

Résolution de l'équation de Schrödinger à 3 corps par la méthode des coordonnées hypersphériques

Directeurs du projet :

Pr. Daniel Baye

Pr. Pierre Descouvemont

<http://lpsc.in2p3.fr/fuks/> rubrique *Documents et Seminars*

Table des matières

1. **La méthode des coordonnées hypersphériques**
2. Méthodes numériques
3. Exemple 1 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$
4. Exemple 2 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$
5. Conclusion

Méthode des coordonnées hypersphériques

- Point de départ : l'équation de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi \quad \text{avec} \quad H = T + \sum_{i < j} V_{ij}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) = T + V$$

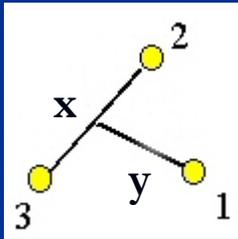
Remarque : on va négliger toute interaction à plus de deux corps

Idée : développer la fonction d'onde sur une base particulière : la base des harmoniques hypersphériques

- ➔ Transformation d'une équation différentielle à une fonction inconnue en un système d'équations
- ➔ 1^{ère} étape : changement du système de coordonnées

Méthode des coordonnées hypersphériques

- 1^{ère} étape : changement du système de coordonnées
 - Coordonnées de Jacobi



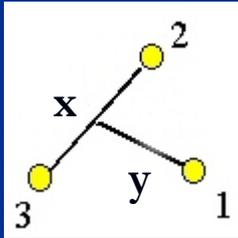
$$\mathbf{x}_k = \sqrt{\frac{m_i m_j}{m_i + m_j}} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$$

$$\mathbf{y}_k = \sqrt{\frac{m_k (m_i + m_j)}{M}} \left(\mathbf{r}_k - \frac{m_i \mathbf{r}_i + m_j \mathbf{r}_j}{m_i + m_j} \right)$$

- ➔ 3 jeux de coordonnées différents !
- ➔ On s'affranchit des masses absolues des particules
- ➔ 2 variables métriques + 4 variables angulaires
- ➔ Idée : n'obtenir plus qu'une seule variable métrique

Méthode des coordonnées hypersphériques

- 1^{ère} étape : changement du système de coordonnées
 - Coordonnées hypersphériques



$$\rho^2 = \mathbf{x}_k^2 + \mathbf{y}_k^2 = \sum_{i=1}^3 \left(1 - \frac{m_i}{M}\right) \mathbf{x}_i^2$$

$$\alpha_k = \arctg \frac{y_k}{x_k}$$

$$\Omega_x, \Omega_y$$

→ 1 variable métrique

→ 5 variables angulaires = Ω_5

→ 2^{ème} étape : réécriture de l'hamiltonien dans ce système de coordonnées

Méthode des coordonnées hypersphériques

- 2^{ème} étape : transformation de l'hamiltonien
 - Énergie cinétique en coordonnées hypersphériques

$$T = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} \quad \text{avec} \quad \mathbf{p}_i = -i\hbar \nabla_i$$

$$\text{Or} \quad \frac{\partial}{\partial r_i} = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial x_j}{\partial r_i} \cdot \frac{\partial}{\partial x_j}$$

$$\rightarrow T = T_{CM} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{K^2(\Omega_{5k})}{\rho^2} \right)$$

L'opérateur $\mathbf{K}^2(\Omega_5)$ ne dépend que des variables angulaires

Méthode des coordonnées hypersphériques

- 2^{ème} étape : transformation de l'hamiltonien
 - Énergie potentielle

$$V = \sum_k V_k \left(\frac{\rho \cos \alpha_k}{\sqrt{\mu_{ij}}} \right)$$

- ➔ 3 jeu de coordonnées hypersphériques différents !!!
- ➔ on peut passer *facilement* de l'un à l'autre
- ➔ 3^{ème} étape : définition de la base utilisée pour la fonction d'onde

Méthode des coordonnées hypersphériques

■ 3^{ème} étape : base des harmoniques hypersphériques

- Base orthonormées de fonctions propres de l'opérateur $\mathbf{K}^2(\Omega_5)$, de valeur propre $K(K+4)$

- $Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega_5)$

- $Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_5) = \sum_{m_x, m_y} \left(l_x l_y m_x m_y | LM_L \right) Y_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega_5)$

- $Y_{\gamma K}^{JM}(\Omega_5) = \sum_{M_L, M_S} \left(LSM_L M_S | JM \right) Y_{KLM_L}^{l_x l_y}(\Omega_5) \chi^{SM_S}$

→ Développement de la fonction d'onde dans cette base

Méthode des coordonnées hypersphériques

■ 4^{ème} étape : système d'équations hypersphériques

■ Fonction d'onde :

$$\Psi = \rho^{-5/2} \sum_{\gamma K} \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) Y_{\gamma K}^{JM}(\Omega_5)$$

■ Équation de Schrödinger :

$$\left[T + \sum_{i < j} V_{ij} \left(\frac{x_k}{\sqrt{\mu_{ij}}} \right) \right] \Psi = E \Psi \quad \text{avec} \quad T = T_{CM} - \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{K^2(\Omega_{5k})}{\rho^2} \right)$$

$$V = \sum_k V_k \left(\frac{\rho \cos \alpha_k}{\sqrt{\mu_{ij}}} \right)$$

Méthode des coordonnées hypersphériques

■ 4^{ème} étape : système d'équations hypersphériques

- Système d'équations $(\nabla\gamma, K)$:

$$\left[\frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

$$W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) = \int_{\Omega_5} Y_{\gamma K}^{JM*}(\Omega_5) V Y_{\gamma' K'}^{J'M'}(\Omega_5) d\Omega_5$$

- Problème du potentiel ?

Méthode des coordonnées hypersphériques

- 4^{ème} étape : système d'équations hypersphériques

$$W_{K'\gamma',K\gamma}(\rho) = \sum_{k=1}^3 \int_{\Omega_5} Y_{\gamma K}^{JM*}(\Omega_5) V_k \left(\frac{\rho \cos \alpha_k}{\sqrt{\mu_{ij}}} \right) Y_{\gamma'K'}^{J'M'}(\Omega_5) d\Omega_5$$

- Les coefficients de Raynal-Revai :

$$Y_{\gamma K}^{JM}(\Omega_{5j}) = \sum_{l_x' l_y'} \langle l_x' l_y' | l_x l_y \rangle Y_{\gamma'K'}^{J'M'}(\Omega_5)$$

Table des matières

1. La méthode des coordonnées hypersphériques
2. **Méthodes numériques**
3. Exemple 1 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$
4. Exemple 2 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$
5. Conclusion

Méthodes numériques

■ Système à résoudre

$$\left[\frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

$$W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) = \int_{\Omega_5} Y_{\gamma K}^{JM*}(\Omega_5) V Y_{\gamma' K'}^{J'M'}(\Omega_5) d\Omega_5$$

■ Calculs des coefficients W

- Intégration analytique sur Ω_x et Ω_y
- Intégration numérique par quadrature de Gauss sur α

Méthode des coordonnées hypersphériques

■ Résolution du système

$$\left[\frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

- Système infini d'équations à une infinité d'inconnue
 - ➔ On fixe une valeur K_{MAX}
 - ➔ Nombre fini d'équations et d'inconnues

 - Résolution numérique par la méthode des réseaux de Lagrange :
 - Développement de $\chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho)$ sur la base de Lagrange-Laguerre régularisée
 - Les coefficients de ce développement sont des nombres
- ➔ Système d'algébrique d'équations

Méthode des coordonnées hypersphériques

■ Résolution du système

$$\left[\frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

■ Ordre de grandeur

- Cas des hypernoyaux étudiés :

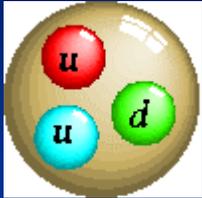
$K_{\text{MAX}}=20$ ou $26 \rightarrow \approx 100$ harmoniques hypersphériques et 3000 fonctions de base

Table des matières

1. La méthode des coordonnées hypersphériques
2. Méthodes numériques
3. **Exemple 1 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$**
4. Exemple 2 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$
5. Conclusion

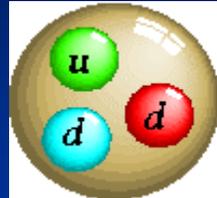
Les hypernoyaux

■ Baryons fondamentaux



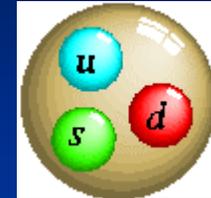
Proton

$$m_p = 938,272 \text{ MeV}$$



Neutron

$$m_n = 939,565 \text{ MeV}$$



Lambda

$$m_\Lambda = 1115,683 \text{ MeV}$$

$n + p \rightarrow$ noyaux, matière nucléaire ordinaire

$n + p + \Lambda \rightarrow$ hypernoyaux, matière étrange

Réf : *Particle Data Group : Phys. Rev. D* **66**, 010001 (2002).

Étude du ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$

■ Composition

$$2n + 2p + 2\Lambda$$

Hypothèse : $2n + 2p \rightarrow 1$ particule $\alpha \equiv$ ponctuel

\rightarrow Modélisation par un système à trois corps :



■ État fondamental

- $J^\pi = 0^+$
- $E_0 = -7,25$ MeV par rapport au seuil de dissociation en $\alpha \Lambda \Lambda$

■ Données expérimentales

- Événement Nagara \rightarrow énergie de liaison
Réf: N. Takahashi et al. : Phys. Rev. Lett. 87, 212502 (2001).
- Données antérieures peu sûres

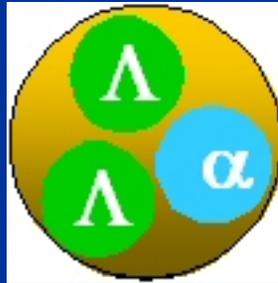
Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}{}^6\text{He}$

■ Rappel : système à résoudre

$$\left[\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

■ Coefficients $W_{K'\gamma', K\gamma}$ à déterminer → interactions ?

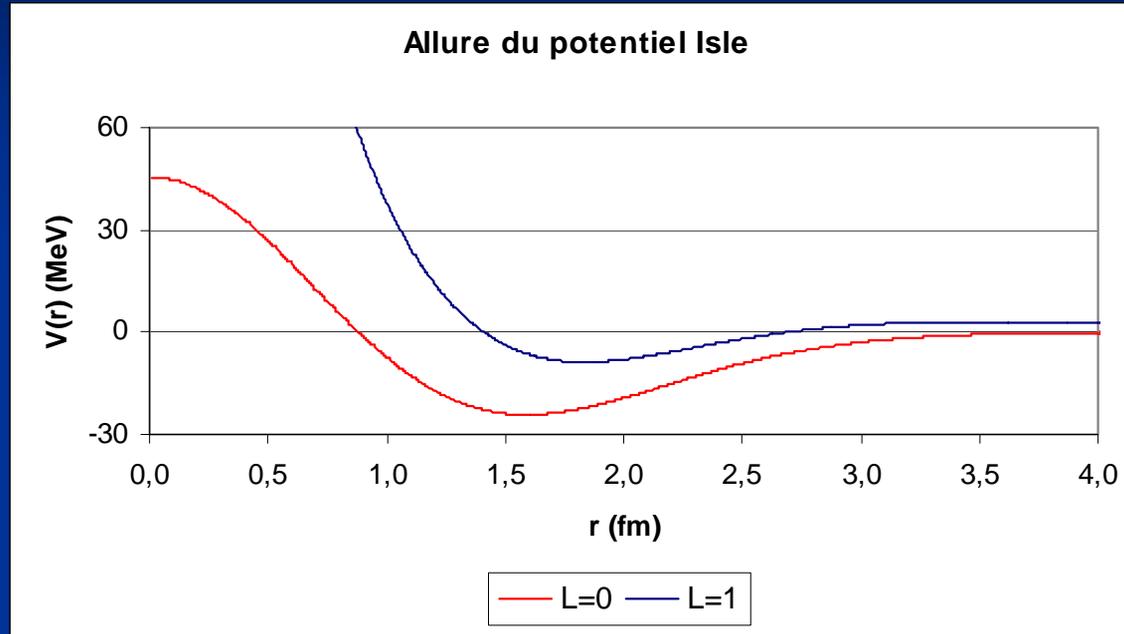
■ Système à trois corps :



→ interaction $\alpha - \Lambda$ + interaction $\Lambda - \Lambda$

Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$

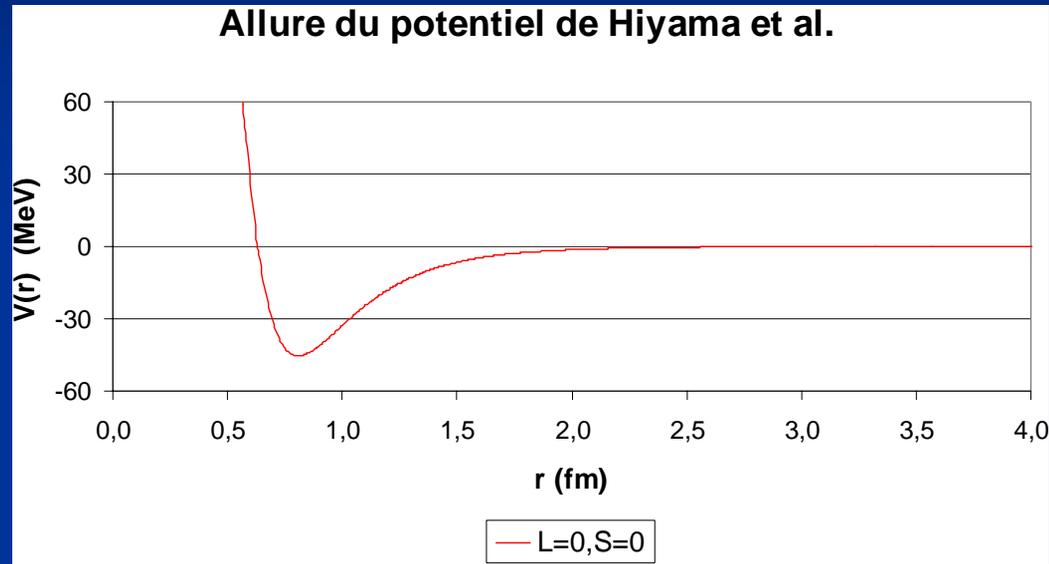
- Interaction $\alpha - \Lambda$ utilisée : potentiel Isle



- Force centrifuge incluse
- Un état lié à $L=0$
- 2 gaussiennes (une partie attractive + une partie répulsive)
- Réf : I. Kumagai-Fuse, S. Okabe, Y. Akaishi : *Phys. Lett.* **345**, 386 (1995).

Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}{}^6\text{He}$

- Interactions $\Lambda - \Lambda$ utilisées :
 - Potentiel de Hiyama et al.

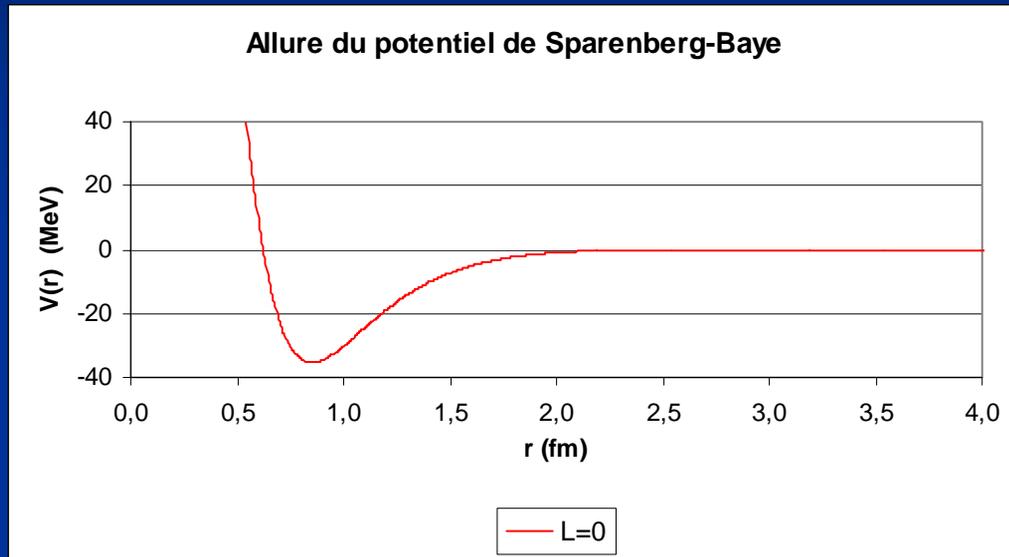


- Partie attractive (2 gaussiennes) + 1 cœur répulsif très fort (1 gaussienne)
- Portée courte (par rapport aux potentiels NN)
- Pas d'état lié
- Réf : E. Hiyama et al. : *Phys. Rev. C* **66**, 024007 (2002).

Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$

■ Interactions Λ - Λ utilisées :

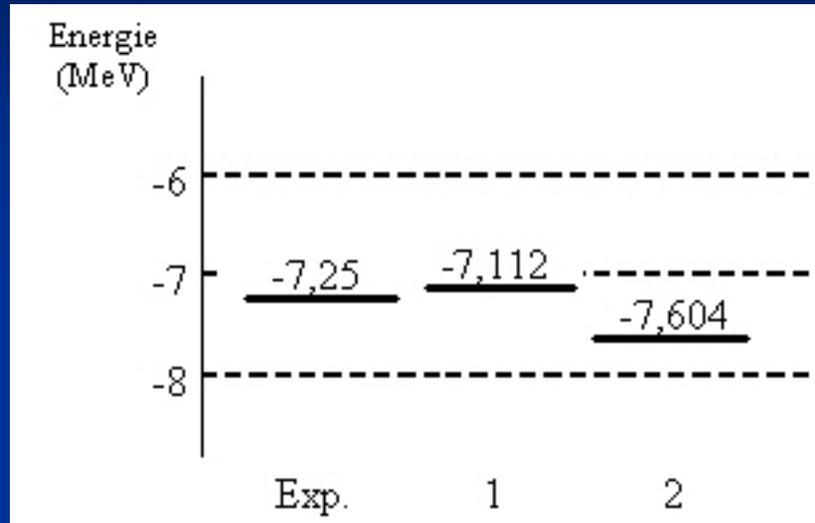
- Potentiel de Sparenberg-Baye



- Valable pour un spin nul
- Partie attractive (1 gaussienne) + 1 cœur répulsif très fort (1 gaussienne)
- Portée courte (par rapport aux potentiels NN)
- Pas d'état lié
- Réf : *Fujiwara et al. : à paraître (2004)*

Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$

■ Niveaux d'énergie :



1. $\text{H}i\gamma + \text{Isle}$
2. $\text{SB} + \text{Isle}$

- Le zéro des énergies est fixé au seuil de dissociation $\alpha \Lambda \Lambda$
- Bon accord avec l'expérience
- Comparaison avec le ${}^6\text{He}$: $-0,973 \text{ MeV}$ à partir du seuil de dissociation $\alpha n n$

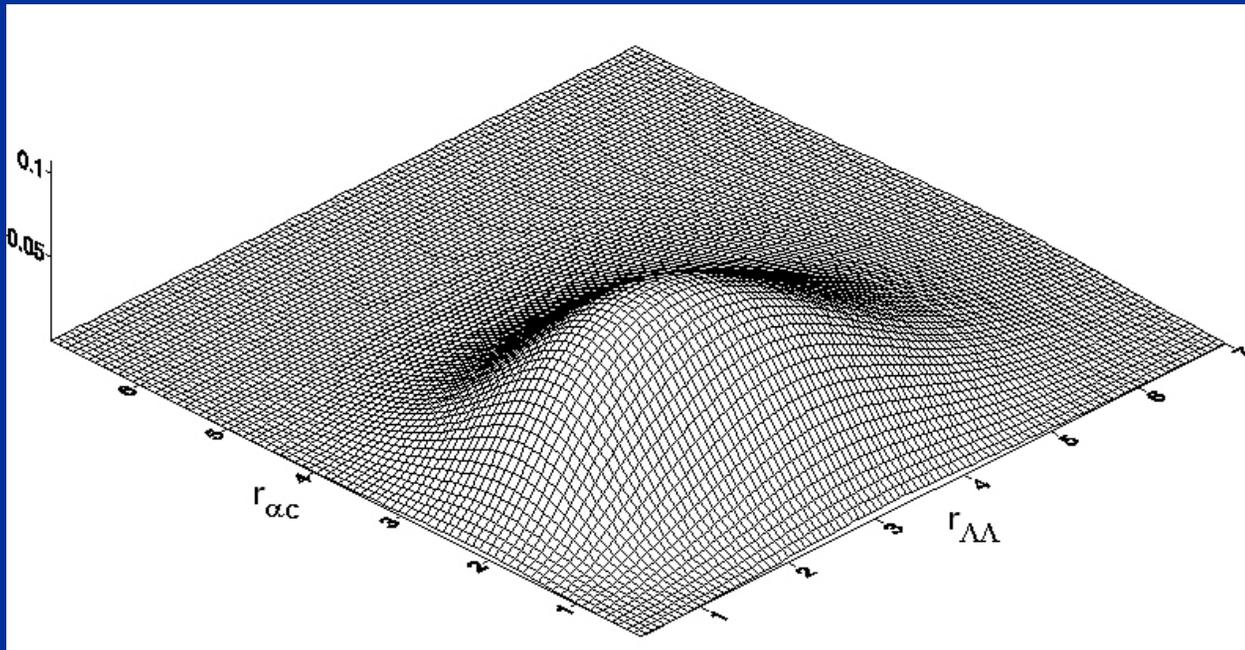
→ Effet de stabilisation du Λ

Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}{}^6\text{He}$

■ Rayon moyen :

- SB et Isle : 1,76 fm
- Hiy. et Isle : 1,81 fm
- ${}^6\text{He}$: 2,57 fm
- Carré du module de la fonction d'onde :

→ Effet de contraction dû au Λ



Etude du ${}_{\Lambda\Lambda}{}^6\text{He}$

■ Convergence en fonction de K_{MAX} :

- Système infini d'équations

$$\left[\frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

→ On fixe K_{MAX} → Système fini → ... → système algébrique

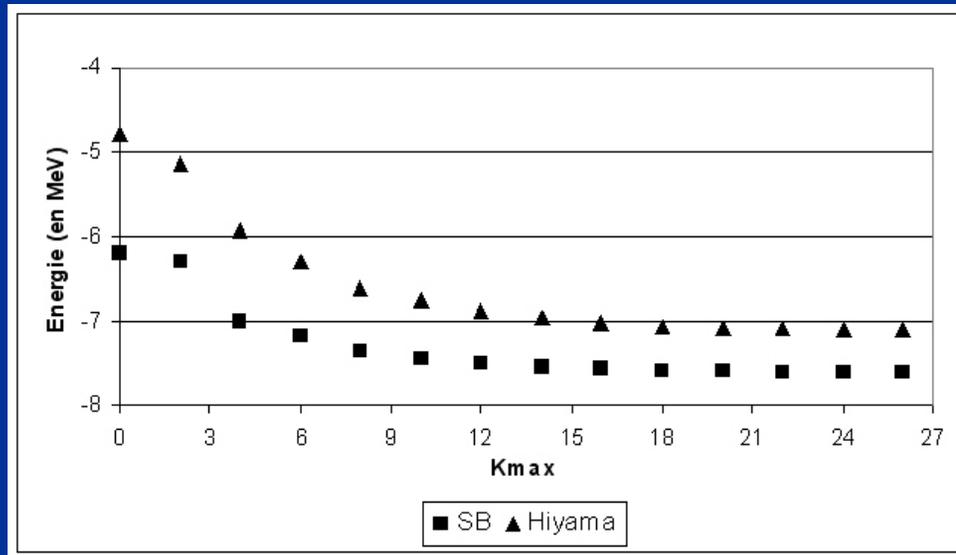


Table des matières

1. La méthode des coordonnées hypersphériques
2. Méthodes numériques
3. Exemple 1 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$
4. **Exemple 2 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$**
5. Conclusion

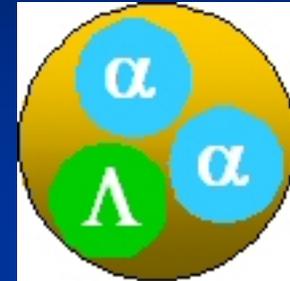
Étude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Composition

$$4n + 4p + 1\Lambda$$

Hypothèse : $2n + 2p \rightarrow 1$ particule $\alpha \equiv$ ponctuel

\rightarrow Modélisation par un système à trois corps :



■ État fondamental

- $J^{\pi} = 1/2^{+}$ ($L = 0$)
- $E_0 = -6,62$ MeV par rapport au seuil de dissociation $\alpha\alpha\Lambda$

■ Premiers états excités

- $J^{\pi} = 3/2^{+}, 5/2^{+}$ ($L = 2$)
- $E_1 = -3,54$ MeV par rapport au seuil de dissociation $\alpha\alpha\Lambda$

Réf : H. Bando, T. Motoba, J. Zofka : *Int. Journ. Of Mod. Phys. A*, **5**, 4021 (1990).

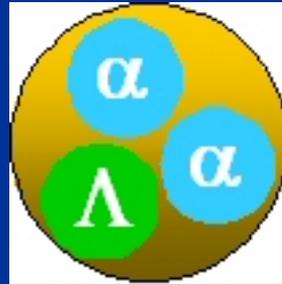
Etude du ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$

■ Rappel : système à résoudre

$$\left[\frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{(K+3/2)(K+5/2)}{\rho^2} \right) + (E - W_{K\gamma, K\gamma}(\rho)) \right] \chi_{\gamma K}^{J\pi}(\rho) = \sum_{\gamma' K'} W_{K'\gamma', K\gamma}(\rho) \chi_{\gamma' K'}^{J'\pi'}(\rho)$$

- Coefficients $W_{K'\gamma', K\gamma}$ à déterminer → interactions ?

- Système à trois corps :

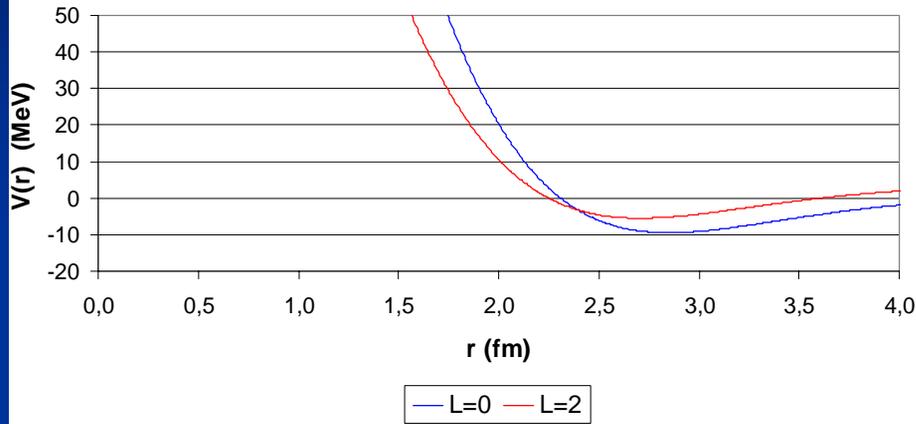


→ interaction $\alpha - \Lambda$ + interaction $\alpha - \alpha$

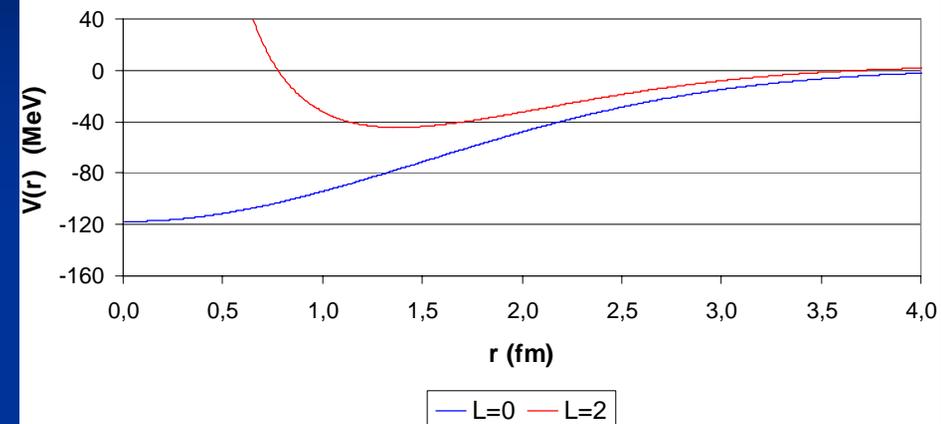
Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Interactions α - α utilisées :

Allure du potentiel d'Ali-Bodmer



Allure du potentiel BFW



- Potentiel d'Ali-Bodmer
 - Force centrifuge incluse
 - Cœur répulsif + partie attractive

- Potentiel de Buck-Friedrich-Wheatley
 - Force centrifuge incluse
 - Une gaussienne

Réf : B. Buck, H. Friedrich, C. Wheatley : *Nucl. Phys. A* **275**, 246 (1977).

S. Ali, R.A. Bodmer : Nucl. Phys. **80**, 99 (1966).

Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

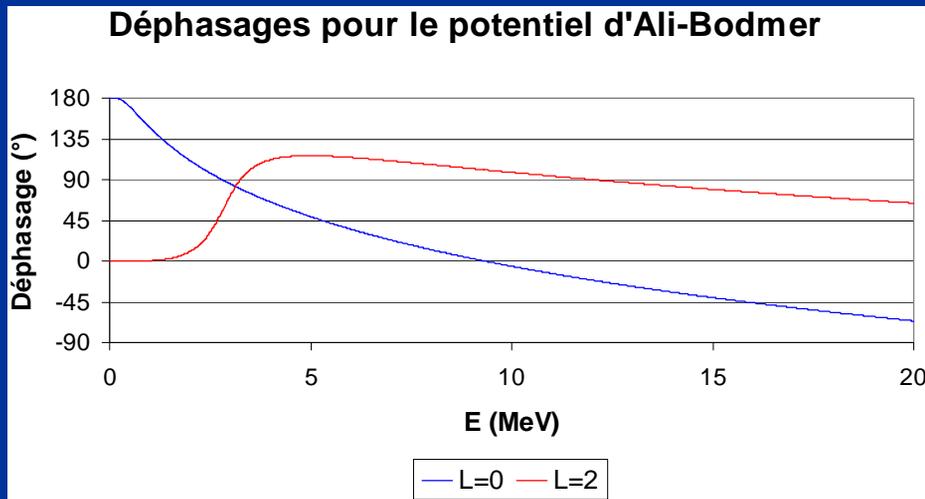
■ Interactions α - α utilisées

■ Définition du déphasage :

- Soit une particule arrivant dans la zone d'influence d'un potentiel. L'effet du potentiel sur les fonctions d'onde radiales \equiv déphasage des ondes sortantes sur les ondes entrantes

■ Théorème de Levinson :

- Le déphasage dépend de l'énergie. $\delta(0) - \delta(\infty) = N \cdot 180^\circ$



- Résonance à 92 keV pour l'onde L=0
- Tend vers 0 en l'infini

Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Interactions α - α utilisées

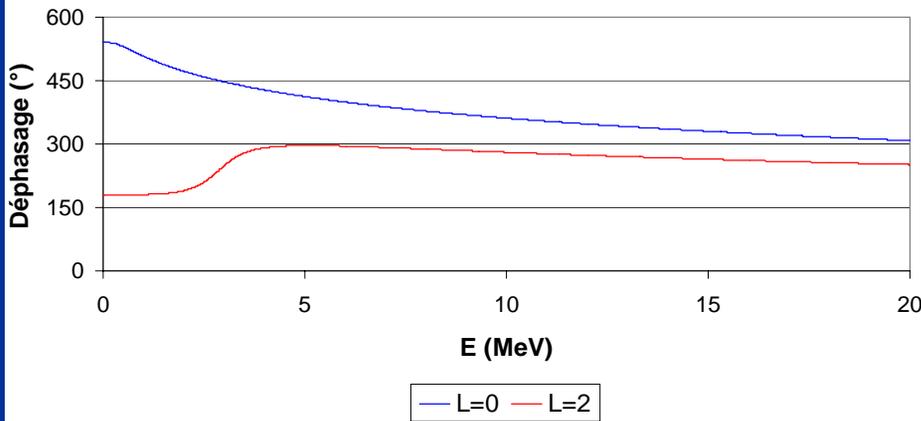
■ Définition du déphasage :

- Soit une particule arrivant dans la zone d'influence d'un potentiel. L'effet du potentiel sur les fonctions d'onde radiales \equiv déphasage des ondes sortantes sur les ondes entrantes

■ Théorème de Levinson :

- Le déphasage dépend de l'énergie. $\delta(0) - \delta(\infty) = N \cdot 180^\circ$

Déphasages pour le potentiel BFW



- Résonance à 92 keV pour l'onde L=0
- Tend vers 0 en l'infini
- Déphasage en 0 de 360° pour l'onde L=0
- Déphasage en 0 de 180° pour l'onde L=2

- L=0 : 2 états liés
- L=2 : 1 état lié
- Non observés expérimentalement

Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Explications

- Structure microscopique de la particule α non prise en compte
- Principe d'exclusion de Pauli
 - Apparition d'états non physiques \equiv états interdits
- A rejeter lors du traitement du système d'équations hypersphériques

■ Rejet des états interdits

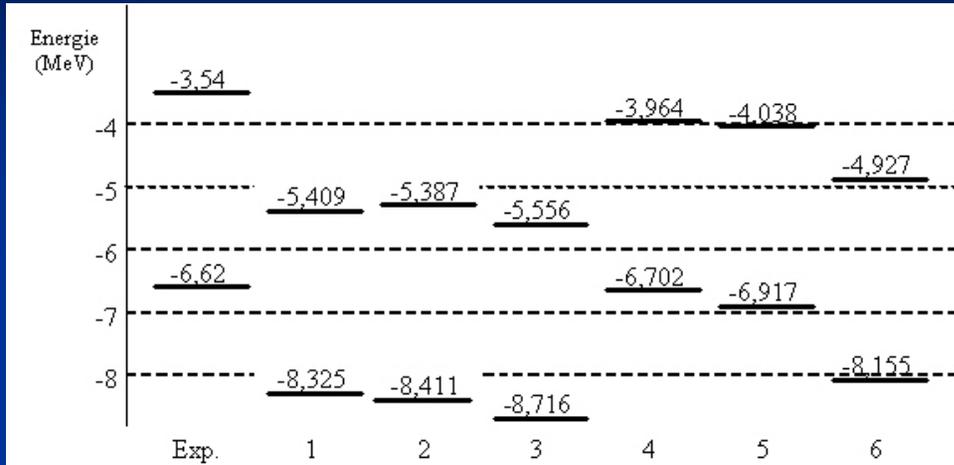
- Méthode du potentiel partenaire supersymétrique
- Méthode des projecteurs
- Pb : on suppose que les états interdits sont les plus bas dans le spectre (bonne approximation cfr résultats)
- Réf : D. Baye : *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2738 (1986).
P. Descouvemont, C. Daniel, D. Baye : Phys. Rev. C **67**, 044309 (2003).

Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

- Interactions α - Λ utilisées :
 - Potentiel Single Gaussian (SG)
 - Une gaussienne
 - Potentiel Isle
 - 2 gaussiennes (partie répulsive + partie attractive)
 - Pas d'état interdit ici
 - Le principe d'exclusion ne s'applique qu'entre des particules identiques

Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Niveaux d'énergie :



1. AB + Isle
2. BFW (SUSY) + Isle
3. BFW (proj) + Isle
4. AB + SG
5. BFW (SUSY) + SG
6. BFW (proj) + SG

- BFW (SUSY) \equiv AB
- SG plus proche de l'expérience
- Isle surlie les niveaux

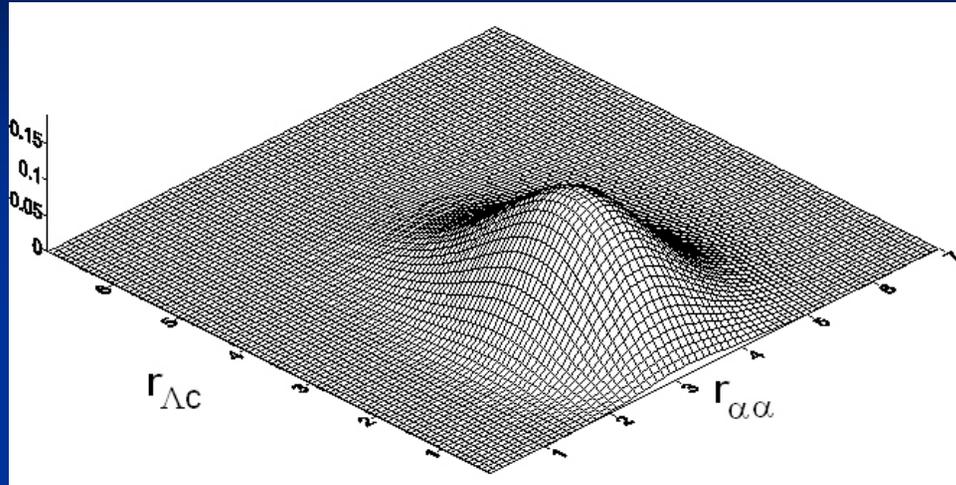
■ Comparaison avec le ${}^9\text{Be}$:

- Fondamental : $E_0 = -1,57$ MeV
- Premier état excité : $E_1 = +0,86$ MeV

➔ Effet de stabilisation du Λ

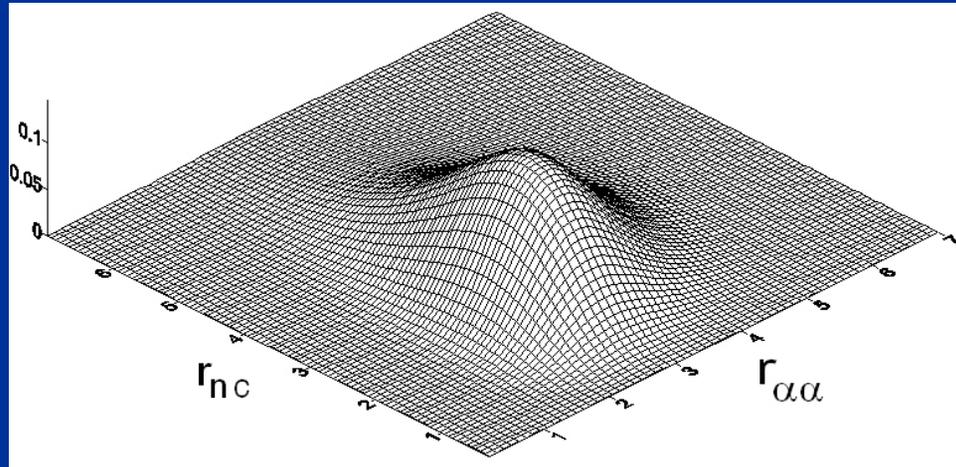
Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Densités de probabilité de présence



■ État fondamental de l'hypernoyau

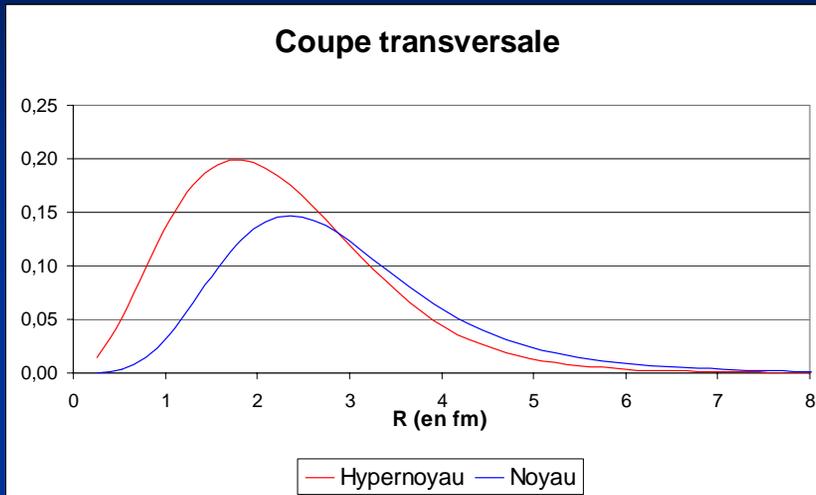
→ Effet de contraction dû au Λ



■ État fondamental du noyau

Etude du ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$

■ Densités de probabilité de présence



→ Effet de contraction dû au Λ

■ Rayon moyen :

Potentiels	R (fm)
AB + SG	1,95
AB + Isle	1,98
BFW + x	1,90

- A comparer : ${}^9\text{Be}$: 2,02 fm pour AB et 1,97 pour BFW (avec l'interaction α -N décrite par Voronchev et al. : *Few-Body Systems* **18**, 191 (1995))

Table des matières

1. La méthode des coordonnées hypersphériques
2. Méthodes numériques
3. Exemple 1 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda\Lambda}^6\text{He}$
4. Exemple 2 : l'hypernoyau ${}_{\Lambda}^9\text{Be}$
5. **Conclusion**

Conclusion : hypernoyaux et potentiels

- **Mis en évidence de :**
 - L'effet stabilisateur du Λ
 - L'effet de contraction du Λ

- **Comparaison de potentiels :**
 - Potentiels $\alpha\alpha$: AB et BFW
 - Potentiels $\Lambda\alpha$: Isle et SG
 - Potentiels $\Lambda\Lambda$: SB et Hiy

- **Problématique des états interdits**

Conclusion : méthode

■ Avantages :

- Convergence rapide
- Temps de calcul correct
- Résultats en accord avec l'expérience

■ Améliorations

- Potentiels non locaux (plus proche de la physique parfois)
- Etudes de résonances
- Concrètement : pentaquark