas traiter K_3 perturbativement. On effectue d'abord un changement de jauge sur les K_j éliminant la dépendance en S de K_3 sans changer le déterminant, ce que l'on signale par un tilde,

$$\tilde{K}_j(x, u, m_z; x', u', m'_z) \equiv \frac{e^{-im_z\gamma(x,u)}}{[(u+\operatorname{ch} x) \operatorname{ch} x]^{-iS/2}} K_j(x, u, m_z; x', u', m'_z) \frac{e^{im'_z\gamma(x',u')}}{[(u'+\operatorname{ch} x') \operatorname{ch} x']^{iS/2}} \tag{39}$$

puis on isole une partie purement « externe » de \tilde{K}_3 , agissant sur l'espace « orbital » des (x, u) mais pas sur celui des $|\ell, m_z\rangle$, donc telle que $\tilde{K}_3 = \tilde{K}_3^{\text{ext}} \otimes |\ell, m_x = 0\rangle \langle \ell, m_x = 0|$. Enfin, on effectue un développement du logarithme du

19. On pose $(x, \pi - \theta) = R e^{i(\cos \psi, \sin \psi)}$, où $t_{\min} < t < 0$ et $0 < \psi < \pi$. On a choisi $R = 2/5$. L'intégration sur ψ est faite par la méthode de Gauss-Legendre à 15 points (série $0 \leq \ell \leq 4$) ou 25 points (série $0 \leq \ell \leq 6$), celle sur t avec la méthode du point milieu et un pas $dt = 0, 1$ ou $dt = 0, 2$. On extrapole quadratiquement à $t_{\min} = -\infty$ à partir des trois choix $t_{\min} = -10, t_{\min} = -20$ et $t_{\min} = -40$.

déterminant en puissances de K_1 et K_2 sans hypothèse sur \tilde{K}_3^{ext} :

$$\begin{aligned} \ln \det[M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)] \stackrel{\varepsilon=(-1)^\ell}{=} \text{cte} + \ln \det \left[\mathbb{1} + \frac{1}{\mathcal{D}_{2,2} + \tilde{K}_3^{\text{ext}} \otimes |\ell, m_x = 0\rangle\langle \ell, m_x = 0|} (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) \right] = \\ \text{cte} - \text{Tr}_{x,u} \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}} \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \langle \ell, m_x = 0 | (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) | \ell, m_x = 0 \rangle \right] - \text{Tr}^\varepsilon \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{K}_1 \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{K}_2 \right] \\ + \text{Tr}_{x,u} \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}} \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \langle \ell, m_x = 0 | (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) \mathcal{D}_{2,2}^{-1} (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) | \ell, m_x = 0 \rangle \right] \\ - \frac{1}{2} \text{Tr}_{x,u} \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}} \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \langle \ell, m_x = 0 | (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) | \ell, m_x = 0 \rangle \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}} \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \langle \ell, m_x = 0 | (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) | \ell, m_x = 0 \rangle \right] + \dots \quad (40) \end{aligned}$$

Dans cette expression apparaît une forme resommée de la partie externe :

$$\tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}} \equiv \mathcal{D}_{22} [\mathcal{D}_{22}^{-1} - (\mathcal{D}_{22} + \tilde{K}_3^{\text{ext}})^{-1}] \mathcal{D}_{22} = \tilde{K}_3^{\text{ext}} - \tilde{K}_3^{\text{ext}} (\mathcal{D}_{22} + \tilde{K}_3^{\text{ext}})^{-1} \tilde{K}_3^{\text{ext}} \quad (41)$$

Une écriture optimale de $\tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}}$ est obtenue par reparamétrage de l'ansatz de Faddeev du problème à 2 + 2 corps : on considère que les fonctions sur lesquelles agit l'opérateur $M_{2,2}$ dépendent désormais des vecteurs d'onde relatif et du centre de masse des particules 2 et 4 comme dans la référence [52] au lieu des vecteurs d'onde individuels \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_4 comme dans les références [39, 40], ce qui permet d'éviter le demi-disque autour de la singularité et nous conduit à inverser numériquement un opérateur agissant sur une seule variable réelle au lieu des deux variables (x, u) . Ceci amène un gain de temps de calcul et une simplification considérables. Le lecteur est renvoyé à l'Annexe C pour plus de détails. On trouve numériquement que le second terme au troisième membre de l'équation (40), formellement du premier ordre, est en réalité du même ordre de grandeur que le troisième terme (leurs contributions à $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ tendent vers zéro exponentiellement en ℓ avec le même taux, voir la figure 5a). Le noyau resommé $\tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}}$ est donc, comme K_1 et K_2 , un infiniment petit du premier ordre ; par conséquent, nous négligeons les quatrième et cinquième termes de l'équation (40) pour garder

$$\boxed{\ln \det[M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)] \stackrel{\varepsilon=(-1)^\ell}{=} \text{cte} - \text{Tr}_{x,u} \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{\mathbb{K}}_3^{\text{ext}} \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \langle \ell, m_x = 0 | (\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2) | \ell, m_x = 0 \rangle \right] - \text{Tr}^\varepsilon \left[\mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{K}_1 \mathcal{D}_{2,2}^{-1} \tilde{K}_2 \right] + \dots} \quad (42)$$

Si l'on veut, on peut défaire le changement de jauge (39) dans le troisième terme sans changer la trace, pour retrouver la contribution (38). Dans l'Annexe B, nous donnons une expression plus explicite de l'approximant asymptotique $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ déduit des développements (38) et (42), voir les équations (71,72,78,80), ainsi que de sa somme sur ℓ et sur ε , voir les équations (81,86).

Application et résultats. La somme sur ℓ dans $I_{2,2}(0^+)$ présente le même phénomène de convergence lente que dans $I_{3,1}(0^+)$ aux grandes valeurs du rapport de masse α . Nous trouvons à nouveau que l'approximant asymptotique, ici $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$, tend vers zéro exponentiellement en ℓ , avec un taux c que nous calculons numériquement par commodité dans le secteur de parité gentil $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ et pour un rapport de masse $\alpha \gtrsim 3$:²⁰

$$J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+) \stackrel{\varepsilon=(-1)^{\ell-1}}{\underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim}} \varepsilon \exp[-c\ell + O(\ln \ell)] \quad (43)$$

Le taux c est représenté en fonction du rapport de masse sur la figure 5b. On y observe, comme dans la section 2, une loi $c \propto \alpha^{-1/2}$ aux grands rapports de masse. Dans ce régime, la méthode d'accélération de convergence est un allié indispensable du calcul numérique, comme le montre la figure 5c. Elle nous permet d'obtenir le quatrième coefficient d'amas $B_{2,2}(0^+)$ du système piégé, donné sous forme numérique dans la table 4 et représenté en fonction du rapport de masse sur la figure 6, avec une incertitude inférieure au pour cent en un temps de calcul raisonnable. À cause de l'effet Efimov à 2 + 1 corps, ce coefficient présente une singularité en $(\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$ près du seuil, pour la même raison que celle exposée autour de l'équation (31) dans la section 2. Nous en tenons compte dans les ajustements en tireté sur la figure 6, pour obtenir l'extrapolation

$$\boxed{B_{2,2}(0^+) \xrightarrow{\alpha \rightarrow (\alpha_c^{3\text{ corps}})^-} -0,737 \pm 0,007} \quad (44)$$

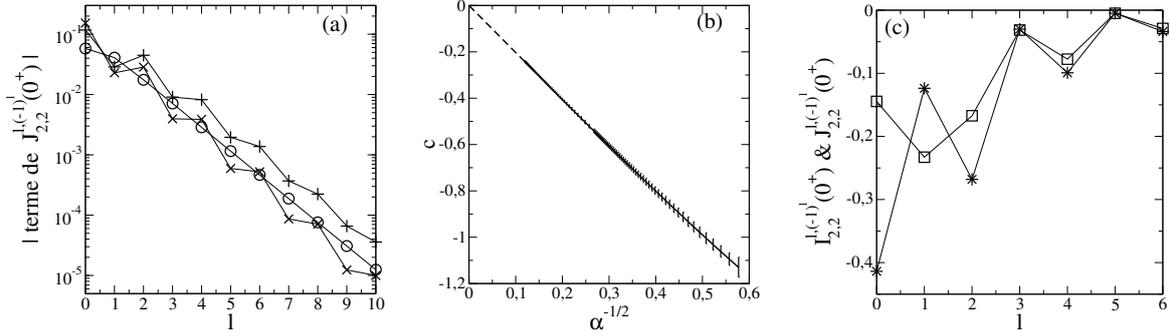
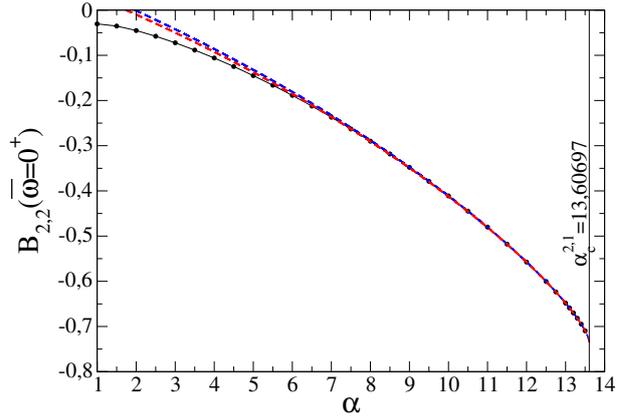


FIGURE 5: Quelques résultats numériques sur l'approximant asymptotique $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ de la contribution $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ de moment cinétique ℓ et de parité ε à la quantité $I_{2,2}(0^+)$ de l'équation (4). (a) Pour un rapport de masse $\alpha = 5$ et le secteur de parité méchant $\varepsilon = (-1)^\ell$ (celui de la parité naturelle), valeur absolue des trois termes de $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ dans l'expression (71) (symboles \circ , $+$ et \times dans cet ordre) en fonction du moment cinétique ℓ . (b) Taux c de décroissance exponentielle en ℓ de $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ comme dans l'équation (43), en fonction de la racine carrée du rapport de masse inverse. Les barres d'erreur donnent l'écart entre les valeurs de c tirées de diverses fonctions d'ajustement (pour $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$, $\ln|J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)|$ est pris comme fonction affine de ℓ plus un terme en $1/\ell$, ou plus un terme en $\ln \ell$, ou plus les deux). La droite tiretée est une extrapolation affine à $\alpha^{-1/2} = 0$. (c) Pour $\alpha = 13,3$ et $\varepsilon = (-1)^\ell$, valeur exacte $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ obtenue numériquement (carrés) et approximant asymptotique $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ (étoiles) en fonction de ℓ .

Figure 6: Quatrième coefficient d'amas $B_{2,2}(0^+)$ du gaz unitaire de fermions dans un piège harmonique de raideur infinitésimale, en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$ restreint à $\alpha \geq 1$ par symétrie $\alpha \leftrightarrow 1/\alpha$. Disques (reliés par un trait fin) : notre calcul numérique de l'expression (4) pour $(n_\uparrow, n_\downarrow) = (2, 2)$ et application de la conjecture (5), avec les paramètres $x_{\max} = -x_{\min} = 20$ et $n_\theta = 15$ dans la série $0 \leq \ell \leq 4$, $x_{\max} = -x_{\min} = 5$ et $n_\theta = 25$ dans la série $0 \leq \ell \leq 6$ (le recouvrement des deux séries sert de vérification), et dans tous les cas $dx = 1/15$, $S_{\max} = 12$, $dS = 12/100$ (voir la note 19 pour le traitement de la singularité du noyau intégral en $(x, \theta) = (0, \pi)$). On utilise la méthode d'accélération de convergence (37) et la même extrapolation à $S_{\max} = +\infty$ que dans la section 2. Trait vertical fin : seuil efimovien à trois corps $\alpha = \alpha_c^{2,1}$. Tiret bleu : ajustement cubique en la variable $Y = (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$ sur l'intervalle $10 \leq \alpha \leq 13,5$, à savoir $B_{2,2}(0^+) = -0,73742 + 0,061673Y + 0,074061Y^2 - 0,0084386Y^3$. Tiret rouge : idem sur l'intervalle $12,5 \leq \alpha \leq 13,5$, à savoir $B_{2,2}(0^+) = -0,73761 + 0,062206Y + 0,073901Y^2 - 0,0086514Y^3$.



Remerciements : Ce travail a bénéficié du soutien financier japonais « Grants-in-Aid for Scientific Research » KAKENHI sous les numéros 21H00116 et 22K03492.

Annexe A. Approximant asymptotique de $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$, sa somme sur ℓ et ε , son comportement dominant

L'approximant asymptotique. Pour obtenir une approximation $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ à grand ℓ de la contribution $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ de moment cinétique ℓ et de parité ε à la quantité $I_{3,1}(\bar{\omega})$ de l'équation (4), nous utilisons les notations de la section 2 et partons du développement (19). Un calcul astucieux de la trace sur $x > 0$ permet de regrouper des contributions faisant apparaître x et $-x$ et de se ramener à des intégrales sur la droite réelle tout entière, dans lesquelles il ne reste à prendre

20. Les comportements dominants dans les deux secteurs de parité diffèrent seulement par leurs lois de puissance en ℓ . Quand le rapport de masse est trop proche de 1, $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon=(-1)^{\ell-1})}(0^+)$ tend vers zéro en oscillant ce qui rend l'extraction numérique du taux plus difficile.

α	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	4,5	5	5,5	
$B_{2,2}$	-0,03056	-0,03529	-0,04518	-0,05777	-0,07233	-0,08845	-0,1060	-0,1248	-0,1449	-0,1662	
α	6	6,5	7	7,5	8	8,5	9	9,5	10	10,5	
$B_{2,2}$	-0,1886	-0,2122	-0,2370	-0,2629	-0,2900	-0,3183	-0,3478	-0,3788	-0,4110	-0,4448	
α	11	11,5	12	12,5	12,75	13	13,1	13,2	13,3	13,4	13,5
$B_{2,2}$	-0,4801	-0,5177	-0,5575	-0,6004	-0,6235	-0,6484	-0,6590	-0,6701	-0,6819	-0,6948	-0,7097

TABLE 4: Valeurs numériques du quatrième coefficient d'amas $B_{2,2}(0^+)$ du gaz unitaire de fermions dans un piège de raideur infinitésimale, tabulées en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\gamma/m_1$. Comme le coefficient est invariant par changement de α en $1/\alpha$, nous nous sommes limités à $\alpha \geq 1$. Les incertitudes, non précisées, sont inférieures au pour cent. Ces valeurs sont représentées graphiquement sur la figure 6.

que les traces sur les variables u et m_z :

$$\begin{aligned} \ln \det M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)} = \text{cte} - \int_{\mathbb{R}} dx e^{iSx} \text{Tr}_{u,m_z}^\varepsilon [\langle x | \bar{K}_{3,1}^{(\ell)} | -x \rangle e^{i\pi Lx/\hbar}] + \int_{\mathbb{R}^2} dx dx' e^{iSx} \text{Tr}_{u,m_z}^\varepsilon [\langle x | \bar{K}_{3,1}^{(\ell)} | x' \rangle \langle x' | \bar{K}_{3,1}^{(\ell)} | -x \rangle e^{i\pi Lx/\hbar}] \\ - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^2} dx dx' e^{iS(x-x')} \text{Tr}_{u,m_z}^\varepsilon [\langle x | \bar{K}_{3,1}^{(\ell)} | x' \rangle e^{i\pi Lx/\hbar} \langle -x' | \bar{K}_{3,1}^{(\ell)} | -x \rangle e^{i\pi Lx'/\hbar}] + \dots \quad (45) \end{aligned}$$

où l'opérateur de rotation d'axe Ox d'angle π provient de la note 9 en bas de page et nous avons introduit le noyau primitif (16) divisé à gauche par la partie diagonale (15) et pris à exposant d'échelle nul, c'est-à-dire $\bar{K}_{3,1}^{(\ell)} \equiv \mathcal{D}_{3,1}^{-1} K_{3,1}^{(\ell)}$ ($iS = 0$). Les contributions gardées au second membre de l'équation (45) constituent une fonction $-\phi^{(\ell,\varepsilon)}(S)$ de S paire, régulière, à valeurs réelles et à décroissance rapide. Aussi peut-on intégrer par parties sur S dans l'équation (4) et faire apparaître la composante de Fourier de $\phi^{(\ell,\varepsilon)}(S)$ à la pulsation $\bar{\omega}$:

$$J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega}) = \frac{(\ell + 1/2)\bar{\omega}}{\text{sh } \bar{\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dS}{2\pi} e^{-i\bar{\omega}S} \phi^{(\ell,\varepsilon)}(S) \quad (46)$$

facile à obtenir à partir de (45) au moyen de l'identité au sens des distributions $\int_{\mathbb{R}} \exp(ikS) dS = 2\pi\delta(k)$. Un calcul long mais sans difficulté, traitant les contributions à $\phi^{(\ell,\varepsilon)}(S)$ dans l'ordre où elles apparaissent, donne finalement :

$$\begin{aligned} J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega}) = \frac{(\ell + 1/2)\bar{\omega}}{\pi \text{sh } \bar{\omega} \sqrt{2 \text{ch } \bar{\omega}}} \int_{-1}^1 \frac{du}{\mathcal{D}_{3,1}(\bar{\omega}, u)} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \frac{\mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta; \phi + \pi)}{1 + 2 \text{ch}(2\bar{\omega}) + \frac{2\alpha}{1+\alpha}(2u \text{ch } \bar{\omega} + u^2 + v^2 \cos \phi)} \\ - \frac{(\ell + 1/2)\bar{\omega}}{\pi^2 \text{sh } \bar{\omega} \sqrt{2 \text{ch } \bar{\omega}}} \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{-1}^1 du du' \int_0^{2\pi} \frac{d\phi d\phi'}{(2\pi)^2} \frac{(\lambda'^{2+1/2} / \sqrt{2 \text{ch } x'}) [\mathcal{D}_{3,1}(\bar{\omega}, u) \mathcal{D}_{3,1}(x', u')]^{-1} \mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta; \phi + \phi' + \pi)}{[1 + \lambda_{\bar{\omega}}^2 + \lambda'^2 + \frac{2\alpha}{1+\alpha}(u\lambda_{\bar{\omega}} + u'\lambda' + \lambda_{\bar{\omega}}\lambda'(uu' + vv' \cos \phi))]} [(\lambda_{\bar{\omega}}, \phi) \rightarrow (\lambda_{\bar{\omega}}^{-1}, \phi')] \\ + \frac{(\ell + 1/2)\bar{\omega}}{2\pi^2 \text{sh } \bar{\omega}} \int_{\mathbb{R}} dX \int_{-1}^1 du du' \int_0^{2\pi} \frac{d\phi d\phi'}{(2\pi)^2} \frac{[2 \sqrt{\text{ch } X_+ \text{ch } X_-} \mathcal{D}_{3,1}(X_+, u) \mathcal{D}_{3,1}(X_-, u')]^{-1} \mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta; \phi; \phi')}{[1 + \lambda_+^2 + \lambda_-^2 + \frac{2\alpha}{1+\alpha}(\lambda_+ u + \lambda_- u' + \lambda_+ \lambda_-(uu' + vv' \cos \phi))]} [(\lambda_{\pm}, \phi) \rightarrow (\lambda_{\pm}^{-1}, \phi')] \quad (47) \end{aligned}$$

avec les notations $X_{\pm} = X \pm \bar{\omega}/2$, $\lambda_{\bar{\omega}} = \exp(\bar{\omega})$, $\lambda_{\pm} = \exp(X_{\pm})$ (ces deux dernières calquées sur $\lambda = \exp(x)$) complétant celles de l'équation (17) et les fonctions angulaires²¹

$$\mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta; \phi) \equiv \text{Tr}_{m_z}^\varepsilon \left(e^{-i\theta L_z/\hbar} e^{i\phi L_x/\hbar} \right) \quad \text{et} \quad \mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta; \theta'; \phi; \phi') \equiv \text{Tr}_{m_z}^\varepsilon \left(e^{-i\theta L_z/\hbar} e^{i\phi L_x/\hbar} e^{i\theta' L_z/\hbar} e^{i\phi' L_x/\hbar} \right) \quad (48)$$

Les sommes sur la parité ε des quantités définies dans (48) ont des expressions simples en termes d'angles $\xi \in [0, \pi]$, voir la référence [40],²²

$$\mathcal{T}^{(\ell)}(\theta; \phi) = \frac{\sin[(\ell + 1/2)\xi]}{\sin(\xi/2)} \quad \text{avec} \quad 1 + 2 \cos \xi = u(1 + \cos \phi) + \cos \phi \quad (49)$$

21. Un lecteur attentif objectera que la définition de $\mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta, \theta'; \phi, \phi')$ devrait en principe comporter un projecteur orthogonal sur le sous-espace de parité $(-1)^{L_z/\hbar} = \varepsilon$ à côté de l'opérateur $e^{i\theta' L_z/\hbar}$. La parité en ϕ et en ϕ' du dénominateur dans la troisième contribution à (47) permet cependant d'en faire l'économie. Par exemple, seule la partie paire de $e^{i\phi L_x/\hbar}$ contribue après intégration sur ϕ ; or, elle préserve la parité de L_z/\hbar .

22. En passant aux arcs moitiés, on peut remarquer qu'on a plus simplement $\cos(\xi/2) = \cos(\theta/2)|\cos(\phi/2)|$ dans l'équation (49).

$$\mathcal{T}^{(\ell)}(\theta; \phi) = \frac{\sin[(\ell + 1/2)\xi]}{\sin(\xi/2)} \quad \text{avec} \quad 1 + 2 \cos \xi = uu'(1 + \cos \phi \cos \phi') - (u + u') \sin \phi \sin \phi' + vv'(\cos \phi + \cos \phi') + \cos \phi \cos \phi' \quad (50)$$

qui montre aussi comment revenir à parité fixée, par exemple

$$\mathcal{T}^{(\ell, \varepsilon)}(\theta; \phi) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^1 \varepsilon^n \mathcal{T}^{(\ell)}(\theta + n\pi; \phi) \quad (51)$$

Nous préférons cependant réserver les équations (49,50,51) à des études analytiques ; pour le calcul numérique, nous évaluons les traces de (48) dans la base propre de L_z (sous la contrainte $(-1)^{m_z} = \varepsilon$) après insertion de relations de fermeture dans la base propre de L_x (obtenue par diagonalisation numérique de sa matrice tridiagonale dans la base des $|\ell, m_z\rangle$) à l'endroit des opérateurs de rotation d'angle ϕ ou ϕ' , puis utilisons la valeur de l'intégrale²³

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \frac{e^{in\phi}}{b_0 + b_1 \cos \phi} = \frac{1}{\sqrt{b_0^2 - b_1^2}} \left(\frac{-b_1}{b_0 + \sqrt{b_0^2 - b_1^2}} \right)^{|n|} \quad \forall n \in \mathbb{Z}, \forall b_0 > 0, \forall b_1 \in]-b_0, b_0[\quad (52)$$

Sa somme sur ℓ et ε . La somme de $J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega})$ sur la parité ε est tout de suite faite, voir les équations (49,50). La somme sur $\ell \in \mathbb{N}$ fait apparaître, au sens des distributions, la série de Fourier d'un peigne de Dirac²⁴ donc se calcule grâce à l'identité :

$$\sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell + 1) \frac{\sin[(\ell + 1/2)\xi]}{\sin(\xi/2)} = \frac{\pi \delta(\xi)}{\sin^2(\xi/2)} \quad (53)$$

Il faut donc trouver les cas d'annulation de l'angle ξ , sachant que les angles polaires θ, θ' (désormais pris comme variables d'intégration de préférence à u, u') décrivent $[0, \pi]$ et que les angles azimutaux ϕ, ϕ' peuvent être pris commodément dans $[-\pi, \pi]$. Dans l'équation (49), on trouve comme seul point d'annulation $(\theta, \phi) = (0, 0)$; au voisinage de ce point, $\xi^2 \simeq \theta^2 + \phi^2$ si bien que l'action de $\delta(\xi)$ s'évalue facilement en coordonnées polaires (ρ, γ) dans le plan (θ, ϕ) , pour une fonction régulière f quelconque :

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_{-\pi}^\pi \frac{d\phi}{2\pi} f(\theta, \phi) \frac{\pi \delta(\xi)}{\sin^2(\xi/2)} = f(0, 0) \int_0^{+\infty} d\rho \rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\gamma \rho \cos \gamma \frac{\delta(\rho)}{2(\rho/2)^2} = 2f(0, 0) \quad (54)$$

Dans l'équation (50), on trouve trois lignes d'annulation²⁵

$$l_1 : \theta = \theta' = 0, \phi + \phi' = 0 \quad ; \quad l_2 : \theta = \theta' = \pi, \phi - \phi' = 0; \quad l_3 : \theta = \theta', \phi = \phi' = 0 \quad (55)$$

Dans l'intégrale à laquelle nous sommes confrontés, qui fait intervenir une fonction régulière g des quatre angles,

$$\mathcal{J} = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' \int_{-\pi}^\pi \frac{d\phi}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi \frac{d\phi'}{2\pi} g(\theta, \theta', \phi, \phi') \frac{\pi \delta(\xi)}{\sin^2(\xi/2)} \quad (56)$$

23. Pour optimiser, on peut (i) remplacer $\exp[i(-m_z\theta + m'_z\theta')]$ par sa partie réelle $\cos(m_z\theta) \cos(m'_z\theta') + \sin(m_z\theta) \sin(m'_z\theta')$ et tabuler les sinus et cosinus correspondants, (ii) se ramener à une boucle sur un seul indice $m_x = m'_x$ et utiliser la symétrie par changement de m_x en $-m_x$, (iii) utiliser la symétrie par changement de (m_z, m'_z) en $(-m_z, -m'_z)$ (on se limite à $(-1)^{m'_z} = \varepsilon$, voir la note 21), (iv) tabuler les puissances de degré $|m_x|$ apparaissant dans (52).

24. On pourra simplement penser à écrire $\sin[(\ell + 1/2)\xi] = \{\cos(\ell\xi) - \cos[(\ell + 1)\xi]\} / [2 \sin(\xi/2)]$ pour faire apparaître la somme partiellement télescopique $\sum_{\ell \in \mathbb{N}} (\ell + 1/2) \{\cos(\ell\xi) - \cos[(\ell + 1)\xi]\} = (-1/2) + \sum_{\ell \in \mathbb{N}} \cos(\ell\xi)$.

25. Si $\xi = 0$, $\mathcal{T}^{(1)}(\theta, \theta'; \phi, \phi') = 3$; or, c'est la trace d'une matrice de rotation dans \mathbb{R}^3 qui doit donc se réduire à l'identité : on a $\mathcal{R}_z(\theta) \mathcal{R}_x(-\phi) \mathcal{R}_z(-\theta') \mathcal{R}_x(-\phi') = \mathbb{I}$ où $\mathcal{R}_x(\theta)$ est la rotation d'angle θ d'axe Ox , etc. En prenant l'élément de matrice zx de cette relation, on aboutit à la condition $\sin \theta' \sin \phi = 0$. De même, en changeant l'ordre des opérateurs par permutation circulaire sous la trace, on aboutit à $\sin \theta \sin \phi' = 0$. Les lignes d'annulation l_1 et l_2 dans (55) correspondent à $\sin \theta = \sin \theta' = 0$ c'est-à-dire $\theta = \theta' = 0[\pi]$, les cas $\theta = 0, \theta' = \pi$ et $\theta = \pi, \theta' = 0$ ne convenant trivialement pas. La ligne l_3 correspond à $\sin \phi = \sin \phi' = 0$ c'est-à-dire $\phi = \phi' = 0[\pi]$, qui se réduit en pratique à $\phi = \phi' = 0$; en effet, les cas $\phi = 0, \phi' = \pi$ et $\phi = \pi, \phi' = 0$ ne conviennent visiblement pas, et le cas $\phi = \phi' = \pi$ impose $\cos(\theta + \theta') = 1$ donc $\theta = \theta' = 0$ ou π , ce qui correspond à des points d'annulation, de contribution nulle à l'intégrale sur $\theta, \theta', \phi, \phi'$. Les cas restants $\sin \theta = \sin \phi = 0$ ou $\sin \theta' = \sin \phi' = 0$ ne conduisent qu'à des points d'annulation et ne contribuent pas non plus.

les lignes l_1 et l_2 ont une contribution nulle à cause des jacobiens $\sin \theta$ et $\sin \theta'$. Au voisinage de la ligne l_3 , on quadratise la quantité ξ en les variables ϕ, ϕ' et $\theta' - \theta$; l'intégrale à θ fixé

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi' \int_{-\infty}^{+\infty} d(\theta' - \theta) \frac{\delta(\sqrt{\phi^2 + \phi'^2 + 2\phi\phi' \cos \theta + (\theta' - \theta)^2})}{\phi^2 + \phi'^2 + 2\phi\phi' \cos \theta + (\theta' - \theta)^2} = \frac{2\pi}{\sin \theta} \quad (57)$$

se calcule bien dans la base propre de la forme quadratique apparaissant au dénominateur et sous la racine carrée (elle est de valeurs propres 1 et $1 \pm \cos \theta$). Il reste simplement

$$\mathcal{J} = 2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta g(\theta, \theta, 0, 0) \quad (58)$$

d'où l'expression de la somme désirée (en respectant l'ordre des contributions dans l'équation (47)) :²⁶

$$\begin{aligned} \sum_{\ell \in \mathbb{N}} \sum_{\varepsilon} J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega}) &= \frac{\bar{\omega}}{\pi \operatorname{sh} \bar{\omega} \sqrt{2 \operatorname{ch} \bar{\omega}}} \frac{[\mathcal{D}_{3,1}(\bar{\omega}, u = 1)]^{-1}}{1 + 2 \operatorname{ch}(2\bar{\omega}) + \frac{2\alpha}{1+\alpha}(1 + 2 \operatorname{ch} \bar{\omega})} \\ &- \frac{\bar{\omega}}{2\pi^2 \operatorname{sh} \bar{\omega} \sqrt{\operatorname{ch} \bar{\omega}}} \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{-1}^1 du' \frac{\lambda'^{2+1/2}}{\sqrt{\operatorname{ch} x'}} \frac{[\mathcal{D}_{3,1}(\bar{\omega}, u = 1) \mathcal{D}_{3,1}(x', u')]^{-1}}{[1 + \lambda_{\bar{\omega}}^2 + \lambda'^2 + \frac{2\alpha}{1+\alpha}(\lambda_{\bar{\omega}} + u' \lambda' + \lambda_{\bar{\omega}} \lambda' u')] [\lambda_{\bar{\omega}} \rightarrow \lambda_{\bar{\omega}}^{-1}]} \\ &+ \frac{\bar{\omega}}{4\pi^2 \operatorname{sh} \bar{\omega}} \int_{\mathbb{R}} dX \int_{-1}^1 du \frac{[\sqrt{\operatorname{ch} X_+ \operatorname{ch} X_-} \mathcal{D}_{3,1}(X_+, u) \mathcal{D}_{3,1}(X_-, u)]^{-1}}{[1 + \lambda_+^2 + \lambda_-^2 + \frac{2\alpha}{1+\alpha}((\lambda_+ + \lambda_-)u + \lambda_+ \lambda_-)] [\lambda_{\pm} \rightarrow \lambda_{\pm}^{-1}]} \quad (59) \end{aligned}$$

En pratique, le cas le plus important correspond à $\bar{\omega} = 0^+$, car c'est celui qui donne accès au coefficient d'amas $b_{3,1}$ du gaz homogène. Nous donnons l'expression explicite de (59) correspondante, toujours en respectant l'ordre des contributions, en termes de fonctions trigonométriques et du dilogarithme ou fonction de Bose $g_2(z) = \sum_{n>0} z^n/n^2$:

$$\begin{aligned} \sum_{\ell \in \mathbb{N}} \sum_{\varepsilon} J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega} = 0^+) &= \frac{1}{3\pi \sqrt{2}} \frac{(1 + \alpha)^2}{(1 + 3\alpha)^{3/2}} - \frac{(1 + \alpha)^5}{\sqrt{2\pi^2 \alpha} (1 + 2\alpha)(1 + 3\alpha)^{3/2}} \left[\arctan \frac{\alpha}{\sqrt{1 + 2\alpha}} - \frac{\alpha \operatorname{argth} \frac{\sqrt{1+3\alpha}}{\sqrt{2(1+2\alpha)}}}{(\alpha + 1) \sqrt{2(1 + 3\alpha)}} \right] \\ &+ \frac{(1 + \alpha)^4}{2\pi^2 \alpha (1 + 3\alpha)^2} \left\{ \pi \arcsin \frac{\alpha}{1 + 2\alpha} + 2 \operatorname{Re} \left[g_2 \left(\frac{-1}{\zeta} \right) - g_2 \left(\frac{1}{\zeta} \right) \right] - \operatorname{Re} \left[g_2 \left(\frac{2\zeta}{1 + \zeta} \right) - g_2 \left(\frac{-2\zeta}{1 - \zeta} \right) + g_2 \left(\frac{2}{1 - \zeta} \right) - g_2 \left(\frac{2}{1 + \zeta} \right) \right] \right\} \quad (60) \end{aligned}$$

où $\zeta = (2\alpha + i \sqrt{2(1 + 3\alpha)}) / (1 + \alpha)$.

Son comportement dominant. Pour obtenir un équivalent de $J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega})$ ou, ce qui revient au même, de $I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega})$ à grand moment cinétique, il suffit de se limiter à la première contribution au second membre de l'équation (47), qui provient du terme d'ordre un en le noyau $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}$ dans le développement (19). On l'écrit alors sous forme d'une intégrale sur l'angle ξ en insérant un delta de Dirac $\delta(\xi - \xi(u, \phi))$ reliant ξ à u et ϕ comme dans l'équation (49), puis en calculant explicitement l'intégrale sur ϕ puis sur u .²⁷ Pour simplifier, nous nous limitons à $\bar{\omega} = 0^+$ et trouvons :

$$I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(0^+) \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \int_0^\pi d\xi \frac{\sin[(\ell + 1/2)\xi]}{2 \sin(\xi/2)} [\rho_0(\xi) + \varepsilon \rho_1(\xi)] \quad \text{où} \quad \rho_n(\xi) = (2\ell + 1) A_n \frac{\sin^2(\xi/2)}{w_n(\cos \xi)} F_n(f_n(\cos \xi)) \quad (61)$$

26. Là où apparaît $\phi + \pi$ en argument de $\mathcal{T}^{(\ell)}$, on effectue le changement de variable $\phi \rightarrow \phi - \pi$.

27. Après s'être ramené à une intégrale sur $\phi \in [0, \pi]$ par périodicité et parité de l'intégrande, on utilise la relation $\delta(2 \cos \xi + 1 - u(1 + \cos \phi) - \cos \phi) = \delta(\phi - \phi_0) / [(1 + u) \sin \phi_0]$ avec $\sin \phi_0 = 2(u - \cos \xi)^{1/2} (1 + \cos \xi)^{1/2} / (1 + u)$ où la racine ϕ_0 est dans $[0, \pi]$ si et seulement si $0 \leq \theta \leq \xi$ compte tenu de la note 22. On utilise aussi la relation (51).

avec la notation $\beta = 1/\alpha$, les préfacteurs et les fonctions auxiliaires²⁸

$$A_0 = \frac{\sqrt{2}(1+\alpha)^2}{\pi^2\alpha\sqrt{1+3\alpha}} \quad ; \quad w_0(Z) = 3\beta + (1+2Z)^2 \quad ; \quad F_0(Z) = \frac{\arctan \sqrt{Z}}{\sqrt{Z}} \quad ; \quad f_0(Z) = \frac{(1-Z)(5+4Z)}{w_0(Z)} \quad (62)$$

$$A_1 = \frac{\sqrt{2}(1+\alpha)^{5/2}}{\pi^2\alpha^2} \quad ; \quad w_1(Z) = 8(1+\beta)Z^2 - (5\beta+7)Z + \beta(3\beta+1) \quad ; \quad F_1(Z) = Z \left(\frac{\pi}{2} - \arctan Z \right) \quad (63)$$

$$f_1(Z) = \frac{w_1(Z)}{4\sqrt{1+\beta}\sqrt{1-Z}\left[\frac{3\beta+1}{4} + (1+\beta)Z\right][3\beta + (1-2Z)^2]^{1/2}} \quad (64)$$

Pour se ramener à des intégrales de contour sur le cercle unité C , de la forme

$$\mathcal{I}_n = \int_C \frac{dz}{iz} (z-1)z^\ell \frac{F_n\left(\frac{z+1/z}{2}\right)}{w_n\left(\frac{z+1/z}{2}\right)} \quad (65)$$

on procède en trois étapes : (i) on élimine les facteurs $\sin(\xi/2)$ dans l'intégrande de (61), d'abord par simplification du sinus au dénominateur devant les crochets avec un sinus au numérateur de $\rho_n(\xi)$, puis en faisant apparaître $\cos[(\ell+1)\xi] - \cos(\ell\xi)$ avec le sinus restant, comme dans la note 24 ; (ii) on étend l'intégrale sur ξ à $[-\pi, \pi]$ par parité de l'intégrande ; (iii) on prend comme nouvelle variable d'intégration $z = \exp(i\xi)$, qui décrit le cercle unité, si bien que $\cos \xi = (z+1/z)/2$, et l'on peut écrire $\cos[(\ell+1)\xi] - \cos(\ell\xi) = \operatorname{Re}(z^{\ell+1} - z^\ell)$ et sortir la fonction Re de l'intégrale puisque le reste de l'intégrande est réel sur C . Pour les déterminations habituelles du logarithme et de la racine carrée dans le plan complexe (ligne de coupure sur \mathbb{R}^-), on trouve que l'intégrande de \mathcal{I}_0 admet comme singularité dans le disque unité une ligne de coupure en forme de trident, réunion d'un segment OO' et d'un arc AA' , voir la figure 7a, et celui de \mathcal{I}_1 une ligne de coupure en forme de fleur, réunion de trois arcs OB , OB' et BB' , voir la figure 7b.²⁹ Le point O est ici l'origine des coordonnées, A et A' sont les points d'affixes z_0 et z_0^* , B et B' les points d'affixes $z_1 = -z_0^*$ et z_1^* , et z_0 est l'unique solution de l'équation $z + z^{-1} + 1 + i\sqrt{3\beta} = 0$ dans le disque unité (si bien que $w_0(\frac{z_0+1/z_0}{2}) = 0$) :

$$z_0 = \frac{1}{2} \left[i\sqrt{1-i\sqrt{3\beta}}\sqrt{3+i\sqrt{3\beta}} - (1+i\sqrt{3\beta}) \right] \quad (66)$$

À l'aide du théorème intégral de Cauchy, nous resserrons le contour d'intégration jusqu'à ce qu'il épouse les lignes de coupure, sans que cela change la valeur de \mathcal{I}_n . Dans la limite $\ell \rightarrow +\infty$, à cause du facteur z^ℓ , l'intégrale est alors dominée par le voisinage des points de singularité les plus éloignés de O , à savoir A et A' pour \mathcal{I}_0 , B et B' pour \mathcal{I}_1 , ceci valant pour tout rapport de masse α . \hookrightarrow Pour le calcul de \mathcal{I}_0 au voisinage de z_0 , on pose $z = z_0(1+\eta u)$, où u est un nombre complexe et $\eta > 0$ est un infiniment petit, et on approxime la corne du trident par sa demi-tangente à droite au sommet A ; on dispose alors des équivalents $f_0((z+1/z)/2) \sim C_0/(\eta u)$ et $z^\ell \sim z_0^\ell \exp(\ell\eta u)$, et la demi-tangente devient la demi-droite d'origine O de direction $-C_0$ dans l'espace des u (compte tenu de la note 28) donc la demi-droite \mathbb{R}^- dans l'espace des $v = \eta u/C_0$, si bien que

$$\mathcal{I}_0^{\otimes} \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(z_0-1)z_0^\ell}{2\sqrt{3\beta}(z_0-1/z_0)} \int_{C_u} \frac{du}{u} e^{\ell\eta u} F_0\left(\frac{C_0}{\eta u}\right) = \frac{z_0^{\ell+1}}{2\sqrt{3\beta}(1+z_0)} \int_{C_v} \frac{dv}{v} e^{\ell C_0 v} F_0(1/v) \quad (67)$$

28. Quand nous passerons dans le plan complexe, il faudra comprendre que $\arctan Z = \ln[(1+iZ)/(1-iZ)]/(2i)$. Du coup, la ligne de coupure de la fonction $F_0(Z)$ est $] -\infty, -1]$ et celle de $F_1(Z)$ est $i] -\infty, -1] \cup i[1, +\infty[$. On notera que, malgré les apparences, $F_0(Z)$ est analytique dans le disque unité, comme le montre son développement en série en $Z = 0$. Remarquons aussi qu'avec cette définition de la fonction \arctan , on a $\pi/2 - \arctan(ix) = -i \operatorname{argth}(1/x) \forall x \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1]$, ce qui sert déjà dans l'intégrale sur l'axe réel (61) car la quantité sous la dernière racine carrée au dénominateur de (64) peut devenir négative ; on a fait ici les choix $\ln(-1) = i\pi$ et $\sqrt{-1} = i$.

29. Dans ce second cas, on s'attend à avoir trois lignes de coupure, celle L_1 venant de la fonction $F_1(Z)$, celles L_3 et L_2 venant de $\sqrt{1-Z}$ et de l'autre racine carrée au dénominateur de la fonction $f_1(Z)$. En réalité, L_3 est incluse dans L_1 . De plus, les intersections $L_1 \cap L_2$ et $L_1 \cap L_3$ ne sont pas des lignes de coupure de l'intégrande, pour la raison que $z \mapsto z^{1/2}(\pi/2 - \arctan z^{1/2})$ admet seulement $[-1, 0]$ comme ligne de coupure (pour $z \in] -\infty, -1]$, le changement de signe de $\pi/2 - \arctan$ compense celui de la racine carrée). Les arcs OB et OB' sont constitués des points se trouvant seulement sur L_2 , l'arc BB' regroupe les points appartenant seulement à L_1 .

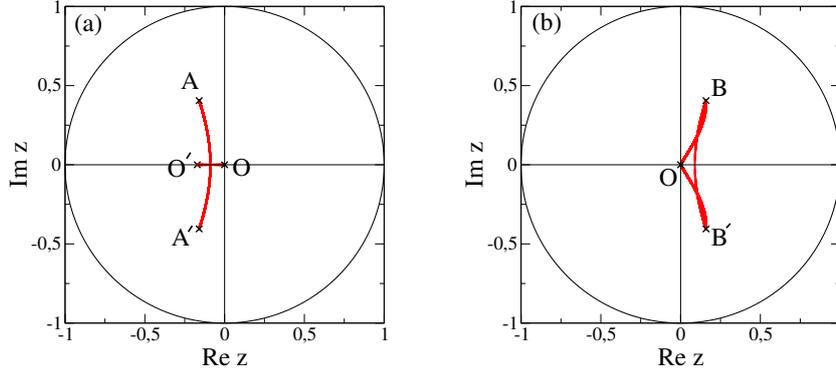


Figure 7: Lignes de coupure de l'intégrande de l'équation (65) dans le disque unité (trait rouge épais) dans le cas (a) $n = 0$ et (b) $n = 1$, obtenues numériquement pour un rapport de masse $\alpha = 1$ pris comme exemple.

où les lacets C_u et C_v entourent les demi-tangentes en question dans le sens trigonométrique dans l'espace des u ou des v . L'expression de C_0 est donnée dans l'équation (21). L'intégrale au dernier membre de (67) se calcule aisément :

$$\int_{C_v} \frac{dv}{v} e^{\ell C_0 v} F_0(1/v) = \int_{-\infty}^0 \frac{dx}{x} e^{\ell x C_0} \left[F_0\left(\frac{1}{x - i0^+}\right) - F_0\left(\frac{1}{x + i0^+}\right) \right] = \int_{-1}^0 \frac{dx}{x} e^{\ell x C_0} (-i\pi|x|^{1/2}) \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{i\pi^{3/2}}{\sqrt{\ell C_0}} \quad (68)$$

La corne A' d'affixe z_0^* donne une contribution complexe conjuguée de la corne A . Nous retrouvons la première partie de l'équation (20). \leftrightarrow Pour le calcul de I_1 au voisinage de z_1 , on procède de même, en posant $z = z_1(1 + \eta u)$, $\eta \rightarrow 0^+$. Cette fois le comportement local $f_1((z + 1/z)/2) \sim \mathcal{A}/(\mathcal{B}\eta u)^{1/2}$ admet lui-même une ligne de coupure à cause de la racine carrée et est caractérisé par deux amplitudes complexes \mathcal{A} et \mathcal{B} , d'où la structure à deux lignes de coupure, celle provenant de f_1 et celle provenant de $\arctan f_1$ dans $F_1(f_1)$,³⁰ approximée par deux demi-tangentes représentées dans l'espace des $v = \eta \mathcal{B} u / \mathcal{A}^2$ simplement par $\mathcal{A}^{-2} \mathbb{R}^-$ et, compte tenu de la note 28, par \mathbb{R}^- . Cette fois

$$I_1^{\odot} \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(z_1 - 1)z_1^\ell \mathcal{A}^2}{i\mathcal{B}w_1(\frac{z_1+1/z_1}{2})} \int_{C_v} dv e^{\ell \mathcal{A}^2 v / \mathcal{B}} \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v\mathcal{A}^2}} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v\mathcal{A}^2}} \right) \quad (69)$$

où le lacet C_v entoure (dans le troisième quadrant) la demi-droite $\mathcal{A}^{-2} \mathbb{R}^-$ dans le sens trigonométrique puis rejoint verticalement la demi-droite \mathbb{R}^- par en dessous pour l'entourer elle aussi dans le sens trigonométrique. Le calcul conduit à³¹

$$\int_{C_v} dv e^{\ell \mathcal{A}^2 v / \mathcal{B}} F_1\left(\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v\mathcal{A}^2}}\right) = \int_{-\infty}^0 \frac{dx}{\mathcal{A}^2} e^{\ell x / \mathcal{B}} \left[F_1\left(\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{x - i0^+}}\right) - F_1\left(\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{x + i0^+}}\right) \right] + \int_{-\infty}^0 dx e^{\ell \mathcal{A}^2 x / \mathcal{B}} \left[F_1\left(\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{(x - i0^+)\mathcal{A}^2}}\right) - F_1\left(\frac{\mathcal{A}}{\sqrt{(x + i0^+)\mathcal{A}^2}}\right) \right] \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \int_{-\infty}^0 \frac{dx}{\mathcal{A}} e^{\ell x / \mathcal{B}} \frac{i\pi}{\sqrt{-x}} + \int_{-\infty}^0 dx e^{\ell \mathcal{A}^2 x / \mathcal{B}} \frac{(-i\pi)}{\sqrt{-x}} = \frac{i\pi^{3/2}}{\sqrt{\ell}} \left(\frac{\sqrt{\mathcal{B}}}{\mathcal{A}} - \frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}^2/\mathcal{B}}} \right) = \frac{2i\pi^{3/2}\mathcal{B}}{\mathcal{A}\sqrt{\ell\mathcal{B}}} \quad (70)$$

ce qui redonne la seconde partie de l'équation (20), le coefficient \mathcal{B} étant appelé C_1 et donné par l'équation (21).

Annexe B. Approximant asymptotique de $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$, sa somme sur ℓ et ε

L'approximant asymptotique. Il s'agit ici d'écrire le plus explicitement possible une approximation $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ à grand ℓ de la contribution $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ de moment cinétique ℓ et de parité ε à la quantité $I_{2,2}(0^+)$ de l'équation (4). Nous prenons

30. Dans le cas précédent $n = 0$, ceci ne se produit pas : dans la fonction $F_0(z)$, de part et d'autre de la ligne de coupure \mathbb{R}^- de la racine carrée, on hésite certes entre deux valeurs opposées pour \sqrt{z} mais \arctan est une fonction impaire. Aussi la ligne de coupure de $F_0(z)$ est-elle dictée par la fonction \arctan et vaut $] -\infty, -1]$, en accord avec la note 28.

31. On vérifie en effet que $\sqrt{\mathcal{A}^2/\mathcal{B}} = -\mathcal{A}/\sqrt{\mathcal{B}}$ pour tout rapport de masse α .

comme point de départ les développements (38,42) selon la valeur de ε . Leur report dans l'intégrande de (4) conduit, après intégration sur S , à la structure

$$J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+) = \mathcal{J}_{K_1,K_2}^{(\ell,\varepsilon)} + \delta_{\varepsilon,(-1)^\ell} \left[\mathcal{J}_{K_1,K_3}^{(\ell)} + \mathcal{J}_{K_2,K_3}^{(\ell)} \right] \quad (71)$$

où l'indice indique qu'il s'agit d'une contribution croisée des noyaux intégraux K_i et K_j . Le cas $(i, j) = (1, 2)$ a été traité dans la référence [40] pour $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$, en utilisant les formes (36) des noyaux; nous nous contentons ici de l'étendre au cas $\varepsilon = (-1)^\ell$, ce qui n'est qu'un jeu d'écriture, et de recopier le résultat :

$$\mathcal{J}_{K_1,K_2}^{(\ell,\varepsilon)} = \int_{\mathbb{R}} dx \int_{-1}^1 du du' \int_0^{2\pi} \frac{d\phi d\phi'}{(2\pi)^2} \frac{[(2\ell+1)/(4\pi)^2][\text{ch } x \mathcal{D}_{2,2}(x, u) \mathcal{D}_{2,2}(x, u')]^{-1} \mathcal{T}^{(\ell,\varepsilon)}(\theta, \theta'; \phi, \phi')}{\left\{ 1 + \frac{1}{1+\alpha} [(u+e^{-x})(u'+e^{-x}) + vv' \cos \phi] \right\} \left\{ 1 + \frac{\alpha}{1+\alpha} [(u+e^x)(u'+e^x) + vv' \cos \phi'] \right\}} \quad (72)$$

avec les notations (17) et (48). Le cas $(i, j) = (1, 3)$ est beaucoup plus simple à traiter (en particulier numériquement) en utilisant les formes (96) des noyaux, repérées par un accent tchèque. Un seul facteur dépend de l'exposant d'échelle iS , sur lequel il faut intégrer dans (4). Dans les notations de (96) il vient après une intégration par parties :

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dS}{2\pi} (|z'_1|/|z_1|)^{iS} = 2\delta(\ln|z'_1|^2 - \ln|z_1|^2) = 2|z_1||z'_1| \delta(|z_1|^2 - |z'_1|^2) = 2|z_1||z'_1| \delta(e^{2x} - e^{2x'} - \sqrt{2\alpha}e^x u + \sqrt{2\alpha}e^x u') \quad (73)$$

Nous décidons d'intégrer la distribution de Dirac sur u' à u, x, x' fixés, ce qui lie la valeur de u' à ces autres variables :

$$u' = e^{x-x'} u + \frac{e^{2x'} - e^{2x}}{\sqrt{2\alpha}e^x} \quad (74)$$

Comme u' doit être compris entre -1 et 1 , l'intervalle d'intégration sur u est contraint et se réduit à $[u_{\min}, u_{\max}]$ avec

$$u_{\min} = \max\left(-1, \frac{e^{2x} - e^{2x'}}{\sqrt{2\alpha}e^x} - e^{x'-x}\right) \quad ; \quad u_{\max} = \min\left(1, \frac{e^{2x} - e^{2x'}}{\sqrt{2\alpha}e^x} + e^{x'-x}\right) \quad ; \quad u_{\min} < u_{\max} \Leftrightarrow |e^{x'} - e^x| < \sqrt{2\alpha} \quad (75)$$

Pour calculer le noyau resommé (41), nous reconnaissons dans la partie externe de \check{K}_3 (dernière contribution de (96)) une forme factorisée en un opérateur sur l'espace des x et un projecteur orthogonal de rang un sur l'espace des u , ce qui réduit le problème à l'inversion d'un opérateur sur l'espace des x seulement :³²

$$\check{K}_3^{\text{ext}} = \hat{k} \otimes |\chi\rangle\langle\chi| \quad \text{et} \quad \langle\chi|\chi\rangle = 1 \implies \check{K}_3^{\text{ext}} = [\mathbb{I} - (\mathbb{I} + \hat{k})^{-1}] \otimes |\chi\rangle\langle\chi| \quad (76)$$

avec

$$\langle u|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \langle x|\hat{k}|x'\rangle = \frac{(-1)^{l+1}}{\pi} \frac{2e^{x+x'}}{e^{2x} + e^{2x'} + 1} \frac{1}{(1 + e^{-2x})^{1/4}(1 + e^{-2x'})^{1/4}} \quad (77)$$

Nous obtenons finalement

$$\mathcal{J}_{K_1,K_3}^{(\ell)} = \frac{(1+\alpha)^3}{8\pi\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{\mathcal{R}(x, x') \langle x'|\mathbb{I} - (\mathbb{I} + \hat{k})^{-1}|x\rangle}{(1 + e^{-2x})^{1/4}(1 + e^{-2x'})^{1/4}} \quad (78)$$

où nous avons introduit la fonction symétrique de x et x' tenant compte de (75) par une fonction de Heaviside Y :

$$\mathcal{R}(x, x') \equiv Y(\sqrt{2\alpha} - |e^{x'} - e^x|) \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} du \frac{e^x}{|z_1|} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \frac{(2\ell+1)\langle l, m_x = 0 | e^{i\tau_1 L_z / \hbar} e^{i\phi L_x / \hbar} e^{-i\tau'_1 L_z / \hbar} | l, m_x = 0 \rangle}{|z_2|^2 + |z'_2|^2 + (1+\alpha^{-1})(\cos \tau_1 \cos \tau'_1 + \sin \tau_1 \sin \tau'_1 \cos \phi)} \quad (79)$$

Les nombres complexes z_i et z'_i et leurs arguments τ_i et τ'_i sont définis après l'équation (94) en fonction des angles θ et θ' dans l'intervalle $[0, \pi]$ tels que $u = \cos \theta$ et $u' = \cos \theta'$, l'angle θ' étant relié à θ par l'équation (74); l'écriture du dénominateur de l'intégrande dans (79) tient compte de l'égalité des modules $|z'_1| = |z_1|$.³³ Enfin, la dernière contribution dans (71) se déduit de la seconde contribution en changeant partout α en son inverse $1/\alpha$:

$$\mathcal{J}_{K_2,K_3}^{(\ell)}(\alpha) = \mathcal{J}_{K_1,K_3}^{(\ell)}(1/\alpha) \quad (80)$$

32. Il n'y a pas ici de changement de jauge de type (39) à effectuer car \check{K}_3 est directement indépendant de l'exposant d'échelle. On remarque aussi sur l'équation (95) que $\check{D}_{22} \equiv 1$.

33. En pratique, l'intégrale angulaire dans (79) est faite numériquement sur l'angle θ (plutôt que sur u) avec la méthode de Gauss-Legendre à 41 points; si x est assez proche mais distinct du point de singularité $x_{\text{sing}} = \ln \sqrt{\alpha/2}$ où le premier dénominateur $|z_1|$ peut s'annuler, c'est-à-dire

Sa somme sur ℓ et ε . Il reste à calculer la somme sur toutes les voies (ℓ, ε) de l'approximant asymptotique (71). La contribution de type K_1K_2 se traite exactement comme dans l'Annexe A :

$$\begin{aligned} \sum_{\ell \in \mathbb{N}} \sum_{\varepsilon} \mathcal{J}_{K_1, K_2}^{(\ell, \varepsilon)} &= \int_{\mathbb{R}} dx \int_{-1}^1 du \frac{[8\pi^2 \operatorname{ch} x \mathcal{D}_{2,2}^2(x, u)]^{-1}}{\left[1 + \frac{1}{1+\alpha}(1 + e^{-2x} + 2ue^{-x})\right] \left[1 + \frac{\alpha}{1+\alpha}(1 + e^{2x} + 2ue^x)\right]} \\ &= \frac{(1+\alpha)^2}{8\pi^2\alpha} \left\{ 2\pi \arcsin\left(\frac{\alpha}{(1+2\alpha)(\alpha+2)}\right)^{1/2} - \operatorname{Re} \left[g_2\left(\frac{2z}{1+z}\right) - g_2\left(\frac{-2z}{1-z}\right) + g_2\left(\frac{2}{1-z}\right) - g_2\left(\frac{2}{1+z}\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 2g_2\left(\frac{1}{z}\right) - 2g_2\left(\frac{-1}{z}\right) \right] - \operatorname{Re} \left[g_2\left(\frac{2z'}{1+z'}\right) - g_2\left(\frac{-2z'}{1-z'}\right) + g_2\left(\frac{2}{1-z'}\right) - g_2\left(\frac{2}{1+z'}\right) + 2g_2\left(\frac{1}{z'}\right) - 2g_2\left(\frac{-1}{z'}\right) \right] \right\} \quad (81) \end{aligned}$$

avec $z = \sqrt{\alpha} + i\sqrt{1+\alpha}$, $z' = \sqrt{\alpha^{-1}} + i\sqrt{1+\alpha^{-1}}$ et g_2 la fonction dilogarisme. Dans la contribution de type K_1K_3 , sommons dans un premier temps sur les moments cinétiques ℓ de parité donc de $(-1)^\ell = \eta$ fixés, afin que l'opérateur \hat{k} dans (78) prenne la valeur fixe \hat{k}_η . Transformons la moyenne quantique dans l'état $|\ell, m_x = 0\rangle$ au numérateur de l'intégrande de (79) en injectant une relation de fermeture sur les états propres de L_x et en utilisant l'expression des éléments de matrice correspondants déduite des équations (7.2–9) page 101, (7.3–15) page 105 et (7.4–7) page 109 de la référence [53] :

$$\langle \ell, m_x = 0 | e^{i\tau L_z/\hbar} | \ell, m_x \rangle e^{i\psi m_x} = \left(\frac{4\pi}{2\ell + 1} \right)^{1/2} Y_\ell^{m_x}(\tau, \psi) \quad \forall \tau \in [0, \pi], \forall \psi \in \mathbb{R} \quad (82)$$

où Y_ℓ^m est l'habituelle harmonique sphérique, ce qui conduit à ^{34 35}

$$(2\ell + 1) \langle \ell, m_x = 0 | e^{i\tau_1 L_z/\hbar} e^{i\phi L_x/\hbar} e^{-i\tau'_1 L_z/\hbar} | \ell, m_x = 0 \rangle = 4\pi \sum_{m_x = -\ell}^{\ell} Y_\ell^{m_x}(\tau_1, \phi) [Y_\ell^{m_x}(\tau'_1, 0)]^* \quad (83)$$

$0 < |x - x_{\text{sing}}| < \theta_c$ avec $\theta_c = 0,15$ par exemple, une structure étroite en θ apparaît et l'intégration sur $[\theta_{\min}, \theta_c]$ est effectuée avec le changement de variable $\theta = |x - x_{\text{sing}}| \operatorname{sh} t$, avec la méthode du point milieu sur la variable t discrétisée en 100 points équidistants. En revanche, le second dénominateur dans (79) reste toujours supérieur à $1 + \min(\alpha, \alpha^{-1})$ sur le domaine d'intégration et ne peut s'annuler. L'intégration sur x et x' est faite avec la méthode du point milieu sur un intervalle de troncature $[x_{\min}, x_{\max}]$, en s'arrangeant pour que x_{sing} soit le bord de l'un des sous-intervalles de largeur dx ; on fait le choix fixe $x_{\min} = -5$ car $\mathcal{R}(x, x') = O(\min(\exp(x), \exp(x')))$ lorsque $x, x' \rightarrow -\infty$, mais on extrapole à $x_{\max} = +\infty$ cubiquement en $1/x_{\max}$ à partir des quatre valeurs $x_{\max}^{(0)} = 7$, $x_{\max}^{(1)} = 30$, $x_{\max}^{(2)} = 52$ et $x_{\max}^{(3)} = 75$. Pour tirer parti du fait que $\mathcal{R}(x, x') = O(\exp(-2x))$ sur un support de plus en plus étroit $x - x' = O(\exp(-x))$ lorsque $x \rightarrow +\infty$, on sépare la matrice A , version discrétisée de l'opérateur $\mathbb{1} + \hat{k}$, en blocs A_{ij} entre les intervalles numéro un $[x_{\min}, x_{\max}^{(0)}]$ et numéro deux $[x_{\max}^{(0)}, x_{\max}^{(n)}]$, on néglige les blocs 12, 21 et 22 de son inverse A^{-1} et on calcule son bloc 11 par l'expression $(A^{-1})_{11} = [A_{11} - A_{12}(A_{22})^{-1}A_{21}]^{-1}$ qui inclut l'effet du couplage non diagonal sous forme d'un hamiltonien effectif du second ordre (il serait incorrect de le négliger complètement car $\langle x|\hat{k}|x'\rangle$ ne tend pas vers zéro lorsque $x, x' \rightarrow +\infty$ à $x - x'$ fixé). Comme la fonction $\mathcal{R}(x, x')$ présente près de $x = x' = x_{\text{sing}}$ à gauche des oscillations de plus en plus rapides lorsque ℓ augmente, on ne peut pas prendre une valeur fixe du pas dx mais on doit utiliser une méthode itérative de type Romberg : à partir du choix initial $dx = 1/20$, on réduit le pas dx d'un facteur 2 et on extrapole à pas nul linéairement en $(dx)^2$ jusqu'à ce que la valeur extrapolée soit stable au pour cent près (ou que dx descende en dessous de la valeur très faible 2×10^{-3}). L'élément de matrice dans $|\ell, m_x = 0\rangle$ est calculé comme avant l'équation (52) avec les mêmes astuces de symétrie que dans la note 23 et l'intégrale sur ϕ est déduite de l'équation (52).

34. On utilise la relation (82) deux fois, sous sa forme directe avec $(\tau, \psi) = (\tau_1, \phi)$ et sous sa forme conjuguée avec $(\tau, \psi) = (\tau'_1, 0)$. Si τ_1 se trouve dans $[-\pi, 0]$, la relation ne s'applique pas, mais il suffit alors de changer τ_1 en $-\tau_1$, ce qui revient à changer la variable d'intégration ϕ en $\phi + \pi$ dans (79) (en effet, $\exp(-i\tau_1 L_z/\hbar) = \exp(i\pi L_x/\hbar) \exp(i\tau_1 L_z/\hbar) \exp(i\pi L_x/\hbar)$) mais ne modifie pas la valeur de l'intégrale. On procède de même si $\tau'_1 \in [-\pi, 0]$. Dans la suite, nous pouvons donc supposer que τ_1 et τ'_1 sont dans l'intervalle $[0, \pi]$.

35. En utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques, voir l'équation (8.6–3) page 145 de la référence [53], on montre que le second membre de (83) s'écrit aussi $(2\ell + 1)P_\ell(\cos \delta)$ où P_ℓ est un polynôme de Legendre et δ est l'angle entre les vecteurs unitaires de coordonnées polaires (τ_1, ϕ) et $(\tau'_1, 0)$; son cosinus $\cos \delta = \cos \tau_1 \cos \tau'_1 + \sin \tau_1 \sin \tau'_1 \cos \phi$ apparaît justement au dénominateur de l'intégrande de (79).

Il reste à invoquer la relation de fermeture (8.6–10) page 146 de la référence [53] sur les harmoniques sphériques et la propriété de parité spatiale $Y_\ell^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi)$ pour obtenir la relation de fermeture à parité de ℓ fixée :³⁶

$$\begin{aligned} \sum_{\ell \geq 0} \sum_{(-1)^\ell = \eta} \sum_{m_x = -\ell}^{\ell} Y_\ell^{m_x}(\tau_1, \phi) [Y_\ell^{m_x}(\tau'_1, 0)]^* &= \frac{1}{2} [\delta(\cos \tau_1 - \cos \tau'_1) \delta(\phi) + \eta \delta(\cos \tau_1 + \cos \tau'_1) \delta(\phi - \pi)] \\ &= \frac{|z_1|}{4} \left[\sqrt{2\alpha} e^{-2x} \delta(x - x') \delta(\phi) + \eta e^{-x} \delta(u - u_0) \delta(\phi - \pi) \right] \quad \text{où} \quad u_0 \equiv \frac{2\alpha + e^{2x} - e^{2x'}}{2\sqrt{2\alpha}e^x} \end{aligned} \quad (84)$$

où nous avons remplacé dans le troisième membre $\cos \tau_1 \pm \cos \tau'_1$ par sa valeur en nous souvenant que $|z_1| = |z'_1|$ et en utilisant (74). L'intégration sur ϕ est immédiate compte tenu de la note 36. Pour intégrer sur u , il faut savoir si la racine u_0 se trouve dans l'intervalle $[u_{\min}, u_{\max}]$. À cette fin, on partage le support de la fonction de Heaviside dans (79) en quatre zones distinctes : (i) $\exp(x) < \exp(x') < \exp(x) + \sqrt{2\alpha}$ et $\exp(x) + \exp(x') > \sqrt{2\alpha}$, (ii) $\exp(x') < \exp(x) < \exp(x') + \sqrt{2\alpha}$ et $\exp(x) + \exp(x') > \sqrt{2\alpha}$, (iii) $\exp(x) < \exp(x') < \sqrt{2\alpha} - \exp(x)$, (iv) $\exp(x') < \exp(x) < \sqrt{2\alpha} - \exp(x')$. En appelant u_{\min}^{exp} et u_{\max}^{exp} les expressions dépendant de x dans les définitions (75), on trouve qu'on a systématiquement $u_{\min} = -1 < u_0 < u_{\max} = u_{\max}^{\text{exp}}$ dans la zone (i), $u_{\min} = u_{\min}^{\text{exp}} < u_0 < u_{\max} = 1$ dans la zone (ii), $u_{\min} = -1 < u_{\max} = 1 < u_0$ dans la zone (iii), $u_{\min} = u_{\min}^{\text{exp}} < u_{\max} = u_{\max}^{\text{exp}} < u_0$ dans la zone (iv). Autrement dit, l'intégrale de $\delta(u - u_0)$ sur u vaut toujours un dans les deux premières zones et zéro dans les deux dernières. Nous en déduisons la somme de la quantité $\mathcal{R}(x, x')$ sur tous les ℓ de parité fixée :

$$S_\eta(x, x') = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \alpha e^{-2x} \ln \frac{e^{2x} + \sqrt{2/\alpha} e^x + \alpha^{-1} + 1/2}{e^{2x} - \sqrt{2/\alpha} e^x + \alpha^{-1} + 1/2} \delta(x - x') + \eta \frac{Y(\sqrt{2\alpha} - |e^x - e^{x'}|) Y(e^x + e^{x'} - \sqrt{2\alpha})}{e^{2x} + e^{2x'} + 1} \right] \quad (85)$$

Il reste à sommer sur $\eta = \pm 1$ pour arriver au résultat cherché :

$$\sum_{\ell=0}^{+\infty} \mathcal{J}_{K_1, K_3}^{(\ell)} = \frac{(1 + \alpha)^3}{8\pi\alpha^2} \sum_{\eta=\pm} \int_{\mathbb{R}^2} dx dx' \frac{S_\eta(x, x') (\mathbb{I} - (\mathbb{I} + \hat{k}_\eta)^{-1} |x\rangle}{(1 + e^{-2x})^{1/4} (1 + e^{-2x'})^{1/4}} \quad (86)$$

Répetons-le, l'opérateur \hat{k}_η se déduit de l'équation (77) en remplaçant au second membre $(-1)^{\ell+1}$ par $(-\eta)$; l'inversion numérique des opérateurs $\mathbb{I} + \hat{k}_\eta$ et l'intégration sur x et x' sont faites avec les mêmes techniques et astuces que dans la note 33 (en revanche, il n'y a plus d'intégration à faire sur u). Enfin, comme le montre l'équation (80), $\sum_{\ell \in \mathbb{N}} \mathcal{J}_{K_2, K_3}^{(\ell)}$ se déduit de l'expression (86) en changeant partout α en $1/\alpha$ (y compris dans $S_\eta(x, x')$).

Annexe C. L'opérateur $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}$ (iS) dans la formulation de la référence [52]

Pour obtenir l'opérateur $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}$ (iS) à la base de la conjecture (4,5) sur le coefficient d'amas $B_{2,2}(\bar{\omega})$ du système piégé, il faut d'abord écrire un ansatz de Faddeev pour un état propre du problème unitaire à 2+2 corps $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ d'énergie nulle et de quantité de mouvement nulle dans l'espace libre. Cet ansatz s'exprime en termes d'une fonction inconnue D de deux vecteurs d'onde. La prise en compte des conditions de contact de Wigner-Bethe-Peierls à deux corps $\uparrow\downarrow$ (comme dans la note 1) conduit à une équation intégrale sur cette fonction. Ensuite, on utilise l'invariance par rotation pour projeter l'équation sur le sous-espace de moment cinétique ℓ et de parité ε comme la référence [54] l'explique en détail. Enfin, on utilise l'invariance d'échelle du problème unitaire (en l'absence d'effet Efimov à trois corps) pour choisir une fonction D d'exposant d'échelle s bien défini. L'équation intégrale se résume alors à la condition $\det M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(s) = 0$ où $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(s)$ est un opérateur à noyau, qu'il reste à prolonger sur l'axe imaginaire pur $s = iS$ pour évaluer l'expression (4).

L'expression (34,35,36) de $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}$ (iS) correspond au choix de fonction inconnue $D(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4)$ où \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_4 sont les vecteurs d'onde de deux fermions de spins opposés, comme dans la référence [40] (les vecteurs d'onde \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_3

36. Dans les distributions de Dirac $\delta(\phi - \phi_0)$, ϕ a un sens modulo 2π ; on peut donc remplacer l'intervalle d'intégration arbitraire $[0, 2\pi]$ de l'équation (79) par l'intervalle de longueur 2π centré sur ϕ_0 .

disparaissent dans la prise de limite traduisant la condition de contact). L'équation intégrale de départ est donnée par l'équation (13) de la référence [40]. Un autre choix est fait dans la référence [52], correspondant au changement de fonction

$$D(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4) = F(\mathbf{u} \equiv -(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4), \mathbf{v} \equiv \frac{m_\downarrow \mathbf{k}_2 - m_\uparrow \mathbf{k}_4}{m_\uparrow + m_\downarrow}) \quad (87)$$

et ayant l'avantage de fournir une expression beaucoup plus simple du noyau intégral singulier K_3 , c'est-à-dire de la troisième contribution dans (36) (mais pas des noyaux K_1 et K_2 , ce qui justifie en définitive de garder (36) dans le calcul numérique de (4)). Au signe près, les nouvelles variables sont simplement le vecteur d'onde du centre de masse et du mouvement relatif des particules 2 et 4. Dans la suite, nous utilisons la notation $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$ pour abrégier.

Déroulons les étapes précédemment énoncées. L'équation intégrale s'écrit dans le paramétrage (87) [52]

$$\frac{\kappa}{4\pi} F(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \int \frac{d^3 u'}{(2\pi)^3} \left[\frac{F(\mathbf{u}', \mathbf{v}_{14})}{\kappa^2 + \sigma_{14}^2} + \frac{F(\mathbf{u}', \mathbf{v}_{23})}{\kappa^2 + \sigma_{23}^2} \right] - \int \frac{d^3 v'}{(2\pi)^3} \frac{F(-\mathbf{u}, -\mathbf{v}')}{\kappa^2 + v'^2} = 0 \quad (88)$$

avec les notations tirées de la référence [52],³⁷

$$\begin{aligned} \kappa &= \left(v^2 + \frac{2\alpha u^2}{(1+\alpha)^2} \right)^{1/2} ; & \sigma_{14} &= \mathbf{v} + \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \mathbf{u} + \mathbf{u}' ; & \mathbf{v}_{14} &= \mathbf{v} - \frac{\alpha}{1+\alpha} \mathbf{u} + \frac{\alpha}{1+\alpha} \mathbf{u}' ; \\ & & \sigma_{23} &= \mathbf{v} + \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \mathbf{u} - \mathbf{u}' ; & \mathbf{v}_{23} &= \mathbf{v} + \frac{\mathbf{u}}{1+\alpha} - \frac{\mathbf{u}'}{1+\alpha} \end{aligned} \quad (89)$$

en corrigeant ce qui nous semble être une erreur de signe dans le coefficient du vecteur \mathbf{k} (ici appelé \mathbf{u}') dans la définition de \mathbf{v}_{23} (troisième ligne et première colonne de la table III de cette référence) et dans l'expression de E_{coll} (notation non introduite ici) juste avant l'équation (141) de cette référence. Comme dans la référence [40], pour rendre plus simples les transformations à venir, nous adoptons une formulation variationnelle de l'équation (88), $\delta \mathcal{E} / \delta F^*(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0$ avec la fonctionnelle de F et F^* qui suit :

$$\mathcal{E} \equiv \int d^3 u d^3 v \frac{\kappa}{4\pi} F^*(\mathbf{u}, \mathbf{v}) F(\mathbf{u}, \mathbf{v}) + \int \frac{d^3 u d^3 v d^3 u' d^3 v'}{(2\pi)^3} F^*(\mathbf{u}, \mathbf{v}) F(\mathbf{u}', \mathbf{v}') \left[\frac{\delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v}_{14})}{\kappa^2 + \sigma_{14}^2} + \frac{\delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v}_{23})}{\kappa^2 + \sigma_{23}^2} - \varepsilon \frac{\delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}')}{\kappa^2 + v'^2} \right] \quad (90)$$

où la parité $\varepsilon = \pm 1$ de la solution a été introduite pour faire disparaître le signe $-$ devant \mathbf{u} et \mathbf{v}' dans $F(-\mathbf{u}, -\mathbf{v}')$. Tenons maintenant compte de l'invariance par rotation, en nous restreignant au sous-espace de moment cinétique total $\ell \in \mathbb{N}$, avec une composante de moment cinétique nulle selon l'axe de quantification Oz . La solution $F(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ s'exprime alors en termes de $2\ell + 1$ fonctions $f_{m_z}^{(\ell)}(u, v, w)$ ($-\ell \leq m_z \leq \ell$) de trois variables réelles seulement, les modules u et v des deux vecteurs et l'angle non orienté $\theta = \widehat{(\mathbf{u}, \mathbf{v})} \in [0, \pi]$ entre eux ou, ce qui revient au même, son cosinus $w = \cos \theta$; fixer la parité à ε revient à imposer $(-1)^{m_z} = \varepsilon$ donc à découpler le problème en ℓ et en $\ell + 1$ fonctions inconnues, ce que nous indiquons par un exposant ε sur le signe somme ci-dessous. Notre ansatz pour F est celui de l'équation (14) de la référence [40]. Nous l'insérons dans la fonctionnelle (90) et intégrons sur les variables autres que les arguments des fonctions $f_{m_z}^{(\ell)}$ de la même façon que dans cette référence. Par exemple, appliquons l'équation (45) de [40] à la dernière contribution de la fonctionnelle \mathcal{E} , celle comportant ε en facteur, qui donne naissance au noyau singulier K_3 . On choisit d'abord un trièdre direct de référence \mathcal{T} d'axe polaire \mathbf{u} et un autre \mathcal{T}' d'axe polaire \mathbf{u}' . L'intégration sur \mathbf{v} (ou sur \mathbf{v}') est effectuée dans les coordonnées sphériques associées à \mathcal{T} (ou à \mathcal{T}'), le cosinus de l'angle polaire correspondant étant justement w (ou w'). Intégrer sur les autres variables revient alors à prendre la moyenne sur les orientations de \mathcal{T} et \mathcal{T}' ce qui peut se faire en fixant la direction du vecteur \mathbf{u} selon la direction commode Ox et en remplaçant l'intégration sur la direction de \mathbf{u}' par une intégration dans le groupe $\text{SO}(3)$ sur la rotation \mathcal{R} faisant passer de \mathcal{T} à \mathcal{T}' avec une mesure invariante, explicite $d\mathcal{R} = da(\sin b)dbdc/8\pi^2$ dans le paramétrage d'Euler $\mathcal{R} = \mathcal{R}_Z(a)\mathcal{R}_Y(b)\mathcal{R}_Z(c)$, où les angles a et c décrivent un intervalle de longueur 2π , l'angle b décrit $[0, \pi]$ et le

37. La référence [52] range les fermions dans l'ordre $\uparrow\downarrow\downarrow$. Nous renumérotions les particules en conséquence.

repère cartésien direct $OXYZ$ est d'orientation quelconque par rapport à celui de référence $Oxyz$ (voir la section 8.2 de la référence [53]); il en résulte que

$$\int \frac{d^3 u d^3 v d^3 u' d^3 v'}{(2\pi)^3} F^*(\mathbf{u}, \mathbf{v}) F(\mathbf{u}', \mathbf{v}') \frac{\delta(\mathbf{u} - \mathbf{u}')}{\kappa^2 + v'^2} = \sum_{m_z, m'_z} 2 \int_0^{+\infty} duu^2 dvv^2 du'u'^2 dv'v'^2 \int_{-1}^1 dw dw' f_{m_z}^{(l)*}(u, v, w) f_{m'_z}^{(l)}(u', v', w') \times \int_{\text{SO}(3)} d\mathcal{R}(\langle \ell, m_z | \mathcal{R} | \ell, m'_z \rangle)^* \frac{\delta(\mathbf{u}\mathbf{e}_x - \mathbf{u}'\mathcal{R}\mathbf{e}_x)}{v^2 + v'^2 + \frac{2\alpha u^2}{(1+\alpha)^2}} \quad (91)$$

où l'opérateur R représente la rotation \mathcal{R} dans l'espace des états d'une particule quantique. Le choix des axes $OZ = Oz$ et $OY = Ox$ conduit à $(\sin b)\delta(\mathbf{u}\mathbf{e}_x - \mathbf{u}'\mathcal{R}\mathbf{e}_x) = (\sin b)\delta(u\mathcal{R}_z(-a)\mathbf{e}_x - u'\mathcal{R}_x(b)\mathcal{R}_z(c)\mathbf{e}_x) = \delta(u \cos a - u' \cos c)\delta(-u \sin a - u' \sin c \cos b)\delta(-u' \sin c) = [\delta(u-u')/(uu')][\delta(a)\delta(c) + \delta(a-\pi)\delta(c-\pi)]$ où nous avons successivement utilisé l'invariance par rotation de la distribution de Dirac tridimensionnelle et décomposé son action en distributions de Dirac selon Ox , Oy et Oz . L'intégration dans $\text{SO}(3)$ se réduit simplement à la ligne $\mathcal{R} = \mathcal{R}_x(b)$ si $a = c = 0$ et à la ligne $\mathcal{R} = \mathcal{R}_x(-b)$ si $a = c = \pi$, ce dont on tient compte par une intégration sur b étendue à $[-\pi, \pi]$, ce qui fait apparaître un projecteur sur l'état de moment cinétique nul selon Ox , $\int_{-\pi}^{\pi} \frac{db}{2\pi} \langle \ell, m_z | e^{-ibL_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle = \langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle \langle \ell, m_x = 0 | \ell, m'_z \rangle$. Finalement

$$\mathcal{E} = \sum_{m_z} \int_0^{+\infty} duu^2 dvv^2 \int_{-1}^1 dw f_{m_z}^{(l)*}(u, v, w) f_{m_z}^{(l)}(u, v, w) \frac{1}{2} \left(v^2 + \frac{2\alpha u^2}{(1+\alpha)^2} \right)^{1/2} + \sum_{m_z, m'_z} \int_0^{+\infty} duu^2 dvv^2 du'u'^2 dv'v'^2 \times \int_{-1}^1 dw dw' f_{m_z}^{(l)*}(u, v, w) f_{m'_z}^{(l)}(u', v', w') \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(2\pi)^2} \left[\frac{\delta(|Z_1| - |Z'_1|)(|Z_1| |Z'_1|)^{-1} e^{iT_1 m_z} \langle \ell, m_z | e^{i\phi L_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle e^{-iT'_1 m'_z}}{|Z_2|^2 + |Z'_2|^2 + \frac{2uu'}{1+\alpha} (\cos T_1 \cos T'_1 + \sin T_1 \sin T'_1 \cos \phi)} + \frac{\delta(|Z_2| - |Z'_2|)(|Z_2| |Z'_2|)^{-1} e^{iT_2 m_z} \langle \ell, m_z | e^{i\phi L_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle e^{-iT'_2 m'_z}}{|Z_1|^2 + |Z'_1|^2 + \frac{2uu'}{1+\alpha} (\cos T_2 \cos T'_2 + \sin T_2 \sin T'_2 \cos \phi)} + \frac{(-\varepsilon)\delta(u-u') \langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle \langle \ell, m_x = 0 | \ell, m'_z \rangle}{uu' (v^2 + v'^2 + \frac{2\alpha u^2}{(1+\alpha)^2})} \right] \quad (92)$$

où nous avons introduit les nombres complexes $Z_1 \equiv \alpha u/(1+\alpha) - v \exp(i\theta) = |Z_1| \exp(iT_1)$, $Z_2 = u/(1+\alpha) + v \exp(i\theta) = |Z_2| \exp(iT_2)$ et leurs homologues pour les variables primées, $Z'_1 \equiv \alpha u'/(1+\alpha) - v' \exp(i\theta') = |Z'_1| \exp(iT'_1)$, $Z'_2 = u'/(1+\alpha) + v' \exp(i\theta') = |Z'_2| \exp(iT'_2)$. Enfin, tirons parti de l'invariance d'échelle au moyen de l'ansatz

$$f_{m_z}^{(l)}(u, v, w) = \frac{(\text{ch } x)^{s+3/2} (1 + e^{-2x})^{-s/2} \Phi_{m_z}^{(l)}(x, w)}{(u^2 + v^2/\zeta^2)^{(s+7/2)/2}} \quad \text{où } v = \zeta e^x u \quad \text{et } \zeta = \frac{\sqrt{2\alpha}}{1+\alpha} \quad (93)$$

choisi astucieusement pour que la partie diagonale de la fonctionnelle (première contribution dans (92)) devienne scalaire (indépendante de toute variable) et pour que la partie singulière (dernière contribution) ne dépende pas du rapport de masse ni même de l'exposant d'échelle s . L'intégration sur u fait sortir comme dans la référence [40] un facteur constant infini, ici $(\zeta^4/16) \int_0^{+\infty} du/u$, pour donner la fonctionnelle régularisée

$$\bar{\mathcal{E}} = \sum_{m_z} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-1}^1 dw \Phi_{m_z}^{(l)*}(x, w) \Phi_{m_z}^{(l)}(x, w) + \frac{2}{\zeta^3} \sum_{m_z, m'_z} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx' \int_{-1}^1 dw dw' \frac{e^{x+x'} \Phi_{m_z}^{(l)*}(x, w) \Phi_{m'_z}^{(l)}(x', w')}{(1 + e^{-2x})^{1/4} (1 + e^{-2x'})^{1/4}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(2\pi)^2} \left[\frac{(|z'_1|/|z_1|)^s (|z_1| |z'_1|)^{-1/2} e^{i\tau_1 m_z} \langle \ell, m_z | e^{i\phi L_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle e^{-i\tau'_1 m'_z}}{|z'_1|^2 |z_2|^2 + |z_1|^2 |z'_2|^2 + (1+\beta)(\text{Re } z_1 \text{ Re } z'_1 + \text{Im } z_1 \text{ Im } z'_1 \cos \phi)} + \frac{(|z'_2|/|z_2|)^s (|z_2| |z'_2|)^{-1/2} e^{i\tau_2 m_z} \langle \ell, m_z | e^{i\phi L_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle e^{-i\tau'_2 m'_z}}{|z'_2|^2 |z_1|^2 + |z_2|^2 |z'_1|^2 + (1+\alpha)(\text{Re } z_2 \text{ Re } z'_2 + \text{Im } z_2 \text{ Im } z'_2 \cos \phi)} + (-\varepsilon) \zeta^3 \frac{\langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle \langle \ell, m_x = 0 | \ell, m'_z \rangle}{e^{2x} + e^{2x'} + 1} \right] \quad (94)$$

où l'on a posé $\beta = 1/\alpha$, $z_1 \equiv (\alpha/2)^{1/2} - \exp(x+i\theta) = |z_1| \exp(i\tau_1)$, $z_2 \equiv (\beta/2)^{1/2} + \exp(x+i\theta) = |z_2| \exp(i\tau_2)$ et les relations équivalentes pour les variables primées, $z'_1 \equiv (\alpha/2)^{1/2} - \exp(x'+i\theta') = |z'_1| \exp(i\tau'_1)$, $z'_2 \equiv (\beta/2)^{1/2} + \exp(x'+i\theta') = |z'_2| \exp(i\tau'_2)$ et où l'on rappelle que $\theta = \arccos w$ et $\theta' = \arccos w'$. Une simple dérivation fonctionnelle de (94) par rapport à $\Phi_{m_z}^{(l)*}(x, w)$, la prise d'un exposant d'échelle imaginaire pur et le retour à la notation $u = \cos \theta$ du corps de

l'article donnent la nouvelle forme de l'opérateur $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$, repérée par un accent tchèque pour éviter toute confusion avec (34,35,36) :

$$\langle x, u | \langle \ell, m_z | \check{M}_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS) | f \rangle = f_{m_z}(x, u) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-1}^1 du' \sum_{m'_z | (-1)^{m'_z} = \varepsilon} \check{K}_{2,2}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) f_{m'_z}(x', u') \quad (95)$$

avec un noyau intégral séparé en trois contributions $\check{K} = \check{K}_1 + \check{K}_2 + \check{K}_3$ écrites ligne par ligne :

$$\begin{aligned} \check{K}_{2,2}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) = & \frac{2\zeta^{-3} e^{x+x'} (|z_1| |z'_1|)^{-1/2}}{(1 + e^{-2x})^{1/4} (1 + e^{-2x'})^{1/4}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(2\pi)^2} \frac{|z_1|^{-iS} e^{i\tau_1 m_z} \langle l, m_z | e^{i\phi L_x / \hbar} | l, m'_z \rangle e^{-i\tau'_1 m'_z} |z'_1|^{iS}}{|z'_1|^2 |z_2|^2 + |z_1|^2 |z'_2|^2 + (1+\beta)(\text{Re } z_1 \text{ Re } z'_1 + \text{Im } z_1 \text{ Im } z'_1 \cos \phi)} \\ & + \frac{2\zeta^{-3} e^{x+x'} (|z_2| |z'_2|)^{-1/2}}{(1 + e^{-2x})^{1/4} (1 + e^{-2x'})^{1/4}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{(2\pi)^2} \frac{|z_2|^{-iS} e^{i\tau_2 m_z} \langle l, m_z | e^{i\phi L_x / \hbar} | l, m'_z \rangle e^{-i\tau'_2 m'_z} |z'_2|^{iS}}{|z'_2|^2 |z_1|^2 + |z_2|^2 |z'_1|^2 + (1+\alpha)(\text{Re } z_2 \text{ Re } z'_2 + \text{Im } z_2 \text{ Im } z'_2 \cos \phi)} \\ & + \frac{(-1)^{\ell+1}}{\pi} \frac{e^{x+x'}}{e^{2x} + e^{2x'} + 1} \frac{\langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle \langle \ell, m_x = 0 | \ell, m'_z \rangle}{(1 + e^{-2x})^{1/4} (1 + e^{-2x'})^{1/4}} \quad (96) \end{aligned}$$

où l'on s'est souvenu que $\langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle = 0$ si $\varepsilon \neq (-1)^\ell$. Pour vérifier que l'équation (96) est écrite dans le même ordre que l'équation (36), c'est-à-dire que le noyau \check{K}_i est précisément le noyau K_i écrit dans la formulation de la référence [52], nous montrons numériquement que $\int_{\mathbb{R}} dS \text{Tr} [\mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_1(iS) \mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_3(iS)] = \int_{\mathbb{R}} dS \text{Tr} [\check{K}_1(iS) \check{K}_3]$.

Références

- [1] Y. Castin, F. Werner, « [The Unitary Gas and its Symmetry Properties](#) », in *BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi gas*, Springer Lecture Notes in Physics 836, édité par W. Zwerger (Springer, Berlin, 2011).
- [2] M. Randeria, E. Taylor, « [Crossover from Bardeen-Cooper-Schrieffer to Bose-Einstein Condensation and the Unitary Fermi Gas](#) », *Annual Review of Condensed Matter Physics* **5**, 209 (2014).
- [3] M.W. Zwierlein, J.R. Abo-Shaer, A. Schirotzek, C.H. Schunck, W. Ketterle, « [Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas](#) », *Nature* **435**, 1047 (2005).
- [4] L.A. Sidorenkov, M.K. Tey, R. Grimm, Y.-H. Hou, L. Pitaevskii, S. Stringari, « [Second sound and the superfluid fraction in a Fermi gas with resonant interactions](#) », *Nature* **498**, 78 (2013).
- [5] S. Nascimbène, N. Navon, K.J. Jiang, F. Chevy, C. Salomon, « [Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas](#) », *Nature* **463**, 1057 (2010).
- [6] M. Horikoshi, S. Nakajima, M. Ueda, T. Mukaiyama, « [Measurement of universal thermodynamic functions for a unitary Fermi gas](#) », *Science* **327**, 442 (2010).
- [7] M.J.H. Ku, A.T. Sommer, L.W. Cheuk, M.W. Zwierlein, « [Revealing the superfluid lambda transition in the universal thermodynamics of a unitary Fermi gas](#) », *Science* **335**, 563 (2012).
- [8] C. Kohstall, M. Zaccanti, M. Jag, A. Trenkwalder, P. Massignan, G. Bruun, F. Schreck, R. Grimm, « [Metastability and coherence of repulsive polarons in a strongly interacting Fermi mixture](#) », *Nature* **485**, 615 (2012).
- [9] C. Ravensbergen, E. Soave, V. Corre, M. Kreyer, B. Huang, E. Kirilov, R. Grimm, « [Resonantly Interacting Fermi-Fermi Mixture of \$^{161}\text{Dy}\$ and \$^{40}\text{K}\$](#) », *Phys. Rev. Lett.* **124**, 203402 (2020).
- [10] E. Neri, A. Ciamei, C. Simonelli, I. Goti, M. Inguscio, A. Trenkwalder, M. Zaccanti, « [Realization of a cold mixture of fermionic chromium and lithium atoms](#) », *Phys. Rev. A* **101**, 063602 (2020).
- [11] K. Van Houcke, F. Werner, E. Kozik, N. Prokof'ev, B. Svistunov, M.J.H. Ku, A. Sommer, L.W. Cheuk, A. Schirotzek, M.W. Zwierlein, « [Feynman diagrams versus Fermi-gas Feynman emulator](#) », *Nature Physics* **8**, 366 (2012).
- [12] R. Rossi, « [Contributions to unbiased diagrammatic methods for interacting fermions](#) », thèse de doctorat, Université Paris sciences et lettres, 2017, thèse en ligne tel-01704724v2.
- [13] K. Huang, *Statistical Mechanics*, seconde édition (Wiley, New York, 1987).
- [14] Xia-Ji Liu, « [Virial expansion for a strongly correlated Fermi system and its application to ultracold atomic Fermi gases](#) », *Physics Reports* **524**, 37-83 (2013).
- [15] Xia-Ji Liu, Hui Hu, « [Virial expansion for a strongly correlated Fermi gas with imbalanced spin populations](#) », *Phys. Rev. A* **82**, 043626 (2010).
- [16] R. Rossi, T. Ohgoe, K. Van Houcke, F. Werner, « [Resummation of Diagrammatic Series with Zero Convergence Radius for Strongly Correlated Fermions](#) », *Phys. Rev. Lett.* **121**, 130405 (2018).
- [17] E. Beth, G.K. Uhlenbeck, « [The quantum theory of the non-ideal gas I. Deviations from the classical theory](#) », *Physica* **3**, 729 (1936).
- [18] E. Beth, G.K. Uhlenbeck, « [The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures](#) », *Physica* **4**, 915 (1937).
- [19] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique statistique - 1ère partie*, troisième édition (éditions Mir, Moscou, 1984).
- [20] Y. Castin, F. Werner, « [Le troisième coefficient du viriel du gaz de Bose unitaire](#) », *Rev. can. phys.* **91**, 382 (2013).
- [21] Chao Gao, Shimpei Endo, Y. Castin, « [The third virial coefficient of a two-component unitary Fermi gas across an Efimov-effect threshold](#) », *EPL* **109**, 16003 (2015).

- [22] P.C. Hemmer, « [The hard core quantum gas at high temperatures](#) », Phys. Lett. **27A**, 377 (1968).
- [23] B. Jancovici, « [Quantum-Mechanical Equation of State of a Hard-Sphere Gas at High Temperature](#) », Phys. Rev. **178**, 295 (1969).
- [24] B. Jancovici, « [Quantum-Mechanical Equation of State of a Hard-Sphere Gas at High Temperature. II](#) », Phys. Rev. **184**, 119 (1969).
- [25] B. Jancovici, S. Merkuriev, « [Quantum-mechanical third virial coefficient of a hard-sphere gas at high temperature](#) », Phys. Rev. A **12**, 2610 (1975).
- [26] T.D. Lee, C.N. Yang, « [Many-Body Problem in Quantum Statistical Mechanics. II. Virial Expansion for Hard-Sphere Gas](#) », Phys. Rev. **116**, 25 (1959).
- [27] A. Pais, G.E. Uhlenbeck, « [On the Quantum Theory of the Third Virial Coefficient](#) », Phys. Rev. **116**, 250 (1959).
- [28] S.K. Adhikari, R.D. Amado, « [Low-Temperature Behavior of the Quantum Cluster Coefficients](#) », Phys. Rev. Lett. **27**, 485 (1971).
- [29] W.G. Gibson, « [Low-Temperature Expansion of the Third-Cluster Coefficient of a Quantum Gas](#) », Phys. Rev. A **6**, 2469 (1972).
- [30] A. Comtet, Y. Georgelin, S. Ouvry, « [Statistical aspects of the anyon model](#) », J. Phys. A **22**, 3917 (1989).
- [31] J. McCabe, S. Ouvry, « [Perturbative three-body spectrum and the third virial coefficient in the anyon model](#) », Phys. Lett. B **260**, 113 (1991).
- [32] Xia-Ji Liu, Hui Hu, P.D. Drummond, « [Virial Expansion for a Strongly Correlated Fermi Gas](#) », Phys. Rev. Lett. **102**, 160401 (2009).
- [33] Xia-Ji Liu, Hui Hu, P.D. Drummond, « [Three attractively interacting fermions in a harmonic trap: Exact solution, ferromagnetism, and high-temperature thermodynamics](#) », Phys. Rev. A **82**, 023619 (2010).
- [34] F. Werner, Y. Castin, « [Unitary gas in an isotropic harmonic trap: Symmetry properties and applications](#) », Phys. Rev. A **74**, 053604 (2006).
- [35] V. Efimov, « [Energy levels of three resonantly interacting particles](#) », Nucl. Phys. A **210**, 157 (1973).
- [36] F. Werner, Y. Castin, « [Unitary Quantum Three-Body Problem in a Harmonic Trap](#) », Phys. Rev. Lett. **97**, 150401 (2006).
- [37] S.T. Rittenhouse, N.P. Mehta, C.H. Greene, « [Green's functions and the adiabatic hyperspherical method](#) », Phys. Rev. A **82**, 022706 (2010).
- [38] Y. Castin, E. Tignone, « [Trimers in the resonant \(2+1\)-fermion problem on a narrow Feshbach resonance: Crossover from Efimovian to hydrogenoid spectrum](#) », Phys. Rev. A **84**, 062704 (2011).
- [39] Y. Castin, C. Mora, L. Pricoupenko, « [Four-Body Efimov Effect for Three Fermions and a Lighter Particle](#) », Phys. Rev. Lett. **105**, 223201 (2010).
- [40] Shimpei Endo, Y. Castin, « [Absence of a four-body Efimov effect in the 2+2 fermionic problem](#) », Phys. Rev. A **92**, 053624 (2015).
- [41] Shimpei Endo, Y. Castin, « [The interaction-sensitive states of a trapped two-component ideal Fermi gas and application to the virial expansion of the unitary Fermi gas](#) », J. Phys. A **49**, 265301 (2016).
- [42] Y. Yan, D. Blume, « [Path integral Monte Carlo Determination of the Fourth-Order Virial Coefficient for Unitary Two-Component Fermi Gas with Zero-Range Interactions](#) », Phys. Rev. Lett. **116**, 230401 (2016).
- [43] Y. Hou, K.J. Morrell, A.J. Czejdo, J.E. Drut, « [Fourth- and fifth-order virial expansion of harmonically trapped fermions at unitarity](#) », Phys. Rev. Research **3**, 033099 (2021).
- [44] A.J. Czejdo, J.E. Drut, Yaqi Hou, K.J. Morrell, « [Toward an automated-algebra framework for high orders in the virial expansion of quantum matter](#) », Condens. Matter **7**, 13 (2022).
- [45] Y. Hou, J.E. Drut, « [Fourth- and Fifth-Order Virial Coefficients from Weak Coupling to Unitarity](#) », Phys. Rev. Lett. **125**, 050403 (2020).
- [46] D.S. Petrov, « [Three-body problem in Fermi gases with short-range interparticle interaction](#) », Phys. Rev. A **67**, 010703 (2003).
- [47] Shimpei Endo, Y. Castin, « [The interaction-sensitive states of a trapped two-component ideal Fermi gas and application to the virial expansion of the unitary Fermi gas](#) », post-publication hal-01246611v5 (2021).
- [48] A.L. Gaunt, T.F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R.P. Smith, Z. Hadzibabic, « [Bose-Einstein condensation of atoms in a uniform potential](#) », Phys. Rev. Lett. **110**, 200406 (2013).
- [49] B. Mukherjee, Zhenjie Yan, P.B. Patel, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, J. Struck, M.W. Zwierlein, « [Homogeneous Atomic Fermi Gases](#) », Phys. Rev. Lett. **118**, 123401 (2017).
- [50] Tin-Lun Ho, Qi Zhou, « [Obtaining the phase diagram and thermodynamic quantities of bulk systems from the densities of trapped gases](#) », Nature Physics **6**, 131 (2010).
- [51] R. Dum, M. Olshanii, « [Gauge Structures in Atom-Laser Interaction: Bloch Oscillations in a Dark Lattice](#) », Phys. Rev. Lett. **76**, 1788 (1996).
- [52] L. Pricoupenko, « [Isotropic contact forces in arbitrary representation: Heterogeneous few-body problems and low dimensions](#) », Phys. Rev. A **83**, 062711 (2011).
- [53] Wu-Ki Tung, *Group Theory in Physics* (World Scientific, Philadelphia, 1985).
- [54] C. Mora, Y. Castin, L. Pricoupenko, « [Integral equations for the four-body problem](#) », Comptes Rendus Physique **12**, 71 (2011).