



INSTITUT DE FRANCE
Académie des sciences

Comptes Rendus

Physique

Shimpei Endo et Yvan Castin

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

Volume 23 (2022), p. 41-110

Published online: 12 August 2022

<https://doi.org/10.5802/crphys.108>



This article is licensed under the
CREATIVE COMMONS ATTRIBUTION 4.0 INTERNATIONAL LICENSE.
<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



*Les Comptes Rendus. Physique sont membres du
Centre Mersenne pour l'édition scientifique ouverte*
www.centre-mersenne.org
e-ISSN : 1878-1535



Article de recherche / *Research article*

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

Fourth cluster and virial coefficients of a unitary Fermi gas for an arbitrary mass ratio

Shimpei Endo^a et Yvan Castin^{*,b}

^a Département de physique, Université de Tohoku, Sendai, Japon

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

Courriels : shimpei.endo@nucl.phys.tohoku.ac.jp, yvan.castin@lkb.ens.fr

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. Une version multilingue est disponible en fichiers séparés sur l'archive ouverte HAL à l'adresse <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03592961>.

Abstract. We calculate the fourth cluster coefficients of the homogeneous unitary spin $1/2$ Fermi gas as functions of the internal-state mass ratio, over intervals constrained by the 3- or 4-body Efimov effect. For this we use our 2016 conjecture (validated for equal masses by Hou and Drut in 2020) in a numerically efficient formulation making the sum over angular momentum converge faster, which is crucial at large mass ratio. The mean cluster coefficient, relevant for equal chemical potentials, is not of constant sign and increases rapidly close to the Efimovian thresholds. We also get the fourth virial coefficients, which we find to be very poor indicators of interaction-induced 4-body correlations. We obtain analytically for all n the cluster

* Auteur correspondant.

coefficients of order $n + 1$ for an infinity-mass impurity fermion, matching the conjecture for $n = 3$. Finally, in a harmonic potential, we predict a non-monotonic behavior of the $3 + 1$ cluster coefficient with trapping frequency, near mass ratios where this coefficient vanishes in the homogeneous case. A multilingual version is available in separate files on the open archive HAL at <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03592961>.

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

Keywords. Fermi gases, unitary limit, scale invariance, virial expansion, cluster expansion.

Manuscrit reçu le 28 février 2022, révisé le 11 avril 2022, accepté le 17 mai 2022.

The English version is available after the French version

1. Présentation du problème et principaux résultats

1.1. 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 [5–7]. 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 [8–10].

1.2. 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 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

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 $1/a = 0$.

$\sigma = \uparrow, \downarrow$ 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 $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

1.3. 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 [17–19], 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 $\lambda/a \ll 1$ [22–25] ou $\gg 1$ [26–29]. La méthode du régulateur harmonique [30–33], 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 $Z_1 = 1/[2 \operatorname{sh}(\bar{\omega}/2)]^3$ 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 [35–38] 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

² 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} .

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.

1.4. 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) :

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

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.

1.5. 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

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),

$$b_{n,0} = (m_\uparrow / \bar{m})^{3/2} (-1)^{n+1} / n^{5/2} \quad \text{et} \quad b_{0,n} = (m_\downarrow / \bar{m})^{3/2} (-1)^{n+1} / n^{5/2}.$$

calculant numériquement le déterminant des opérateurs $M_{n_1, n_l}^{(\ell, \varepsilon)}$ (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

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

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 corps⁴; 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

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

Une fois le développement en amas connu, les coefficients du viriel c_{n_1, n_l} s'en déduisent aisément, sous la forme de fonctions rationnelles des coefficients d'amas $b_{n'_1, n'_l}$ d'ordre total $n'_1 + n'_l$ inférieur ou égal à $n_1 + n_l$:⁵

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.

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

$$\rho_\sigma \lambda^3 = \sum_{(n_1, n_l) \in \mathbb{N}^{2*}} n_\sigma b_{n_1, n_l} z_1^{n_1} z_l^{n_l}$$

tiré de la relation thermodynamique $\rho_\sigma = \partial P / \partial \mu_\sigma$, et l'on ajuste les c_{n_1, n_l} 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

$$P \lambda^3 / k_B T = \sum_{(n_1, n_l) \in \mathbb{N}^{2*}} a_{n_1, n_l} \left(\rho_1 \lambda^3 \right)^{n_1} \left(\rho_l \lambda^3 \right)^{n_l}$$

puis, une fois les coefficients a_{n_1, n_l} calculés, d'utiliser la relation

$$c_{n_1, n_l} = a_{n_1, n_l} / \left(t_1^{n_1} t_l^{n_l} \right)$$

où l'on a posé $t_\sigma = (\bar{m} / m_\sigma)^{3/2}$. On notera que $b_{1,0} t_1 = b_{0,1} t_l = 1$, 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 $P = (\rho_1 + \rho_l) k_B T$. En remplaçant les $b_{n,0}$ et $b_{0,n}$ par leurs expressions données dans la note 3, il vient finalement

$$\begin{aligned} c_{3,1} &= \left(-3/4 + 1/\sqrt{3} \right) b_{1,1} - \left(3/\sqrt{2} \right) b_{2,1} - 3b_{3,1} + 3b_{1,1} \left(b_{2,1} + b_{1,1}/\sqrt{8} \right) t_l - b_{1,1}^3 t_1^2, \\ c_{2,2} &= -3 \left[b_{2,2} + (b_{1,2} + b_{2,1})/\sqrt{8} + b_{1,1}/8 \right] + \left(9\sqrt{2}/8 \right) b_{1,1}^2 (t_1 + t_l) + 6b_{1,1} (b_{2,1} t_1 + b_{1,2} t_l) - 3b_{1,1}^3 t_1 t_l \end{aligned}$$

(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].

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

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

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

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

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

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,

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

voir en particulier les références [5, 7] où b_4 est mesuré pour des masses égales⁶. 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

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

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) :

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

⁶Les 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 [11, 16].

⁷Dans le contexte de la note 2, ce choix revient à prendre comme fonction de partition à un corps de référence \tilde{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].

1.6. 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 $b_{4,0} = -(m_l/\bar{m})^{3/2}/32$ et $b_{0,4} = -(m_l/\bar{m})^{3/2}/32$ 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 $c_{4,0} = A_4(m_l/\bar{m})^{3/2}$ et $c_{0,4} = A_4(m_l/\bar{m})^{3/2}$, 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 pertinentes⁸. À toutes fins utiles, nous donnons aussi les quatrièmes coefficients d'amas et du viriel sous forme numérique dans la table 1.

1.7. 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.

⁸Dans 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.

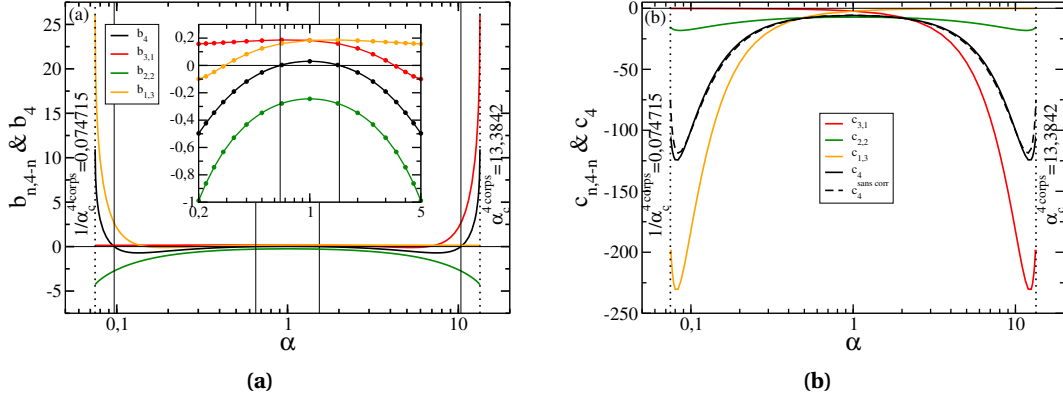


FIGURE 1 – Pour un gaz unitaire spatialement homogène de fermions à deux états de spin \uparrow et \downarrow , quatrièmes coefficients d’amas (a) et du viriel (b) définis par les équations ((1), (11), (13)) et prédits par la conjecture (5) de la référence [41], en fonction du rapport de masse $\alpha = m_\uparrow / m_\downarrow$. 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 $c_4^{\text{sans corr}} = c_4 - c_4^{\text{corr}}$.

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).

2.1. 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 $\mathcal{D}_{1,3}$ 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 :

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

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.

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

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

$$\mathcal{D}_{3,1}(x, u) = \frac{(1 + 2\alpha + \alpha u / \text{ch } x)^{1/2}}{1 + \alpha} ; \quad (15)$$

$$\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}(x, u, m_z; x', u', m'_z) = \sum_{\eta, \eta' = \pm 1} (\eta \eta')^{\ell+1} K_{3,1}^{(\ell)}(\eta x, u, \eta m_z; \eta' x', u', \eta' m'_z)$$

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 $\exp(i\pi L_x / \hbar)|\ell, m_z\rangle = (-1)^\ell |\ell, -m_z\rangle$ [40].

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 abrégé :

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

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 $[0, S_{\max}]$ 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 $[S_{\max}, +\infty[$ 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 $[S_{\max} - 5/2, S_{\max}]$.

2.2. 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,

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

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 :

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

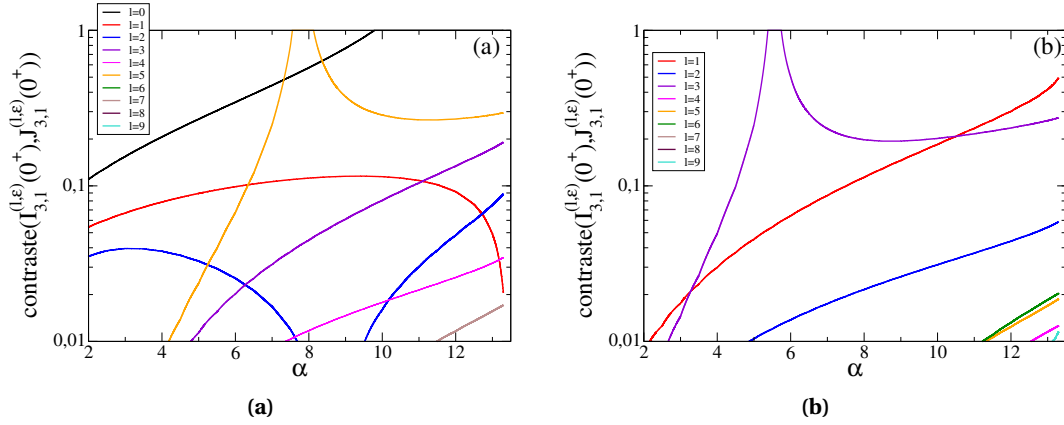


FIGURE 2 – Contraste entre la contribution $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ de la voie de moment cinétique ℓ et de parité ε à $I_{3,1}$ et son approximant asymptotique $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ donné par l'équation (47), en fonction du rapport de masse $\alpha = m_1/m_l$ et de ℓ , dans la limite $\bar{\omega} = 0^+$. 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.

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 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

$$C_0 = \frac{(1 - \cos \xi_0)(5/4 + \cos \xi_0)}{(1/2 + \cos \xi_0)(z_0 - 1/z_0)} \quad (21)$$

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

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 .

2.3. 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 lourde¹⁰ :

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

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

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.

Fermi via le principe d'exclusion de Pauli, et [41, équations (80)–(83)] qui relient les coefficients d'amas du système piégé aux fonctions de partition à petit nombre de corps, nous trouvons que

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

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

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

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),

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

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

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

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 :

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

2.4. 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,

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

¹¹Dans 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 $1 + 1/\operatorname{ch}(\pi S/2)$ pour $\ell = 0$ (par exemple au moyen de [38, équation (46)]), on retrouve le second résultat dans l'équation (25).

¹²On 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.

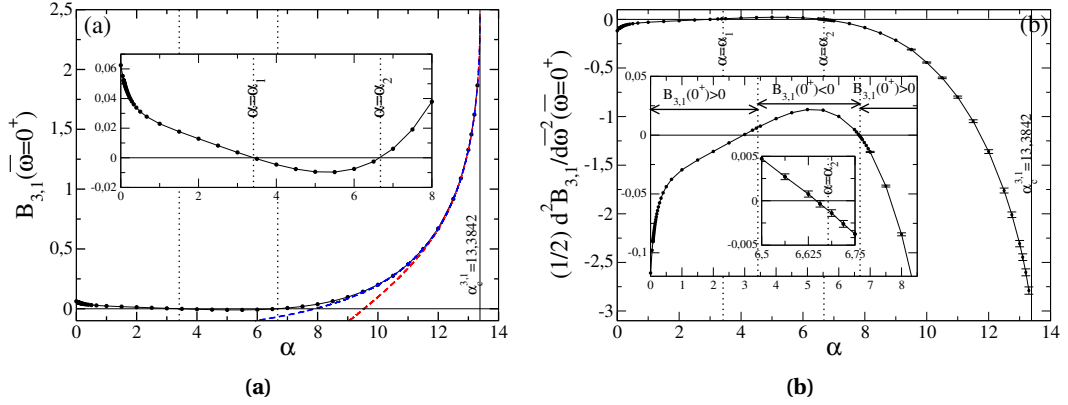


FIGURE 3 – (a) Quatrième coefficient d’amas $B_{3,1}(0^+)$ du gaz unitaire de fermions dans un piège harmonique de raideur infinitésimale, en fonction du rapport de masse $\alpha = m_1/m_l$. Disques (reliés par un trait fin) : notre calcul numérique de l’expression (4) pour $(n_l, n_1) = (3, 1)$ et application 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 $\alpha_c^{4\text{corps}} \simeq 13,3842$ 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 $\alpha_1 \simeq 3,412$ et $\alpha_2 \simeq 6,678$ (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).

TABLE 2 – Valeurs numériques des quatrièmes 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 $\alpha = m_1/m_l$. 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.

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

2.5. 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 calcul et conduit à une singularité de type

$$\left(\alpha_c^{4\text{corps}} - \alpha\right)^{1/2}$$

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 figure¹³. Troisièmement, le seuil de l'effet Efimov à trois corps $\alpha_c^{3,1} \approx 13,60697$ 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 continums 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] :

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

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

¹³Cette 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

$$dB_{3,1}(0^+)/dX = -(\ell_0 + 1/2)c_0^{1/2} \approx -2,2 \quad \text{en} \quad X \equiv (\alpha_c^{3,1} - \alpha)^{1/2} = 0.$$

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 $\theta_L(k, S) = -2kx_{\max} [2\pi]$ 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].

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 corps¹⁶. 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 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 $Y = (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$:

$$\begin{aligned} I_{3,1}(0^+) &= A_0 + A_1 X + A_2 (Y - Y_0) + A_3 X^2 \\ \text{et } I_{3,1}(0^+) &= A_0 + A_1 X + A_2 (Y - Y_0) + A_3 X^2 + A_4 X^3 + A_5 (Y^3 - Y_0^3) \end{aligned} \quad (32)$$

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.

2.6. 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.

¹⁵En 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.

¹⁶À 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, $\sigma_0 \ll 1$ 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 $I_{3,1}^{(\ell,\epsilon) \neq (1,+)}(0^+)$ contient une singularité

$$\propto \int_0^{+\infty} dk \left[k^2 / (k^2 + \sigma_0^2) - k^2 / (k^2 + 1) \right] \propto 1 - \sigma_0 \quad \text{où} \quad \sigma_0 \sim \gamma_0 (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2} \quad \text{et} \quad \gamma_0 \simeq 0,438.$$

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 $I_{3,1}^{(\ell=0)}(0^+) \simeq 0,026 + 0,040 Y$ où la variable Y est celle de l'équation (32).

Le résultat est représenté en fonction du rapport de masse sur la figure 3b¹⁷. Cherchons à l'interpréter dans un scénario très simple : comme dans le cas des masses égales $m_1 = m_1$ 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 $B_{3,1}(0^+) = 0$.

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.

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

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

¹⁷Pour les valeurs de α proches de α_2 , nous améliorons la méthode d'accélération de convergence en approximant

$$\left[I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)} \right]''(0^+) - \left[J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)} \right]''(0^+) \quad \text{pour } \ell > \ell_{\max} \quad \text{par } A \ell^\gamma \operatorname{Re} \left(e^{i\psi} z_0^\ell \right)$$

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).

¹⁸En 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.

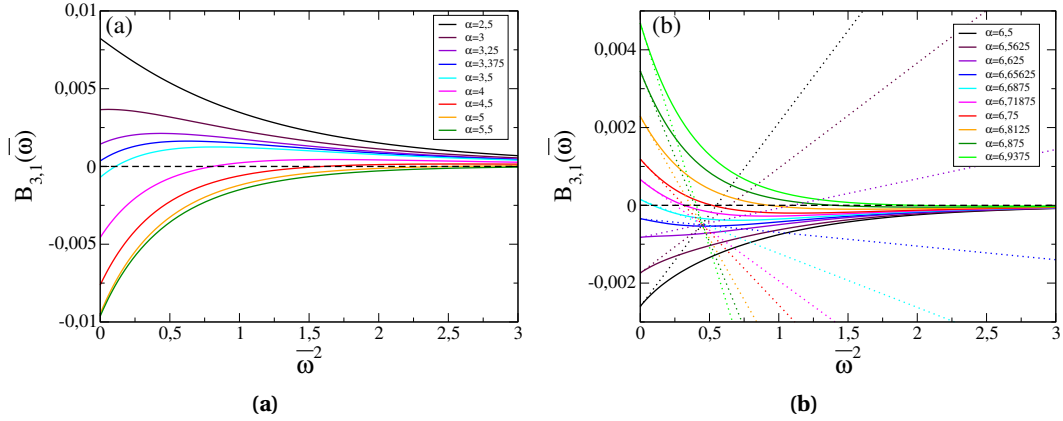


FIGURE 4 – Quatrième coefficient d’amas $B_{3,1}(\bar{\omega})$ du gaz unitaire de fermions piégé en fonction de la raideur réduite $\bar{\omega}^2 = (\hbar\omega/k_B T)^2$ des potentiels harmoniques, pour différents rapports de masse $\alpha = m_1/m_l$ proches des points d’annulation $\alpha_1 \simeq 3,412$ (a) et $\alpha_2 \simeq 6,678$ (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.

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].

3.1. 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 $+$ 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 :

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

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 :

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

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.

3.2. Approximant asymptotique

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

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

où, comme dans la section 2, $I_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(0^+)$ 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] :

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

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

¹⁹ On pose $(x, \pi - \theta) = R e^t (\cos \psi, \sin \psi)$, 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 $t_{\min} = -40$.

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,

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

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

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

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

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

Une écriture optimale de \tilde{K}_3^{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{K}_3^{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

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

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)).

3.3. 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

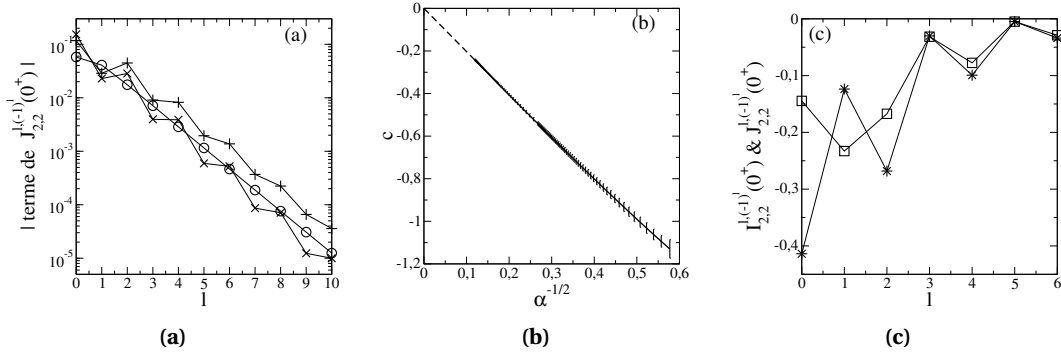


FIGURE 5 – Quelques résultats numériques sur l’approximant asymptotique $J_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(0^+)$ de la contribution $I_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(0^+)$ de moment cinétique ℓ et de parité ε à la quantité $I_{2,2}(0^+)$ de l’équation (4). (a) Pour un rapport de masse $\alpha = 5$ et le secteur 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 .

calculons numériquement par commodité dans le secteur de parité gentil $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ et pour un rapport de masse $\alpha \gtrsim 3$:²⁰

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

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

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

²⁰Les 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.

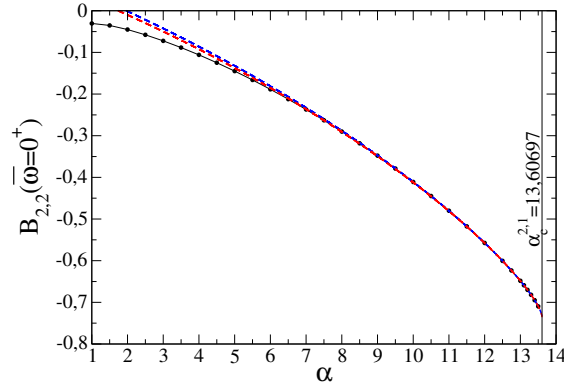


FIGURE 6 – Quatrième coefficient d’amas $B_{2,2}(0^+)$ du gaz unitaire de fermions dans un piège harmonique de raideur infinitésimale, en fonction du rapport de masse $\alpha = m_{\uparrow}/m_{\downarrow}$ restreint à $\alpha \geq 1$ par symétrie $\alpha \leftrightarrow 1/\alpha$. Disques (reliés par 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 $\alpha = \alpha_c^{2,1}$. Tiré 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 $B_{2,2}(0^+) = -0,73742 + 0,061673Y + 0,074061Y^2 - 0,0084386Y^3$. Tiré rouge : idem sur l’intervalle $12,5 \leq \alpha \leq 13,5$, à savoir $B_{2,2}(0^+) = -0,73761 + 0,062206Y + 0,073901Y^2 - 0,0086514Y^3$.

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 $\alpha = m_{\uparrow}/m_{\downarrow}$. 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.

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

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 $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$, sa somme sur ℓ et ε , son comportement dominant

A.1. 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 que les traces sur les variables u et m_z :

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

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 :

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

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

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

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,

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

$$\mathcal{T}^{(\ell)}(\theta; \phi) = \frac{\sin[(\ell + 1/2)\xi]}{\sin(\xi/2)} \quad \text{avec} \quad (50)$$

$$1 + 2\cos\xi = uu'(1 + \cos\phi\cos\phi') - (u + u')\sin\phi\sin\phi' + v v'(\cos\phi + \cos\phi') + \cos\phi\cos\phi'$$

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

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

A.2. 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 :

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

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).

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

$$\sum_{\ell \in \mathbb{N}} (\ell + 1/2) \{\cos(\ell\xi) - \cos[(\ell + 1)\xi]\} = (-1/2) + \sum_{\ell \in \mathbb{N}} \cos(\ell\xi).$$

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,

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

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

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

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 :

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

²⁵Si $\xi = 0$, $\mathcal{T}^{(1)}(\theta, \theta'; \phi, \phi') = 3$; or, c'est la trace d'une matrice de rotation dans \mathbb{R}^3 qui doit donc se réduire à l'identité : on a $\mathcal{R}_z(\theta) \mathcal{R}_x(-\phi) \mathcal{R}_z(-\theta') \mathcal{R}_x(-\phi') = \mathbf{1}$ 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.

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

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 $g_2(z) = \sum_{n>0} z^n/n^2$:

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

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

A.3. 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 :

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

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

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

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

²⁷Après 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).

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 $\sqrt{-1} = i$.

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

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

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

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{J}_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{J}_1 une ligne de coupure en forme de fleur, réunion de trois arcs OB , OB' et BB' , voir la figure 7b²⁹. 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{J}_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{J}_0 , B et B' pour \mathcal{J}_1 , ceci valant pour tout rapport de masse α . \hookrightarrow Pour le calcul de \mathcal{J}_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

$$\mathcal{J}_0^{\otimes 0} \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(z_0-1)z_0^\ell}{2\sqrt{3\beta}(z_0-1/z_0)} \int_{\mathcal{C}_u} \frac{du}{u} e^{\ell \eta u} F_0\left(\frac{C_0}{\eta u}\right) = \frac{z_0^{\ell+1}}{2\sqrt{3\beta}(1+z_0)} \int_{\mathcal{C}_v} \frac{dv}{v} e^{\ell C_0 v} F_0(1/v) \quad (67)$$

où les lacets \mathcal{C}_u et \mathcal{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 :

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

²⁹Dans 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 .

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). \hookrightarrow Pour le calcul de \mathcal{J}_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

$$\mathcal{J}_1^{\oplus} \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(z_1 - 1) z_1^\ell \mathcal{A}^2}{i \mathcal{B} w_1 \left(\frac{z_1 + 1/z_1}{2} \right)} \int_{\mathcal{C}_v} dv e^{\ell \mathcal{A}^2 v / \mathcal{B}} \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v \mathcal{A}^2}} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v \mathcal{A}^2}} \right) \quad (69)$$

où le lacet \mathcal{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

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

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

B.1. 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 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

³⁰Dans 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.

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

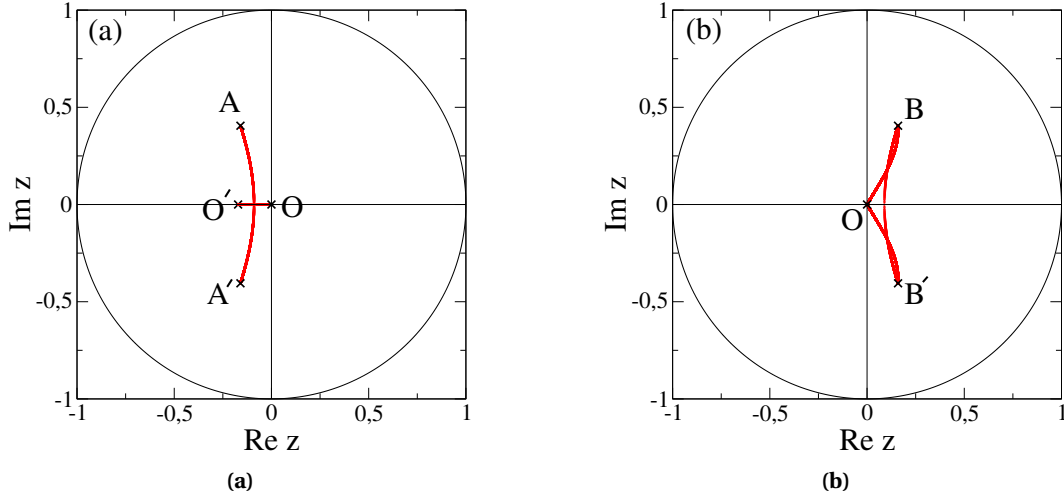


FIGURE 7 – Lignes de coupure de l'intégrande de l'équation (65) dans le disque unité (trait rouge épais) dans le cas (a) $n = 0$ et (b) $n = 1$, obtenues numériquement pour un rapport de masse $\alpha = 1$ pris comme exemple.

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 :

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

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 :

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

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

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

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 seulement³² :

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

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

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

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

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

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 $1/\alpha$:

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

³²Il 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 $\check{\mathcal{D}}_{22} \equiv 1$.

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 $0 < |x - x_{\text{sing}}| < \theta_c$ 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 $\theta = |x - x_{\text{sing}}| \text{sh } t$, 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).

B.2. 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 $K_1 K_2$ se traite exactement comme dans l'annexe A :

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

avec $z = \sqrt{\alpha} + i\sqrt{1+\alpha}$, $z' = \sqrt{\alpha^{-1}} + i\sqrt{1+\alpha^{-1}}$ et g_2 la fonction dilogarithme. Dans la contribution de type $K_1 K_3$, sommions 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 de la référence [53, équations (7.2–9) page 101, (7.3–15) page 105 et (7.4–7) page 109] :

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

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

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

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 fixée³⁶ :

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 [53, équation (8.6–3) page 145], 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).

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 .

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

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 :

$$\exp(x) < \exp(x') < \exp(x) + \sqrt{2\alpha} \text{ et } \exp(x) + \exp(x') > \sqrt{2\alpha}, \quad (\text{i})$$

$$\exp(x') < \exp(x) < \exp(x') + \sqrt{2\alpha} \text{ et } \exp(x) + \exp(x') > \sqrt{2\alpha}, \quad (\text{ii})$$

$$\exp(x) < \exp(x') < \sqrt{2\alpha} - \exp(x), \quad (\text{iii})$$

$$\exp(x') < \exp(x) < \sqrt{2\alpha} - \exp(x'). \quad (\text{iv})$$

En appelant u_{\min}^{\exp} et u_{\max}^{\exp} les expressions dépendant de x dans les définitions (75), on trouve qu'on a systématiquement $u_{\min} = -1 < u_0 < u_{\max} = u_{\max}^{\exp}$ dans la zone (i), $u_{\min} = u_{\min}^{\exp} < u_0 < u_{\max} = 1$ dans la zone (ii), $u_{\min} = -1 < u_{\max} = 1 < u_0$ dans la zone (iii), $u_{\min} = u_{\min}^{\exp} < u_{\max} = u_{\max}^{\exp} < u_0$ 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 :

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

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

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

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 $\mathbb{1} + \hat{k}_\eta$ 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 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

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

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 abréger.

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,

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

$$\sigma_{23} = \mathbf{v} + \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \mathbf{u} - \mathbf{u}' ; \quad \mathbf{v}_{23} = \mathbf{v} + \frac{\mathbf{u}}{1+\alpha} - \frac{\mathbf{u}'}{1+\alpha}$$

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

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

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 [40, équation (14)]. 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 [40, équation (45)] 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 $SO(3)$ 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 repère cartésien direct $OXYZ$ est d'orientation quelconque par rapport à celui de référence $Oxyz$ (voir [53, section 8.2]); il en résulte que

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

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 $SO(3)$ 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

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

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

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

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

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

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)) :

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

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

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

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 $\int_{\mathbb{R}} dS \operatorname{Tr} [\mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_1(iS) \mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_3(iS)] = \int_{\mathbb{R}} dS \operatorname{Tr} [\check{K}_1(iS) \check{K}_3]$.

English version

1. Introduction to the problem and main results

1.1. The system

Our object of study is a three-dimensional gas of non-relativistic neutral fermions with two spin states \uparrow and \downarrow in the regime of maximum interaction allowed in the gas phase, i.e. in the so-called unitary limit [1, 2]: there is no interaction between fermions in the same spin state and a binary zero-range interaction, exclusively in the s -wave and of infinite scattering length between fermions of different spin states \uparrow and \downarrow .¹ We consider the general case where the fermion masses m_\uparrow and m_\downarrow can be different for the two spin states, which is the originality of our work. This system is realizable in laboratory with trapped cold atomic gases. Indeed, its main properties at equilibrium have been determined experimentally for equal masses $m_\uparrow = m_\downarrow$: its superfluidity at low temperature has been observed in the unpolarized case (with equal numbers of \uparrow and \downarrow fermions) [3, 4] and its equation of state has been measured at any temperature and polarization [5–7]. The case $m_\uparrow \neq m_\downarrow$ remains to be explored; a natural way to obtain it is to use a mixture of two fully polarised fermionic atomic species, as has been done in references [8–10].

1.2. Cluster and virial expansions

Given the strength of the interactions, which provides no obvious small parameter, there are few theoretical tools for quantitatively reliable predictions on the unitary gas that can be compared to measurements. One of them is the diagrammatic Monte Carlo simulation of the many-body problem on a computer [11, 12]. Another is the cluster or virial expansion [13] of the pressure P of the spatially homogeneous infinite gas into powers of the fugacities $z_\sigma = \exp(\beta\mu_\sigma)$ or of the phase space densities $\rho_\sigma \lambda_\sigma^3$ respectively, in the strongly non-degenerate regime where they tend to zero, with ρ_σ the density of the $\sigma = \uparrow, \downarrow$ component in real space, μ_σ its chemical potential, $\lambda_\sigma = (2\pi\hbar^2/m_\sigma k_B T)^{1/2}$ its de Broglie thermal wavelength at temperature T , and $\beta = 1/k_B T$ [14]:

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

¹ This situation corresponds to the replacement of the interaction potential by the Wigner–Bethe–Peierls contact conditions on the wave function ψ of the system in each spin configuration $|\uparrow \dots \uparrow \downarrow \dots \downarrow\rangle = |\uparrow\rangle^{\otimes n_\uparrow} |\downarrow\rangle^{\otimes n_\downarrow}$: when the distance r_{ij} between particle i in spin state \uparrow and particle j in spin state \downarrow tends to zero at a fixed position \mathbf{R}_{ij} of their center of mass, the positions \mathbf{r}_k of the other particles being fixed at values different from \mathbf{R}_{ij} , there exists a constant A_{ij} (function of \mathbf{R}_{ij} and of the \mathbf{r}_k 's) such that

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{n_\uparrow+n_\downarrow}) = A_{ij} (a^{-1} - r_{ij}^{-1}) + O(r_{ij})$$

where a is the scattering length, and this for all i and for all j . Here, we are in the unitary limit $1/a = 0$.

To scale the pressure, it was necessary to introduce a reference de Broglie thermal wavelength $\lambda = (2\pi\hbar^2/\bar{m}k_B T)^{1/2}$ depending on a mean mass \bar{m} to be specified (see equation (12)). One can then try to extrapolate to the non-trivial regime $z_\sigma \approx 1$ with heuristic recipes such as the Padé approximant [15] or optimized resummation methods [16] which take into account the behavior of the coefficients at large orders. The cluster or virial expansion has the advantage over the Monte Carlo simulation that it is closer to the analytical calculation, since the coefficients of order n can be obtained from the solution of a problem with at most n interacting fermions, i.e. with few bodies: to obtain $b_{n_\uparrow, n_\downarrow}$, it suffices to determine the canonical partition functions of all systems with n_σ or less fermions in each spin state $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

1.3. The unitary limit

The scale invariance of the unitary gas simplifies considerably the calculation of cluster coefficients for $n > 2$ (the order two, given by the Beth–Uhlenbeck formula [17–19], is not debated). Thus, the third-order coefficients are known analytically, even if the scale invariance at the three-body level is broken by the Efimov effect [20, 21], in sharp contrast to the model of hard sphere interaction of radius a where the coefficients are known analytically (for bosons) only in the limiting cases $\lambda/a \ll 1$ [22–25] or $\gg 1$ [26–29]. The harmonic regulator method [30–33], consisting in trapping each component of the gas in a fictitious isotropic harmonic potential, $U_\sigma(\mathbf{r}) = m_\sigma \omega^2 r^2/2$, whose trapping frequency ω (common to both spin states) is made to tend to zero at the end of the calculations, allows us to take full advantage of the scale invariance since the n -body spectrum in the trap is obtained from the discrete set of scale exponents s_i of the zero energy $E = 0$ eigenstates in free space [1, 34]. More precisely, we generalize the cluster expansion to the trapped case, replacing the pressure by the grand potential Ω and taking its ratio to the partition function $Z_1 = 1/[2 \text{sh}(\bar{\omega}/2)]^3$ of a single fermion,² so that

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

The coefficients of the trapped case, marked by a capital letter to avoid confusion, depend only on the dimensionless ratio $\bar{\omega} = \hbar\omega/k_B T$ due to the scale invariance of the unitary gas. They are related to those of the homogeneous case by means of the local density approximation, exact in the limit $\omega \rightarrow 0$ [32, 33] and giving [21]:

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

This method leads to an analytic integral expression of the third order coefficients because the transcendental Efimov function $\Lambda(s)$, whose roots are the scale exponents s_i , is known explicitly [35–38]. This allows to express the coefficients as a contour integral around \mathbb{R}^+ by means of the residue theorem and then to unfold the contour on the pure imaginary axis by analyticity on $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ [20]. On the other hand, for non-trivial fourth order coefficients,³ the Efimov function is the determinant of operators $M_{3,1}(s)$ [39] or $M_{2,2}(s)$ [40] parametrically dependent on s ; we know

² Indeed, the numerator in the first side of equation (1) can be seen, in a quantization box of arbitrarily large volume V , as the ratio between PV , i.e. minus the gas grand potential, and the partition function V/λ^3 of a fictitious single particle of mass \bar{m} .

³ If one of the n_σ is zero, the fermions of the n -body problem are non-interacting and the corresponding B coefficient reduces to that of the ideal gas. We thus find $B_{n,0}(0^+) = B_{0,n}(0^+) = (-1)^{n+1}/n^4$ and, by means of relation (3),

$$b_{n,0} = (m_\uparrow/\bar{m})^{3/2} (-1)^{n+1}/n^{5/2} \quad \text{and} \quad b_{0,n} = (m_\downarrow/\bar{m})^{3/2} (-1)^{n+1}/n^{5/2}.$$

how to compute it numerically only on the pure imaginary axis $s = iS$ and its imperfectly known analytical properties in the complex plane do not guarantee a safe use of the residue theorem. Therefore reference [41] could only produce a conjecture, which we briefly recall.

1.4. Our 2016 conjecture on the fourth cluster coefficients

As in reference [40], we introduce the integral expression modeled on that of the third order coefficients ($\Lambda(s)$ is replaced by an operator determinant):

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

where the sum is taken on the internal angular momentum ℓ (i.e. after separation of the center of mass) of the four-body eigenstates and their internal parity $\varepsilon = \pm 1$ (limited to $\varepsilon = 1$ for $\ell = 0$), and where the operator $M_{n_\uparrow, n_\downarrow}(iS)$ is restricted to the corresponding (ℓ, ε) subspace. Then $I_{n_\uparrow, n_\downarrow}(\bar{\omega})$ gives exactly $B_{n_\uparrow, n_\downarrow}(\bar{\omega})$ (as is the case at order three) when the asymptotic decoupled objects (independent non-monoatomic packets of fermions strongly correlated by interactions, in terms of which the highly excited eigenstates are expressed) are distinguishable; otherwise, the quantum statistical effect of the indistinguishability of these objects, which contributes to the cluster coefficient even if they do not interact with each other, is missing, for the same reason that the cluster coefficients of the quantum ideal gas differ from those of the classical ideal gas. In the $(n_\uparrow, n_\downarrow) = (3, 1)$ configuration, called $3 + 1$ for short from here on, the possible asymptotic objects are a $\uparrow\uparrow\downarrow$ triplon or a $\uparrow\downarrow$ pairon of strongly correlated fermions; there can only be one at a time, which rules out any quantum statistical effect. On the other hand, in the $2 + 2$ configuration, the fermions can also decouple into two $\uparrow\downarrow$ pairons of correlated fermions, which are indistinguishable bosons; since these bosons do not interact, their partition function is easily calculated [41]. The conjecture of reference [41] is finally written

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

the $1 + 3$ case being deduced from the $3 + 1$ case by exchanging the two spin states thus changing the mass ratio $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$ to its inverse $1/\alpha$. For $\alpha = 1$, conjecture (5) is in agreement with the quantum Monte Carlo calculation of reference [42] down to the minimal accessible value of $\bar{\omega}$, $\bar{\omega} \approx 1$; it is also in agreement with a recent, more powerful numerical calculation down to values of $\bar{\omega} \ll 1$ [43, 44]. After using relation (3), it is also in agreement with the same powerful numerical calculation performed directly in the spatially homogeneous case of a quantization box [45]. Conjecture (5) is thus confirmed for equal masses.

1.5. Content of the study

The idea of the present work is to believe in the validity of conjecture (5) for any mass ratio α and to access the corresponding fourth cluster and virial coefficients, by numerically calculating the determinant of the operators $M_{n_\uparrow, n_\downarrow}^{(\ell, \varepsilon)}(iS)$, and then integrating over S and summing over ℓ and ε in expression (4). In reality, we still have to put bounds on the mass ratio, because the method of solving the four-body problem in a harmonic trap, at the basis of expression (5), assumes separability of the internal Schrödinger equation in hyperspherical coordinates; this is true only

if there is no Efimov scale invariance breaking at the three-body level, which constrains us to the intervals

$$\begin{aligned} \text{for } B_{3,1} : \alpha < \alpha_c^{3\text{body}} \simeq 13.60697 \quad ; \quad \text{for } B_{1,3} : \alpha > \frac{1}{\alpha_c^{3\text{body}}} \simeq 0.0734917 \quad ; \\ \text{for } B_{2,2} : \frac{1}{\alpha_c^{3\text{body}}} < \alpha < \alpha_c^{3\text{body}} \end{aligned} \quad (6)$$

where $\alpha_c^{3\text{body}}$, also noted $\alpha_c^{2,1}$, is the threshold of the three-body Efimov effect in the $\uparrow\uparrow\downarrow$ system, which occurs in the three-body internal momentum channel $L = 1$ [35, 46]. In using form (5) of the conjecture, it is also important to ensure that there is no four-body Efimov effect;⁴ indeed, it was shown that such an effect occurs only in the 3 + 1 or 1 + 3 configuration [39, 40], at mass ratio $\alpha_c^{4\text{body}} = \alpha_c^{3,1}$ or its inverse, hence the additional conditions

$$\text{for } B_{3,1} : \alpha < \alpha_c^{4\text{body}} \simeq 13.3842 \quad ; \quad \text{for } B_{1,3} : \alpha > \frac{1}{\alpha_c^{4\text{body}}} \simeq 0.074715 \quad (7)$$

Once the cluster expansion is known, the virial coefficients c_{n_1, n_l} are easily deduced, as rational functions of the cluster coefficients $b_{n'_1, n'_l}$ of total order $n'_1 + n'_l$ less than or equal to $n_1 + n_l$:⁵

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

⁴ Moreover, our assumption of a strictly scale-invariant interaction becomes difficult to satisfy experimentally if α , although on the non-Efimovian side, is too close to the tetramer appearance threshold. All this can be improved. One could complement the 3 + 1-body contact condition of the usual zero range interaction model of Footnote 1 by means of a length called “3 + 1-body parameter” in the $(\ell, \varepsilon) = (1, 1)$ [39] channel where the 3 + 1-body Efimov effect occurs. In this case, $B_{3,1}(0^+)$ and $b_{3,1}$ would be smooth functions of α at $\alpha = \alpha_c^{4\text{body}}$. Reference [21] proves and implements this for $B_{2,1}(0^+)$ that is in the 2 + 1 body problem.

⁵ To obtain them, we replace in the expansion of the pressure in the third side of equation (1) the densities by their virial expansion

$$\rho_\sigma \lambda^3 = \sum_{(n_1, n_l) \in \mathbb{N}^{2*}} n_\sigma b_{n_1, n_l} z_\uparrow^{n_1} z_\downarrow^{n_l}$$

from the thermodynamic relation $\rho_\sigma = \partial P / \partial \mu_\sigma$, and we adjust the c_{n_1, n_l} order by order to find the expansion in the second side of equation (1). It is simpler, at first, to write the virial expansion in the form of

$$P \lambda^3 / k_B T = \sum_{(n_1, n_l) \in \mathbb{N}^{2*}} a_{n_1, n_l} (\rho_\uparrow \lambda^3)^{n_1} (\rho_\downarrow \lambda^3)^{n_l}$$

and then, once the coefficients a_{n_1, n_l} have been calculated, to use the relation

$$c_{n_1, n_l} = a_{n_1, n_l} / (t_\uparrow^{n_1} t_\downarrow^{n_l})$$

where we have put $t_\sigma = (\bar{m}/m_\sigma)^{3/2}$. Note that $b_{1,0}t_\uparrow = b_{0,1}t_\downarrow = 1$, and that $a_{1,0} = a_{0,1} = 1$ whatever the reference mass \bar{m} according to the ideal gas law $P = (\rho_\uparrow + \rho_\downarrow)k_B T$. Replacing $b_{n,0}$ and $b_{0,n}$ by their expressions given in Footnote 3, we finally get

$$\begin{aligned} c_{3,1} &= \left(-3/4 + 1/\sqrt{3}\right)b_{1,1} - \left(3/\sqrt{2}\right)b_{2,1} - 3b_{3,1} + 3b_{1,1} \left(b_{2,1} + b_{1,1}/\sqrt{8}\right)t_\downarrow - b_{1,1}^3 t_\uparrow^2, \\ c_{2,2} &= -3 \left[b_{2,2} + (b_{1,2} + b_{2,1})/\sqrt{8} + b_{1,1}/8\right] + \left(9\sqrt{2}/8\right)b_{1,1}^2 (t_\uparrow + t_\downarrow) + 6b_{1,1} (b_{2,1}t_\uparrow + b_{1,2}t_\downarrow) - 3b_{1,1}^3 t_\uparrow t_\downarrow \end{aligned}$$

(the ideal gas coefficients $c_{4,0}$ and $c_{0,4}$ are given in explicit form later in the main text). We easily derive $b_{1,1}$ from equation (3) knowing that $B_{1,1}(0^+) = 1/2$. On the other hand, $b_{2,1}$ and $b_{1,2}$ are computed numerically from explicit integral expressions of reference [21].

$$\begin{aligned}
c_{2,1} &= -2b_{2,1} + \frac{4b_{1,1}b_{2,0}}{b_{1,0}} + \frac{b_{1,1}^2}{b_{0,1}} ; \\
c_{3,1} &= -3b_{3,1} - \frac{b_{1,1}^3}{b_{0,1}^2} - \frac{6b_{1,1}^2b_{2,0}}{b_{1,0}b_{0,1}} - \frac{24b_{1,1}b_{2,0}^2}{b_{1,0}^2} + \frac{3b_{1,1}b_{2,1}}{b_{0,1}} + \frac{12b_{2,0}b_{2,1}}{b_{1,0}} + \frac{9b_{1,1}b_{3,0}}{b_{1,0}} \\
c_{2,2} &= -3b_{2,2} - \frac{3b_{1,1}^3}{b_{0,1}b_{1,0}} - 9b_{1,1}^2 \left(\frac{b_{0,2}}{b_{0,1}^2} + \frac{b_{2,0}}{b_{1,0}^2} \right) \\
&\quad + 6b_{1,1} \left(\frac{b_{1,2}}{b_{0,1}} - \frac{2b_{0,2}b_{2,0}}{b_{0,1}b_{1,0}} + \frac{b_{2,1}}{b_{1,0}} \right) + \frac{6b_{0,2}b_{2,1}}{b_{0,1}} + \frac{6b_{1,2}b_{2,0}}{b_{1,0}} \quad (10)
\end{aligned}$$

plus the equations obtained by exchanging the two spin states \uparrow and \downarrow . Our expressions of $c_{n,0}$ are in agreement with [13, equation (10.33)], except that they extend it to a ratio m_\uparrow/\bar{m} different from unity through the coefficient $b_{1,0} = \lambda^3/\lambda_\uparrow^3$.

Before presenting our results, we need to choose the reference mass \bar{m} . To do so, we rely on the particular form of the cluster expansion commonly used in the literature for equal fugacities, which puts the number of spin states of the fermions as a factor of the series,

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

see in particular references [5, 7] where b_4 is measured for equal masses.⁶ Pulling out such a factor makes sense if the coefficient b_1 takes the very simple value equal to one. From Footnote 3, we thus derive the natural choice⁷

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

This choice also makes the virial expansion very simple in the case of equal phase space densities in the two spin states: one then has the nice expression $\rho_\sigma \lambda_\sigma^3 = \rho \lambda^3/2$ for the joint value, where $\rho = \rho_\uparrow + \rho_\downarrow$ is the total density, and one sets as in equation (11):

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

1.6. The results

We plot the unitary gas non-trivial fourth cluster coefficients (we do not plot here those of the ideal gas) as functions of the mass ratio α in Figure 1a (the values $b_{4,0} = -(m_\uparrow/\bar{m})^{3/2}/32$ and $b_{0,4} = -(m_\downarrow/\bar{m})^{3/2}/32$ taken from Footnote 3 are thus not plotted but of course contribute to b_4). The logarithmic scale used on the x-axis highlights the $\alpha \leftrightarrow 1/\alpha$ symmetry. For a mass ratio

⁶ The values of b_4 measured at ENS and MIT are in agreement with each other but within a factor ≈ 2 and respectively within $\approx 2\sigma$ and $\approx 3.5\sigma$ of the now accepted value [45], where σ is the experimental uncertainty. In the case of ENS, the discrepancy is due to the fact that all usable pressure data are of fugacity $z > 1$ and their naive extrapolation to $z = 0$ fails. Indeed, series (11) converges slowly and cannot be truncated to a good approximation at $n = 4$ even for a value as small as $z = 0.22$, see the augmented version [47] of publication [41] which draws this conclusion from the high precision equation of state obtained by diagrammatic Monte Carlo [11, 16].

⁷ In the context of Footnote 2, this choice amounts to taking as a reference one-body partition function \bar{Z}_1 the arithmetic mean of $Z_{1\uparrow}$ and $Z_{1\downarrow}$. It reduces indeed to $\bar{m} = m$ in the case of equal masses $m_\uparrow = m_\downarrow = m$. It ensures that the factor relating the trapped case to the homogeneous case in equation (3) is a uniformly bounded function of the masses (bounded from above by $2(n_\uparrow^3 + n_\downarrow^3)^{1/2}$ according to Hölder's inequality of parameters $p = 3/2$ and $q = 3$). These conditions are not satisfied if we take for \bar{m} the reduced mass of two \uparrow and \downarrow fermions as in reference [21].

$\alpha = 1$, we find the value $b_4 = 0.030(1)$ conjectured by Reference [41] and confirmed numerically by Reference [45]. As we move away from this point, the behavior of b_4 is first imposed by $b_{2,2}$ which causes it to change sign (the black curve and the green curve are almost parallel), before $b_{3,1}$ or $b_{1,3}$ prevails at high mass ratios α or $1/\alpha$ and causes b_4 to rise to large and positive values. At the $\alpha_c^{4\text{body}}$ or $1/\alpha_c^{4\text{body}}$ thresholds of the 3 + 1- or 1 + 3-body Efimov effect, marked by dotted vertical lines, b_4 has a finite limit but an infinite derivative like $b_{3,1}$ or $b_{1,3}$, see Section 2 below and Footnote 4. On the other hand, $b_{2,2}$ remains a smooth function, and would only exhibit an infinite derivative at the thresholds of the three-body Efimov effect, see Section 3. In Figure 1b, we see that the non-trivial fourth virial coefficients (we do not plot here the trivial ones $c_{4,0} = A_4(m_\uparrow/\bar{m})^{3/2}$ and $c_{0,4} = A_4(m_\downarrow/\bar{m})^{3/2}$, with $A_4 = (18 + 15\sqrt{2} - 16\sqrt{6})/192 \simeq 1.11 \times 10^{-4}$) have a similar structure even though they are of constant sign. We also notice that coefficient c_4 depends little on the four-body correlations induced by the interactions: an approximation of c_4 neglecting the contributions of the cluster coefficients $b_{3,1}$, $b_{2,2}$ and $b_{1,3}$, plotted in dashed line in Figure 1b, is everywhere close or very close to c_4 . The fairly recent possibility to prepare spatially homogeneous cold atomic gases in a flat-bottom potential box [48, 49] makes the measurement of the virial coefficients c_n very natural, since the densities ρ_σ are directly accessible there. This last prediction makes it however less motivating than the measurement of the cluster coefficients b_n in an inhomogeneous gas according to the specific technique for the harmonically trapped case [5], in which the chemical potentials μ_σ are the relevant variables to be used.⁸ For all practical purposes, we also give the fourth cluster and virial coefficients in numerical form in Table 1.

1.7. Outline of the rest of the article

In the following, we explain how we were able to obtain accurate results in a reasonable computation time, in particular by means of a convergence acceleration of the sum on ℓ in expression (4) relying on an asymptotic expansion of the summand and playing an essential role near the Efimovian thresholds. To do so, we had to generalize the analytical method of reference [40], implemented for 3 + 1 bodies, to the more difficult case of 2 + 2 bodies. In the 3 + 1-body case, we also highlight an unexpected non-monotonic dependence of $B_{3,1}(\bar{\omega})$ on $\bar{\omega}$, with change of sign, for mass ratios α close to 3.5 or 6.6. Section 2 deals with the 3 + 1-body case and Section 3 with the 2 + 2-body case in a harmonic potential.

2. Cluster coefficient for 3 + 1 fermions in a trap

We explain in this section how to perform an efficient numerical calculation of the quantity $I_{3,1}(\bar{\omega})$ defined by equation (4), for any value (zero or positive) of the reduced trapping frequency $\bar{\omega} = \hbar\omega/k_B T$. The desired cluster coefficient $B_{3,1}(\bar{\omega})$ follows directly from conjecture (5).

2.1. Formulation of the problem

Let us first recall the expression of the operator $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ involved in equation (4), as was obtained in reference [39]. We are dealing with the sum of a diagonal part $\mathcal{D}_{1,3}$ and a kernel

⁸In a trapping potential $U(\mathbf{r})$ common to both spin states and very elongated along the eigenaxis Oz , the cold-atom gases are well described by the local density approximation, and thus have well-defined local chemical potentials on the axis $\mu_\sigma^{\text{loc}}(z) = \mu_\sigma - U(0, 0, z)$, which makes the measurement of the grand-canonical equation of state, and thus of the cluster coefficients, very straightforward, following the clever proposal of reference [50], which is usable however only if $U(\mathbf{r})$ is harmonic.

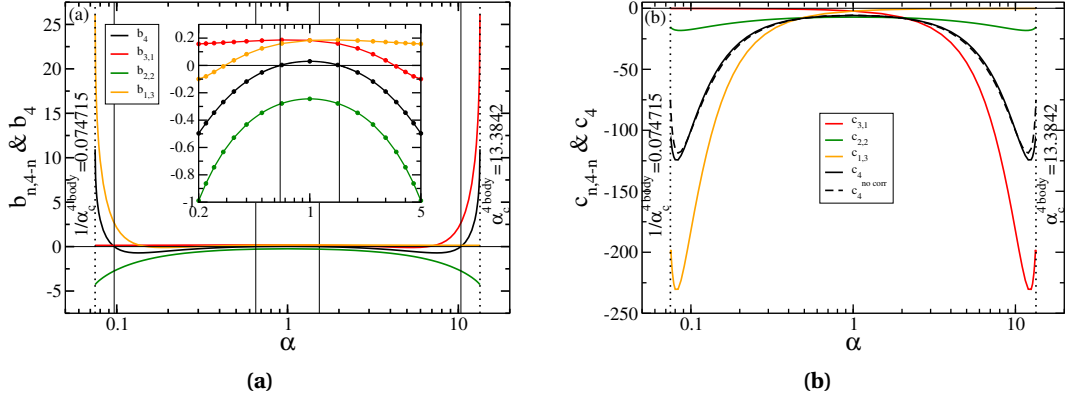


Figure 1 – For a spatially homogeneous unitary Fermi gas with two spin states \uparrow and \downarrow , fourth cluster (a) and virial (b) coefficients defined by equations ((1), (11), (13)) and predicted by conjecture (5) of reference [41], as functions of the mass ratio $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$. The $\uparrow\downarrow$ zero-range interaction is assumed to be scale-invariant in the four-body problem, which forces one to restrict oneself to the mass ratios between the critical values of the 3+1- and 1+3-body Efimov effect, indicated by the vertical dotted lines. In (a), the thin vertical lines mark the points where b_4 vanishes (always with sign change), namely $\alpha \approx 1.535$ and $\alpha \approx 10.355$ on the $\alpha > 1$ side, and the inset is an enlargement (the calculated points are represented by disks on interpolation lines). In (b), the dashed curve neglects in c_4 the true interaction-induced four-body component, the one $c_4^{\text{corr}} = -3(b_{1,3} + b_{2,2} + b_{3,1})/2$ that depends on $b_{3,1}$, $b_{2,2}$ or $b_{1,3}$, to represent $c_4^{\text{no corr}} = c_4 - c_4^{\text{corr}}$.

operator $\mathcal{K}_{3,1}$ acting on functions $f_{m_z}(x, u)$ of two continuous variables, the logarithm $x \in \mathbb{R}^+$ of the norm ratio of two wavevectors and the cosine $u = \cos\theta \in [-1, 1]$ of the angle between them, and a discrete variable, the magnetic quantum number m_z along the quantization axis Oz , varying in steps of two between $-\ell$ and ℓ for parity $\varepsilon = (-1)^\ell$, and between $-\ell + 1$ and $\ell - 1$ for parity $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ and $\ell \neq 0$. It reads in a mixed Dirac and Schrödinger notation:

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

The diagonal part is independent of angular momentum and scaling exponent iS . As we took advantage of the fermionic exchange symmetry of the state vector to restrict to $x > 0$, the kernel $\mathcal{K}_{3,1}$ is obtained by symmetrization of a primitive kernel $K_{3,1}$:⁹

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

⁹ In Dirac notation, $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} = (1 + U)K_{3,1}^{(\ell)}(1 + U)$ with the Hermitian involution $U = -P_x e^{i\pi L_x/\hbar}$, the parity operator P_x changing $|x\rangle$ into $|-x\rangle$ and the rotation operator of axis Ox of angle π such that $\exp(i\pi L_x/\hbar)|\ell, m_z\rangle = (-1)^\ell |\ell, -m_z\rangle$ [40].

Table 1 – Numerical values of the fourth cluster coefficients $b_{n,4-n}$ and virial coefficients $c_{n,4-n}$ of the spatially homogeneous unitary gas of two-spin-state \uparrow and \downarrow fermions, tabulated as functions of the mass ratio $\alpha = m_\uparrow/m_\downarrow$, for choice (12) of the reference mass \bar{m} . As we go from $b_{n,4-n}$ to $b_{4-n,n}$ and from $c_{n,4-n}$ to $c_{4-n,n}$ by changing α to $1/\alpha$, we restrict to $\alpha \geq 1$. We do not give the coefficients associated with the integers $n = 0$ and $n = 4$ because they are identical to those of the ideal gas, but we give the mean coefficients b_4 and c_4 useful in the case of equal fugacities or phase-space densities in the two spin states, see equations (11) and (13). The uncertainties on $b_{3,1}$, $b_{1,3}$ and $b_{2,2}$, not specified, are less than one percent. The given values are shown graphically in Figure 1.

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

The matrix elements of the primitive kernel depend on iS and contain an integral over a rotation angle ϕ around axis Ox as follows,

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

where L_x is the angular momentum operator along Ox . Here, as in reference [39], we have put for abbreviation:

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

To evaluate $I_{3,1}(\bar{\omega})$ numerically, one must first replace the operator by a finite size matrix, by truncating the variable x to x_{\max} and discretizing it according to the midpoint integration method, then by discretizing the variable θ (which we prefer to the variable u because it leads to a smooth integrand) according to the Gauss–Legendre integration method. Then we compute

the determinant of the matrix by putting it in the Cholesky form, to take advantage of the fact that the operator $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ is positive in the absence of $3+1$ -body Efimov effect. Finally, we compute the integral over S in the interval $[0, S_{\max}]$ by the midpoint method (we need to know the logarithm of the determinant at integer multiples of the integration step dS to obtain its derivative at half-integer multiples). We take into account the contribution of the omitted interval $[S_{\max}, +\infty]$ by means of an exponential approximation $A\exp(-BS)$ of the logarithmic derivative of the determinant justified by reference [40], where we have estimated the coefficients A and B by fitting on a neighborhood of S_{\max} , in practice the interval $[S_{\max} - 5/2, S_{\max}]$.

2.2. Asymptotic approximant and applications

It remains to take into account the truncation on the angular momentum ℓ at some ℓ_{\max} , which is unavoidable in a numerical calculation. In practice, it is not reasonable to go beyond $\ell_{\max} = 15$, because high values of ℓ lead to a complexity $O(\ell^3)$ and their numerical calculation would be very expensive in time. Unfortunately, this cut-off is not yet enough for large mass ratios $\alpha \gg 1$ if one aims at an accuracy on $B_{3,1}(0^+)$ better than one percent. The solution to this difficulty is to determine an asymptotic approximant $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ of the contribution $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ of angular momentum ℓ and parity ε to the desired quantity $I_{3,1}(\bar{\omega})$. Then, instead of neglecting completely the terms $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ for $\ell > \ell_{\max}$, we replace them by $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ as follows,

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

By using this method, we accelerate the convergence of the series: the error tends to zero more quickly with ℓ_{\max} . An exact asymptotic approximant to subleading order in ℓ is obtained by generalizing to $\bar{\omega} \neq 0$ the method of reference [40], which takes the kernel $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ as a small formal parameter and expands the logarithm of the determinant of $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}$ to second order:

$$\begin{aligned} \ln \det M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)} &= \ln \det^{\varepsilon} \left[\mathcal{D}_{3,1} + \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} \right] \\ &= \ln \det^{\varepsilon} [\mathcal{D}_{3,1}] + \ln \det^{\varepsilon} \left[\mathbf{1} + \mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} \right] \\ &= \text{const} + \text{Tr}^{\varepsilon} \left[\mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} - \frac{1}{2} \mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} \mathcal{D}_{3,1}^{-1} \mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)} + \dots \right] \end{aligned} \quad (19)$$

where the symbol ε in superscript of the trace and determinant means that we restrict ourselves to the subspace of values of m_z compatible with parity ε . The computation is done in Appendix A, and the corresponding expression of $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ is given in equation (47) in the form of multiple integrals. For this already very elaborate choice, the first values of the approximant ($0 \leq \ell \leq \ell_{\max}$) are still easy to compute numerically with the same truncation and discretization as for the full determinant, but it would be tedious to go to larger values of ℓ , which is however required by the second sum in the second side of equation (18); fortunately, the infinite series in the third side of equation (18) has a simple integral expression, see equation (59), which can even be expressed analytically for $\bar{\omega} = 0^+$ in terms of known functions such as the dilogarithm function, see equation (60). The efficiency of our asymptotic approximant can be seen in Figure 2, where it is compared to the numerical result. The figure shows, as a function of the mass ratio α , in which angular momentum channels ℓ the approximant deviates by more than one percent from the exact value (this is the accuracy on the cluster coefficient we aim for in this work); these channels must be included in the numerical sum from 0 to ℓ_{\max} .

An interesting by-product of our convergence acceleration method is to obtain an asymptotic equivalent of the angular momentum ℓ and parity ε contribution to the cluster coefficient

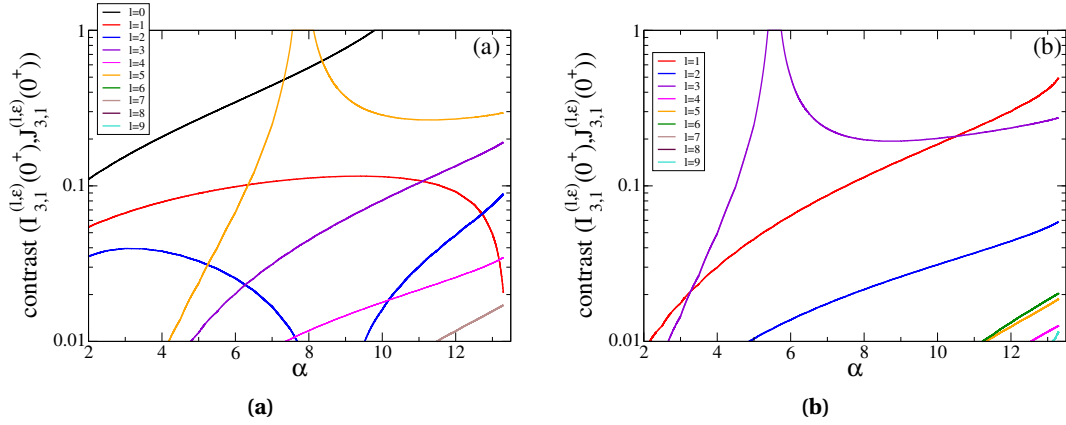


Figure 2 – Contrast between the contribution $I_{3,1}^{(\ell,\epsilon)}$ of the angular momentum ℓ and parity ϵ channel to $I_{3,1}$ and its asymptotic approximant $J_{3,1}^{(\ell,\epsilon)}$ given by equation (47), as a function of the mass ratio $\alpha = m_1/m_l$ and ℓ , in the limit $\bar{\omega} = 0^+$. The contrast between two real quantities a and b is here the ratio $|a-b|/(|a|+|b|)$. (a) Case $\epsilon = (-1)^\ell$. (b) Case $\epsilon = (-1)^{(\ell+1)}$ (which imposes $\ell > 0$). The numerical truncation and discretization parameters are those of Figure 3. The contrast saturates to one (as it happens for $\ell = 0$ and $\ell = 5$ in (a), for $\ell = 3$ in (b)) when the two compared quantities are of opposite signs.

$B_{3,1}(0^+)$; it suffices to keep the contribution linear in $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}$ in equation (19) and to determine its dominant behavior at large ℓ with Cauchy's integral theorem, as done in Appendix A. We find:

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

where

$$C_0 = \frac{(1 - \cos \xi_0)(5/4 + \cos \xi_0)}{(1/2 + \cos \xi_0)(z_0 - 1/z_0)} \quad (21)$$

and $C_1 = 4(z_1 - 1/z_1)(\cos \xi_1 - 1/2) \left[(1 + \alpha^{-1}) \cos \xi_1 + \frac{1 + 3\alpha^{-1}}{4} \right]$

with the shorthand notation $\cos \xi_n \equiv (z_n + 1/z_n)/2$, $n = 0$ or 1 , the complex number z_0 given by equation (66) and the complex number $z_1 = -z_0^*$. This is the generalization to $3+1$ fermions of a result obtained for three bosons in reference [20], see equation (42) of this reference. Thus, to within a power law factor, $I_{3,1}^{(\ell,\epsilon)}(0^+)$ tends exponentially to zero with ℓ , with irregular oscillations due to the fact that the argument of z_0 is in general not commensurable to π .

2.3. Born–Oppenheimer regime

In the limit $\alpha \rightarrow 0$, we notice that z_0 tends to zero in equation (66), $z_0 \sim i\sqrt{\alpha/3}$, so we expect the exponential suppression of the summand in (4) to become very fast for $3+1$ fermions. This expectation is confirmed numerically and, for $\alpha = 0$, only the $\ell = 0$ channel contributes. In this case, the single spin- \downarrow fermion is infinitely massive and behaves for the spin- \uparrow fermions as a fixed pointlike scatterer, of infinite s -wave scattering length and placed at the center of the trap. The

Born–Oppenheimer approximation becomes exact and gives the time-independent Schrödinger equation on the wave function $\Psi(\mathbf{r}_\downarrow)$ of the heavy particle:¹⁰

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

In the $n_\uparrow + 1$ fermion trapped problem, $W(\mathbf{0})$ is the energy of an eigenstate of n_\uparrow non-interacting fermions in the presence of the scattering center. A spin- \uparrow fermion of orbital quantum numbers (n, ℓ, m_z) sees the scattering center only if $\ell = 0$, in which case its spectrum is lowered by $\hbar\omega$, thus having energy levels

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

Since the Born–Oppenheimer energy E_{BO} is the sum of $W(\mathbf{0})$ and a vibrational energy level of a spin- \downarrow particle in the trap, we conclude that

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

where $Z_{n_\uparrow}^{\text{scat}}$ is the canonical partition function of a ideal gas of n_\uparrow fermions with spectrum (23), i.e. in the presence of the fixed scatterer, Z_1 is as in equation (2) the partition function of a single fermion and $Z_{n_\uparrow,1}$ is that of the unitary gas of $n_\uparrow + 1$ trapped fermions. It is convenient to calculate its deviation $\Delta Z_{n_\uparrow,1}$ from that of the ideal gas of $n_\uparrow + 1$ trapped fermions, since (23) differs from the ordinary spectrum only in the zero angular momentum channel. Taking into account Fermi statistics via the Pauli exclusion principle, and [41, equations (80)–(83)] which relate the cluster coefficients of the trapped system to the few-body partition functions, we find that

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

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

The value (26) of the limit is in perfect agreement with our numerical calculation of expression (4) not only for $\bar{\omega} = 0^+$, where $B_{3,1}(0^+) \rightarrow 1/16 = 0.0625$, as seen in Figure 3a, but, as we have verified, for all $\bar{\omega}$, which is an additional test of conjecture (5) in the 3 + 1-body case.¹¹ As a side remark, let us point out that it is possible to go to the next orders by using the grand-canonical version of equation (24),

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

¹⁰The particles are at fixed temperature T so, in the $m_\downarrow \rightarrow +\infty$ limit, the spin- \downarrow fermion occupies a region around the center of the trap of radius $R = O((k_B T / m_\downarrow \omega^2)^{1/2})$. On the other hand, the Born–Oppenheimer potential $W(\mathbf{r}_\downarrow)$ has an energy scale $k_B T$ and varies with a length scale λ_\uparrow , the de Broglie thermal wavelength of the light fermions, if $k_B T > \hbar\omega$, and it is of the order of $\hbar\omega$ and varies with a length scale $(\hbar / m_\uparrow \omega)^{1/2}$, the size of the ground vibrational state of a light fermion, otherwise. The variation of $W(\mathbf{r}_\downarrow)$ becomes negligible in all cases and we can replace it by $W(\mathbf{0})$. For the same reason, the so-called scalar or topological potential, which is added to the potential W in the full adiabatic approximation [51], can be omitted.

¹¹In the 2 + 1-body case, starting from the analytic integral expression of $B_{2,1}(\bar{\omega})$ of reference [21] in terms of the transcendental Efimov function $\Lambda_{2,1}^{(\ell)}$ on the pure imaginary axis, and by showing in the limit $\alpha \rightarrow 0^+$ that $\Lambda_{2,1}^{(\ell)}$ (iS) tends to 1 for $\ell > 0$ and tends to $1 + 1 / \text{ch}(\pi S/2)$ for $\ell = 0$ (for example by means of [38, equation (46)]), we find the second result in equation (25).

Table 2 – Numerical values of the fourth cluster coefficients $B_{3,1}(0^+)$ and $B_{1,3}(0^+)$ of the unitary Fermi gas in an infinitesimal-stiffness trap, tabulated as functions of the mass ratio $\alpha = m_\uparrow / m_\downarrow$. Since we go from one coefficient to the other by changing α to $1/\alpha$, we limited ourselves to $\alpha \geq 1$. The uncertainties, not specified, are less than one percent. These values are shown graphically in Figure 3a.

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

where Ξ_\uparrow ($\Xi_\uparrow^{\text{scat}}$) is the grand partition function of the ideal gas of spin- \uparrow fermions of fugacity z_\uparrow in the absence (presence) of the scattering center and Ξ is that of the two-component unitary gas. Expanding the grand potential $\Omega = -k_B T \ln \Xi$ as in equation (2), we obtain¹²

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

In the special case $\bar{\omega} = 0^+$, the exponential in the fourth side of (28) reduces to $\sqrt{1 + z_\uparrow}$, easy to expand into powers of z_\uparrow , hence the result at all orders in terms of Euler's Γ function:

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

2.4. The results

Our numerical results for $I_{3,1}(0^+)$, hence for the cluster coefficient $B_{3,1}(0^+)$ from equation (5), are given explicitly in Table 2 and are plotted as functions of the mass ratio in Figure 3a, with no error bars but with an uncertainty of less than one percent. We find that $B_{3,1}(0^+)$ is positive, except over an interval $[\alpha_1, \alpha_2]$, as best seen in the enlargement included in the figure. At large values of α , $B_{3,1}(0^+)$ shows a marked growth that we attribute to the three-body Efimov effect; it has a finite limit at the threshold of the 3 + 1-body Efimov effect where our computation stops, reached with an infinite slope and that we determine by extrapolation, see the dashed curves in Figure 3a and the explanations which follow,

$$B_{3,1}(0^+) \xrightarrow[\alpha \rightarrow (\alpha_c^{4\text{body}})^-]{} 2.47 \pm 0.03 \quad (30)$$

2.5. Near the 3 + 1-body Efimovian threshold

The limit $\alpha \rightarrow (\alpha_c^{4\text{body}})^-$ in equation (30) is difficult to achieve numerically with precision for several reasons. First, if $\alpha \rightarrow +\infty$, the exponential decay rate $\ln(1/|z_0|)$ in equation (20) tends to zero as $\alpha^{-1/2}$ so the convergence of the series $I_{3,1}(0^+)$ becomes slower and slower with ℓ ;

¹²A sum over an integer s in the fourth side was introduced by taking the logarithm of the infinite product in the third side, expanding around 1 the function \ln into an integer series of index s and then summing over n the resulting geometric series.

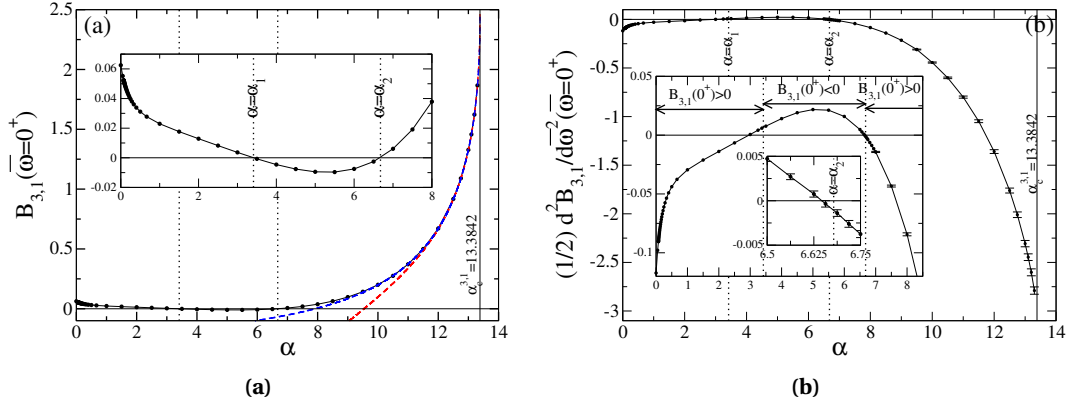


Figure 3 – (a) Fourth cluster coefficient $B_{3,1}(0^+)$ of the unitary Fermi gas in an infinitesimally stiff harmonic trap, as a function of the mass ratio $\alpha = m_1/m_\perp$. Disks (connected by a thin line): Our numerical calculation of expression (4) for $(n_1, n_\perp) = (3, 1)$ and application of conjecture (5), with truncation parameters $x_{\max} = 5$, $S_{\max} = 25$, $\ell_{\max} = 15$ and discretization $dx = 1/10$, $dS = 1/8$, $n_\theta = 37$ (this is the number of values of θ in the Gauss–Legendre integration method); for $\alpha > 10$ and $0 \leq \ell \leq 5$, we take instead $x_{\max} = 20$ and $n_\theta = 25$ to keep the error below one percent. We use the convergence acceleration method (18) and extrapolate to $S_{\max} = +\infty$ as explained in the text. Blue dashed line: cubic fit in the variable $X = (\alpha_c^{4\text{body}} - \alpha)^{1/2}$ on the interval $10 \leq \alpha \leq 13.3$, i.e. $B_{3,1}(0^+) = 2.4401 - 2.1627X + 0.64137X^2 - 0.069596X^3$, where $\alpha_c^{4\text{body}} \simeq 13.3842$ is the 3 + 1-body Efimovian threshold (vertical solid line). Red dashed line: same on the interval $12.5 \leq \alpha \leq 13.3$, i.e. $B_{3,1}(0^+) = 2.4637 - 2.2834X + 0.82318X^2 - 0.15269X^3$. The inset is an enlargement showing better $B_{3,1}(0^+)$ vanishing with sign change at $\alpha_1 \simeq 3.412$ and $\alpha_2 \simeq 6.678$ (vertical black dotted lines). (b) Same for the half-second derivative $(1/2)B_{3,1}''(0^+)$ of the cluster coefficient with respect to the reduced trapping frequency $\bar{\omega} = \hbar\omega/k_B T$, with the differences that (i) we do not give a fit in the variable X , (ii) we put error bars because the relative uncertainty may now exceed one percent, (iii) we include a magnification in the enlargement to make it clear that the second zero (with sign change) of $(1/2)B_{3,1}''(0^+)$ is very close to but distinct from that of $B_{3,1}(0^+)$ (always indicated by a vertical dotted line).

fortunately, as the mass ratio α remains below the four-body Efimovian threshold, $\ln(1/|z_0|)$ does not become so small (it remains above 0.267) and the problem is solved by the convergence acceleration (18) if one is satisfied with an error on $B_{3,1}(0^+)$ less than one percent (see Figure 2). Secondly, the 3 + 1-body Efimov effect about to appear in the $\ell = 1, \varepsilon = +1$ channel forces to increase x_{\max} to the values considered in Reference [39], at least in the $\ell \leq 5$ angular momentum channels; this increases the computation time a lot and leads to a singularity of type

$$(\alpha_c^{4\text{body}} - \alpha)^{1/2}$$

which has to be taken into account in the extrapolation of $B_{3,1}(0^+)$ to $\alpha = \alpha_c^{4\text{body}}$, see dashed lines in Figure 3a and the legend of the figure.¹³ Third, the threshold for the three-body Efimov

¹³This singularity is present in one of the scaling exponents s_i of the 3 + 1-body unitary problem, the one s_0 whose square vanishes by changing sign at the Efimovian threshold, in the $\ell_0 = 1$ channel [39]. Now $B_{3,1}(0^+)$ depends linearly on the scaling exponents. We see it well on the universal component of the third cluster coefficient of the unitary Bose gas in equation (36) of reference [20] by making $\bar{\omega}$ (denoted x in this reference) tend to zero; we also see it for 2 + 1

effect $\alpha_c^{2,1} \simeq 13.60697$ is close by and affects all angular momentum channels ℓ of the four-body problem [40], even though it occurs in the $L = 1$ angular momentum channel of the $2 + 1$ fermion problem. Indeed, the continuum spectrum of the $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ operator is the union of continua corresponding to $2 + 1$ fermions strongly correlated by the interactions and a decoupled spin- \uparrow fermion, thus parametrized by a three-body angular momentum L [39]. The contribution of the continuum of angular momentum L to the $3 + 1$ cluster coefficient in the (ℓ, ε) channel is written up to a factor [40]:

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

The eigenmodes of the continuum have asymptotically a plane wave structure in the space of the variable x , i.e. they are superposition, when $x \rightarrow +\infty$, of an incident wave $\exp(-ikx)$ and a reflected wave $-\exp[i\theta_L(k, S)]\exp(ikx)$. Here the phase shift $\theta_L(k, S)$ is a function of the wavenumber $k > 0$ (fictitious because x is not a real position), of the pure imaginary scaling exponent iS and of the three-body angular momentum L . We see in expression (31) the transcendental Efimov function $\Lambda_{2,1}^{(L)}$ whose roots are the scaling exponents of the unitary $2 + 1$ -body problem with angular momentum L . This is because the continuum modes of wavenumber k correspond to the eigenvalue $\Lambda_{2,1}^{(L)}(ik)$ of $M_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ [39].¹⁴ The key point now is that the lower edge of the $L = 1$ continuum, namely the minimum of $\Lambda_{2,1}^{L=1}(ik)$ with respect to the variable k , tends to zero when $\alpha \rightarrow \alpha_c^{2,1}$ because of the $2 + 1$ -body Efimov effect. This has two consequences. First, a practical consequence in the calculation of $I_{3,1}$ on a computer: as the continuum is made discrete by truncating x at x_{\max} , its lower edge deviates from the true edge by about $1/x_{\max}^2$,¹⁵ this numerical artifact forces to significantly increase x_{\max} , fortunately only for four-body angular momentum channels $\ell \leq 5$ as long as $\alpha \leq 13.3$. Then, a physical consequence: a second singularity appears in $I_{3,1}(0^+)$, of the form $(\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$, again a square root, now centered on the three-body Efimovian threshold.¹⁶ This three-body singularity occurs at a point very close to the four-body singularity, which casts doubt on the accuracy of the extrapolation made in Figure 3a

fermions in reference [21]. More precisely, $B_{3,1}(0^+) = -(\ell_0 + 1/2)s_0 + \dots$ where the ellipse is a smooth function of α in the neighborhood of $\alpha_c^{3,1}$. As $s_0^2 \simeq c_0(\alpha_c^{3,1} - \alpha)$ with $c_0 \simeq 2.2$ near the threshold [39], we find that

$$dB_{3,1}(0^+)/dX = -(\ell_0 + 1/2)c_0^{1/2} \simeq -2.2 \quad \text{at} \quad X \equiv (\alpha_c^{3,1} - \alpha)^{1/2} = 0.$$

This constraint is fairly well satisfied by the fits in Figure 3a.

¹⁴ In the absence of a cutoff in x space ($x_{\max} = +\infty$), we fall into a paradox: k spans the continuous set \mathbb{R}^+ independently of the variable S and the derivative of the eigenvalue $\Lambda_{2,1}^{(L)}(ik)$ with respect to S is zero, so the continuum should not contribute to $I_{3,1}$ in equation (4). The right way to reason is to put a cutoff x_{\max} that we make tend to infinity at the end, with the condition that the eigenmodes vanish at $x = x_{\max}$. The resulting equation $\theta_L(k, S) = -2kx_{\max}$ [2 π] quantizes k , i.e. restricts it to a discrete set, and makes it S -dependent as the phase shift $\theta_L(k, S)$.

¹⁵ In fact, the wavenumber k varies in steps of the order of $1/x_{\max}$, as shown in Footnote 14, and $\Lambda_{2,1}^{L=1}(ik)$ varies quadratically near its minimum.

¹⁶ To the left of this threshold, we write à la Weierstrass $\ln \Lambda_{2,1}^{(L=1)}(ik) = \ln[(k^2 + \sigma_0^2)/(k^2 + 1)] + \dots$ where the ellipse is a regular function of α even at the threshold and $\sigma_0 > 0$ is the scaling exponent of the $2 + 1$ -body problem whose square vanishes by changing sign at the threshold. Very close to the threshold, $\sigma_0 \ll 1$ and, assuming as in reference [40] that $\theta_{L=1}(k, S) \sim b(S)k$ when $k \rightarrow 0$, where the scattering radius $b(S)$ is an unknown function of S , we find that $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon) \neq (1,+)}(0^+)$ contains a singularity

$$\propto \int_0^{+\infty} dk \left[k^2 / (k^2 + \sigma_0^2) - k^2 / (k^2 + 1) \right] \propto 1 - \sigma_0 \quad \text{where} \quad \sigma_0 \sim \gamma_0 (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2} \quad \text{and} \quad \gamma_0 \simeq 0.438.$$

We have confirmed this prediction by a specific numerical calculation of $I_{3,1}(0^+)$ in the $\ell = 0$ channel very close to the threshold, going up to $\alpha = 13.59$; a nice linear law in Y is observed and a fit gives $I_{3,1}^{(\ell=0)}(0^+) \simeq 0.026 + 0.040Y$ where the variable Y is the one in equation (32).

which did not take it into account. We remedy this by fitting functions including the two singularities, polynomial in the quantities $X = (\alpha_c^{3,1} - \alpha)^{1/2}$ and $Y = (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$:

$$\begin{aligned} I_{3,1}(0^+) &= A_0 + A_1 X + A_2 (Y - Y_0) + A_3 X^2 \\ \text{and } I_{3,1}(0^+) &= A_0 + A_1 X + A_2 (Y - Y_0) + A_3 X^2 + A_4 X^3 + A_5 (Y^3 - Y_0^3) \end{aligned} \quad (32)$$

where $Y_0 = (Y^2 - X^2)^{1/2} = (\alpha_c^{2,1} - \alpha_c^{3,1})^{1/2}$ is also the value of Y at $X = 0$. On the interval $10 \leq \alpha \leq 13.3$, this leads to $A_0 = 2.495$ and $A_0 = 2.447$ hence the final result (30), which supports the more naive one in Figure 3a.

2.6. Case $\bar{\omega} \neq 0$

To conclude this section, let us briefly study the dependence on trap stiffness of the cluster coefficient $B_{3,1}(\bar{\omega})$. One experimentally useful way to account for this is to calculate the first deviation from the zero stiffness limit, of even degree in $\bar{\omega}$ since the integrand of equation (4) is an even function of $\bar{\omega}$:

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

This allows to quantify the error due to the local density approximation, systematically used in the experiment and which amounts to keeping only the first term of Taylor expansion (33). It is easy to see that the small parameter controlling this approximation can only be $\bar{\omega}$ in the unitary limit: the approximation only makes sense if the equilibrium correlation length of the homogeneous gas in each spin state σ , i.e. the de Broglie thermal length λ_σ in the nondegenerate case due to scale invariance, is much smaller than the spatial radius of the trapped gas $R_\sigma = (k_B T / m_\sigma \omega^2)^{1/2}$; one has indeed $\lambda_\sigma / R_\sigma \propto \hbar \omega / k_B T = \bar{\omega} \ll 1$. To obtain an integral expression for the second derivative $B_{3,1}''(0^+)$ and implement convergence acceleration, we take twice the derivative with respect to $\bar{\omega}$ of equation (4) under the integral sign, equation (18) under the sum sign and expressions ((47), (59)) and then make $\bar{\omega}$ tend to zero.

The result is plotted as a function of the mass ratio in Figure 3b.¹⁷ Let us try to interpret it in a naive scenario: as in the case of equal masses $m_\uparrow = m_\downarrow$ studied in reference [41], $B_{3,1}(\bar{\omega})$ would simply be a monotonic function of $\bar{\omega}$, of course of zero limit at infinite $\bar{\omega}$. The second derivative at the origin would then always have the opposite sign to the value at $\bar{\omega} = 0$. This explains Figure 3b if we look on a large scale: $B_{3,1}''(0^+)$ seems indeed to vanish by changing sign at the same mass ratios $\alpha = \alpha_1$ and $\alpha = \alpha_2$ as $B_{3,1}(0^+)$. However, we can see on a first enlargement, in inset in Figure 3b, that this scenario fails at α_1 (it still seems to hold at α_2). Indeed, as shown in Figure 4a, when α approaches $\alpha_1 \simeq 3.412$ from lower values (top to bottom curves), the function $\bar{\omega} \mapsto B_{3,1}(0^+)$ ceases to be monotonic, becomes convex near the origin and reaches an absolute (positive) maximum at a point $\bar{\omega}_0 > 0$ that departed from zero before $B_{3,1}(0^+)$ becomes < 0 . This absolute maximum persists when α continues to grow beyond α_1 , but its position moves toward $+\infty$ and out of Figure 4a. A second enlargement, in the inset of Figure 3b, shows that the simple scenario also fails (but just barely) at the second nodal point $\alpha_2 \simeq 6.678$: when α approaches α_2 by higher values (top-down curves in Figure 4b¹⁸), an absolute (negative) minimum coming

¹⁷For values of α close to α_2 , we improve the convergence acceleration method by approximating

$$\left[I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)} \right]''(0^+) - \left[J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)} \right]''(0^+) \quad \text{for } \ell > \ell_{\max} \quad \text{by } A \ell^\gamma \operatorname{Re} \left(e^{i\psi} z_0^\ell \right)$$

rather than by 0 as in equation (18); the real parameters A , ψ and γ are obtained by fitting on the interval $6 \leq \ell \leq \ell_{\max}$, and the complex number z_0 is that of the asymptotic law (20).

¹⁸By varying all truncation and discretization parameters in the numerical calculation, we estimate the uncertainty on the curves in Figure 4b closest to the horizontal axis to be 2×10^{-5} (e.g., for $\alpha = 6.6875$); the plotted dependencies on $\bar{\omega}$ are thus significant.

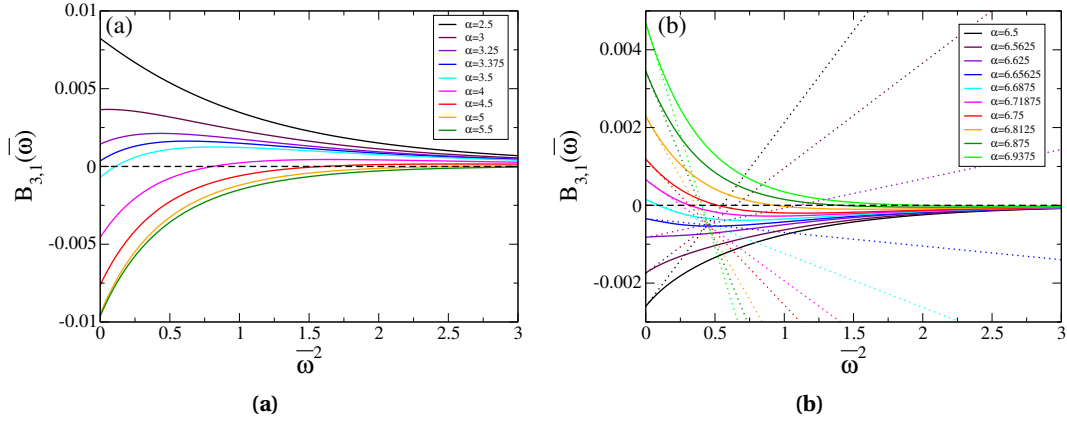


Figure 4 – Fourth cluster coefficient $B_{3,1}(\bar{\omega})$ of the trapped unitary Fermi gas as a function of the reduced stiffness $\bar{\omega}^2 = (\hbar\omega/k_B T)^2$ of the harmonic potentials, for different mass ratios $\alpha = m_l/m_i$ close to the nodal points $\alpha_1 \simeq 3.412$ (a) and $\alpha_2 \simeq 6.678$ (b) of $B_{3,1}(0^+)$, which Figure 3b, i.e., the relationship between the signs of the value and curvature of $B_{3,1}(\bar{\omega})$ at the origin. In (b), the slopes of the tangents at the origin (dotted) are taken from Figure 3b.

from the $\bar{\omega} = +\infty$ side approaches the origin and becomes more pronounced, before $B_{3,1}(0^+)$ in turn becomes < 0 . For convenience, we give the values of $B_{3,1}(\bar{\omega})$ and its half-second derivative at $\bar{\omega} = 0^+$ in numerical form in Table 3, for the mass ratios of Figure 4. To conclude, let us finally point out that the simple scenario assuming monotonicity of $B_{3,1}(\bar{\omega})$ was actually highly improbable because it implied that the $3+1$ -body cluster coefficient in the trap was zero for any stiffness, $B_{3,1}(\bar{\omega}) \equiv 0$, at mass ratios where $B_{3,1}(0^+) = 0$.

Table 3 – Numerical values of the fourth cluster coefficient $B_{3,1}(0^+)$ and its half-second derivative $(1/2)B_{3,1}''(0^+)$ with respect to $\bar{\omega}$, given with their significant digits, for the mass ratios of Figure 4. The half-derivatives are plotted (some with an error bar) in 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

3. Cluster coefficient for $2+2$ fermions in a trap

We explain in this section how to perform an efficient numerical calculation of the quantity $I_{2,2}(\bar{\omega})$ defined by equation (4), limiting ourselves for simplicity to the case $\bar{\omega} = 0^+$, i.e. to a trap of infinitesimal stiffness. The unitary gas cluster coefficient $B_{2,2}(0^+)$ can be deduced by conjecture (5). As the two spin states \uparrow and \downarrow play perfectly symmetric roles here, $B_{2,2}(0^+)$ is invariant by changing the mass ratio α into its inverse $1/\alpha$ and one can limit the numerical calculations to the case $\alpha \geq 1$. In contrast to the previous Section 2, one can go up to the three-body Efimovian threshold, $\alpha < \alpha_c^{2,1}$, since there is no $2+2$ -body Efimov effect [40].

3.1. Formulation of the problem

Recall the expression of the Hermitian operator $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ given in reference [40] for angular momentum ℓ , parity $\varepsilon = \pm$ (restricted to $+$ if $\ell = 0$) and the pure imaginary scale exponent iS , with the same Schrödinger–Dirac notation as in equation (14) but with the difference that the variable x varies on the whole real axis:

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

with a diagonal part independent of iS , angular momentum and magnetic quantum number m_z :

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

and a matrix integral kernel decomposed into three contributions $K_{2,2} = K_1 + K_2 + K_3$ written line by line in this order:

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

with the angle $\gamma(x, u) = \arctan\{\text{th}(x/2)[(1-u)/(1+u)]^{1/2}\}$, the angle $\theta \in [0, \pi]$ such that $u = \cos\theta$ and the notation $\nu = \sin\theta$. The third contribution K_3 is nonzero only in the parity sector $\varepsilon = (-1)^\ell$ (in the other sector, we have $\langle \ell, m_x = 0 | \ell, m_z \rangle \equiv 0$). Contrary to the first two contributions, it is a singular function of the coordinates (x, u) and (x', u') , diverging at the point $(x = 0, u = -1)$, or equivalently $(x = 0, \theta = \pi)$. In the numerical calculation, limited to the rectangle $(x, \theta) \in [-x_{\max}, x_{\max}] \times [0, \pi]$, we isolate the singularity by a half disk of radius R and center $(0, \pi)$, in which we use a logarithmic-polar grid as in reference [40]¹⁹, and outside of which we use the same type of grid as in Section 2.

3.2. Asymptotic approximant

It remains to implement the same convergence acceleration technique as in equation (18) in the particular case $\bar{\omega} = 0^+$,

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

¹⁹ We set $(x, \pi - \theta) = Re^t(\cos\psi, \sin\psi)$, where $t_{\min} < t < 0$ and $0 < \psi < \pi$. We have chosen $R = 2/5$. The integration on ψ is done by the Gauss–Legendre method with 15 points (series $0 \leq \ell \leq 4$) or 25 points (series $0 \leq \ell \leq 6$), the integration on t with the midpoint rule and a step $dt = 0.1$ or $dt = 0.2$. We extrapolate quadratically to $t_{\min} = -\infty$ from the three choices $t_{\min} = -10$, $t_{\min} = -20$ and $t_{\min} = -40$.

where, as in Section 2, $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ is the contribution of the angular momentum ℓ and parity ε channel to the desired quantity $I_{2,2}(0^+)$, and $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ is an asymptotic approximant, valid at large angular momentum. Reference [40] gives such an approximant only in the tractable unnatural-parity sector $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ where $K_3 \equiv 0$, by perturbatively treating K_1 and K_2 to second order in the logarithm of the determinant of $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$. The calculation is very similar to equation (19), with the simplification that the linear terms and the square terms are independent of S and can be absorbed into the constant, so that only the crossed terms remain [40]:

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

In the more challenging natural-parity sector $\varepsilon = (-1)^\ell$, a difficulty arises: because of its divergent character, we cannot treat K_3 perturbatively. We first perform a gauge transform on K_j eliminating the S -dependence of K_3 without changing the determinant, which is indicated by a tilde,

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

then we isolate a purely “external” part of \tilde{K}_3 , acting on the “orbital” space of (x, u) but not on that of the $|\ell, m_z\rangle$ ’s, i.e. such that $\tilde{K}_3 = \tilde{K}_3^{\text{ext}} \otimes |\ell, m_x = 0\rangle \langle \ell, m_x = 0|$. Finally, we carry out an expansion of the logarithm of the determinant in powers of K_1 and K_2 without any hypothesis on \tilde{K}_3^{ext} :

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

In this expression, a resummed form of the external part appears:

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

An optimal writing of \tilde{K}_3^{ext} is obtained by reparameterization of the Faddeev ansatz of the 2 + 2-body problem: we consider that the functions on which operator $M_{2,2}$ acts now depend on the relative wave vectors and the center of mass of the particles 2 and 4 as in reference [52] instead of the single-particle wave vectors \mathbf{k}_2 and \mathbf{k}_4 as in references [39,40]; this avoids the half-disk around the singularity and leads us to numerically invert an operator acting on a single real variable instead of the two variables (x, u) . This leads to a considerable saving of computation time and simplification. The reader is referred to Appendix C for more details. We find numerically that the second term in the third side of equation (40), formally of the first order, is actually of the same order of magnitude as the third term (their contributions to $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ tend to zero exponentially with ℓ with the same rate, see Figure 5a). The resummed kernel \tilde{K}_3^{ext} is thus, like K_1 and K_2 , a first-order infinitesimal; consequently, we neglect the fourth and fifth terms of equation (40) to keep

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

If one wants, one can undo the gauge transform (39) in the third term without changing the trace, to recover contribution (38). In Appendix B, we give a more explicit expression of the asymptotic

approximant $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ deduced from expansions (38) and (42), see equations ((71), (72), (78), (80)), as well as its sum over ℓ and over ε , see equations ((81), (86)).

3.3. Application and results

The sum over ℓ in $I_{2,2}(0^+)$ shows the same phenomenon of slow convergence as in $I_{3,1}(0^+)$ at large values of the mass ratio α . We again find that the asymptotic approximant, here $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$, tends to zero exponentially in ℓ , with a rate c that we compute numerically for convenience in the tractable parity sector $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$ and for a mass ratio $\alpha \gtrsim 3$:²⁰

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

The rate c is plotted as a function of the mass ratio in Figure 5b. Here, as in Section 2, a $c \propto \alpha^{-1/2}$ law is observed at large mass ratios. In this regime, the convergence acceleration method is an indispensable aid to numerical calculation, as shown in Figure 5c. It allows us to obtain the fourth cluster coefficient $B_{2,2}(0^+)$ of the trapped system, given in numerical form in Table 4 and plotted as a function of the mass ratio in Figure 6, with an uncertainty of less than one percent in a reasonable computation time. Because of the 2 + 1-body Efimov effect, this coefficient has a $(\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$ singularity near the threshold, for the same reason as discussed around equation (31) in Section 2. We take this into account in the dashed fits in Figure 6, to obtain the extrapolation

$$B_{2,2}(0^+) \underset{\alpha \rightarrow (\alpha_c^{3\text{body}})^-}{\longrightarrow} -0.737 \pm 0.007 \quad (44)$$

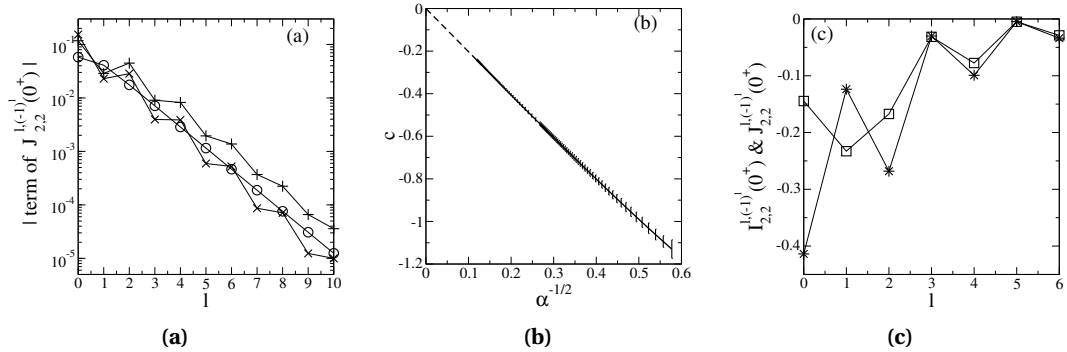


Figure 5 – Some numerical results on the asymptotic approximant $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ of the contribution $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ of angular momentum ℓ and parity ε to the quantity $I_{2,2}(0^+)$ in equation (4). (a) For a mass ratio $\alpha = 5$ and the challenging natural-parity sector $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$, absolute value of the three terms of $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ in expression (71) (symbols ○, +, and × in that order) as a function of angular momentum ℓ . (b) Rate c of exponential decay with ℓ of $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ as in equation (43), as a function of the square root of the inverse mass ratio. The error bars give the deviation between values of c from various fitting functions (for $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$, $\ln|J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)|$ is taken as an affine function of ℓ plus one term $\propto 1/\ell$, or plus one term $\propto \ln \ell$, or plus both). The dashed line is an affine extrapolation to $\alpha^{-1/2} = 0$. (c) For $\alpha = 13.3$ and $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$, exact value $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ obtained numerically (squares) and asymptotic approximant $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ (stars) as functions of ℓ .

²⁰The dominant behaviors in the two parity sectors differ only in their power laws in ℓ . When the mass ratio is too close to 1, $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon=(-1)^{\ell-1})}(0^+)$ tends to zero while oscillating which makes numerical rate extraction more difficult.

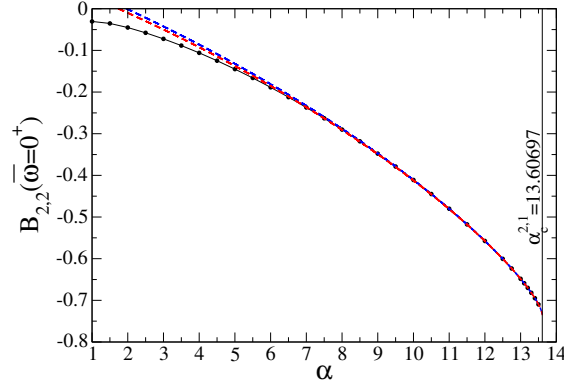


Figure 6 – Fourth cluster coefficient $B_{2,2}(0^+)$ of the unitary Fermi gas in a harmonic trap of infinitesimal stiffness, as a function of the mass ratio $\alpha = m_1/m_l$ restricted to $\alpha \geq 1$ by $\alpha \leftrightarrow 1/\alpha$ symmetry. Disks (connected by a thin line): Our numerical calculation of expression (4) for $(n_1, n_l) = (2, 2)$ and application of conjecture (5), with parameters $x_{\max} = -x_{\min} = 20$ and $n_\theta = 15$ in the series $0 \leq \ell \leq 4$, $x_{\max} = -x_{\min} = 5$ and $n_\theta = 25$ in the series $0 \leq \ell \leq 6$ (the overlap of the two series serves as a check), and in all cases $dx = 1/15$, $S_{\max} = 12$, $dS = 12/100$ (see footnote 19 for the treatment of the singularity of the integral kernel at $(x, \theta) = (0, \pi)$). We use the convergence acceleration method (37) and the same extrapolation to $S_{\max} = +\infty$ as in Section 2. Thin vertical line: three-body Efimovian threshold $\alpha = \alpha_c^{2,1}$. Blue dashed line: cubic fit in the variable $Y = (\alpha_c^{2,1} - \alpha)^{1/2}$ on the interval $10 \leq \alpha \leq 13.5$, i.e. $B_{2,2}(0^+) = -0.73742 + 0.061673Y + 0.074061Y^2 - 0.0084386Y^3$. Red dashed line: same on the interval $12.5 \leq \alpha \leq 13.5$, i.e. $B_{2,2}(0^+) = -0.73761 + 0.062206Y + 0.073901Y^2 - 0.0086514Y^3$.

Table 4 – Numerical values of the fourth cluster coefficient $B_{2,2}(0^+)$ of the unitary Fermi gas in an infinitesimal-stiffness trap, tabulated as functions of the mass ratio $\alpha = m_1/m_l$. Since the coefficient is invariant by change of α to $1/\alpha$, we restricted ourselves to $\alpha \geq 1$. The uncertainties, not specified, are less than one percent. These values are shown graphically in Figure 6.

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

Acknowledgements

This work was supported by Japanese “Grants-in-Aid for Scientific Research” KAKENHI Grant Numbers 21H00116 and 22K03492.

Appendix A. Asymptotic approximant of $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$, its sum over ℓ and ε , its dominant behavior

A.1. The asymptotic approximant

To obtain an approximation $J_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ at large ℓ of the contribution $I_{3,1}^{(\ell,\varepsilon)}(\bar{\omega})$ of angular momentum ℓ and parity ε to the quantity $I_{3,1}(\bar{\omega})$ of equation (4), we use the notations of Section 2 and start from expansion (19). A clever calculation of the trace on $x > 0$ allows us to collect contributions making x and $-x$ appear and to reduce to integrals on the whole real axis, in which we only have to take the traces on the variables u and m_z :

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

where the rotation operator of axis Ox of angle π comes from Footnote 9 and we have introduced the primitive kernel (16) divided on the left by the diagonal part (15) and taken with zero scale exponent, i.e. $\bar{K}_{3,1}^{(\ell)} \equiv \mathcal{D}_{3,1}^{-1} K_{3,1}^{(\ell)}$ ($iS = 0$). The contributions kept to the second side of equation (45) constitute an even, regular, real-valued and rapidly decreasing function of S , that is $-\phi^{(\ell,\varepsilon)}(S)$. So we can integrate by parts over S in equation (4) and we recognize the Fourier component of $-\phi^{(\ell,\varepsilon)}(S)$ at frequency $\bar{\omega}$:

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

which is easy to obtain from (45) by means of the identity in the sense of distributions $\int_{\mathbb{R}} \exp(ikS) dS = 2\pi\delta(k)$. A long but not difficult calculation, treating the contributions to $\phi^{(\ell,\varepsilon)}(S)$ in the order they appear, finally gives:

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

with the notations $X_{\pm} = X \pm \bar{\omega}/2$, $\lambda_{\bar{\omega}} = \exp(\bar{\omega})$, $\lambda_{\pm} = \exp(X_{\pm})$ (these last two modeled on $\lambda = \exp(x)$) completing those of equation (17) and the angular functions²¹

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

The sums over parity ε of the quantities defined in (48) have simple expressions in terms of angles $\xi \in [0, \pi]$, see reference [40],²²

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

$$\mathcal{T}^{(\ell)}(\theta; \phi) = \frac{\sin[(\ell + 1/2)\xi]}{\sin(\xi/2)} \quad \text{with} \quad (50)$$

$$1 + 2\cos\xi = uu'(1 + \cos\phi\cos\phi') - (u + u')\sin\phi\sin\phi' + vv'(\cos\phi + \cos\phi') + \cos\phi\cos\phi'$$

which also shows how to return to fixed parity, for example

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

However, we prefer to reserve equations ((49), (50), (51)) to analytical studies; for numerical computation, we evaluate the traces of (48) in the eigenbasis of L_z (under the constraint $(-1)^{m_z} = \varepsilon$) after insertion of closure relations in the eigenbasis of L_x (obtained by numerical diagonalization of its tridiagonal matrix in the $|\ell, m_z\rangle$ basis) at the location of the ϕ - or ϕ' -angle rotation operators, then we use the value of the integral²³

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

A.2. Its sum on ℓ and ε

The sum of $J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega})$ on the parity ε is straightforwardly done, see equations ((49), (50)). The sum on $\ell \in \mathbb{N}$ gives rise, in the sense of distributions, to the Fourier series of a Dirac comb²⁴ and is calculated thanks to the identity:

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

It thus remains to find the cases of cancellation of the angle ξ , knowing that the polar angles θ, θ' (from now on taken as integration variables in preference to u, u') span $[0, \pi]$ and that the

²¹ One may object that the definition of $\mathcal{T}^{(\ell, \varepsilon)}(\theta, \theta'; \phi, \phi')$ should in principle include an orthogonal projector on the subspace of parity $(-1)^{L_z/\hbar} = \varepsilon$ next to the operator $e^{i\theta' L_z/\hbar}$. The parity in ϕ and ϕ' of the denominator in the third contribution to (47), however, allows us to do without it. For example, only the even part of $e^{i\phi L_x/\hbar}$ contributes after integration over ϕ ; it indeed preserves the parity of L_z/\hbar .

²² Turning to the half-angles, we note that we have more simply $\cos(\xi/2) = \cos(\theta/2)|\cos(\phi/2)|$ in equation (49).

²³ For optimization, we can (i) replace $\exp[i(-m_z\theta + m'_z\theta')]$ by its real part $\cos(m_z\theta)\cos(m'_z\theta') + \sin(m_z\theta)\sin(m'_z\theta')$ and tabulate the corresponding sines and cosines, (ii) reduce to a single index loop $m_x = m'_x$ and use the symmetry $m_x \leftrightarrow -m_x$, (iii) use the symmetry $(m_z, m'_z) \leftrightarrow (-m_z, -m'_z)$ (we restrict ourselves to $(-1)^{m_z} = \varepsilon$, see Footnote 21), (iv) tabulate the powers of degree $|m_x|$ appearing in (52).

²⁴ One simply writes $\sin[(\ell + 1/2)\xi] = \{\cos(\ell\xi) - \cos[(\ell + 1)\xi]\}/[2\sin(\xi/2)]$ to introduce the partially telescopic sum

$$\sum_{\ell \in \mathbb{N}} (\ell + 1/2) \{\cos(\ell\xi) - \cos[(\ell + 1)\xi]\} = (-1/2) + \sum_{\ell \in \mathbb{N}} \cos(\ell\xi).$$

azimuthal angles ϕ, ϕ' can be conveniently taken in $[-\pi, \pi]$. In equation (49), we find as the only nodal point $(\theta, \phi) = (0, 0)$; in the neighborhood of this point, $\xi^2 \simeq \theta^2 + \phi^2$ so that the action of $\delta(\xi)$ is easily evaluated in polar coordinates (ρ, γ) in the plane (θ, ϕ) , for any regular function f :

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

In equation (50), we find three nodal lines²⁵

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

In the integral we are dealing with, which involves a regular function g of the four angles,

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

the lines l_1 and l_2 have a zero contribution because of the Jacobians $\sin\theta$ and $\sin\theta'$. In the vicinity of line l_3 , we quadratize the quantity ξ into the variables ϕ, ϕ' and $\theta' - \theta$; the integral at fixed θ

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

is well computed in the eigenbasis of the quadratic form appearing in the denominator and under the square root (it has eigenvalues 1 and $1 \pm \cos\theta$). It remains simply

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

from which the expression of the desired sum (respecting the order of the contributions in equation (47)):²⁶

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

In practice, the most important case corresponds to $\bar{\omega} = 0^+$, because it gives access to the cluster coefficient $b_{3,1}$ of the homogeneous gas. We give the corresponding explicit expression of (59),

²⁵If $\xi = 0$, $\mathcal{T}^{(1)}(\theta, \theta'; \phi, \phi') = 3$; however, this is the trace of a rotation matrix in \mathbb{R}^3 which must therefore reduce to the identity: we have $\mathcal{R}_z(\theta)\mathcal{R}_x(-\phi)\mathcal{R}_z(-\theta')\mathcal{R}_x(-\phi') = \mathbf{1}$ where $\mathcal{R}_x(\theta)$ is the rotation of angle θ of axis Ox , etc. By taking the zx matrix element of this relation, we get the condition $\sin\theta'\sin\phi = 0$. Similarly, by changing the order of the operators by circular permutation under the trace, we end up with $\sin\theta\sin\phi' = 0$. The nodal lines l_1 and l_2 in (55) correspond to $\sin\theta = \sin\theta' = 0$ that is $\theta = \theta' = 0[\pi]$, the cases $\theta = 0, \theta' = \pi$ and $\theta = \pi, \theta' = 0$ being trivially not suitable. The line l_3 corresponds to $\sin\phi = \sin\phi' = 0$ i.e. $\phi = \phi' = 0[\pi]$, which in practice reduces to $\phi = \phi' = 0$; indeed, the cases $\phi = 0, \phi' = \pi$ and $\phi = \pi, \phi' = 0$ are obviously not suitable, and the case $\phi = \phi' = \pi$ imposes $\cos(\theta + \theta') = 1$ so $\theta = \theta' = 0$ or π , which corresponds to nodal points, of zero contribution to the integral on $\theta, \theta', \phi, \phi'$. The remaining cases $\sin\theta = \sin\phi = 0$ or $\sin\theta' = \sin\phi' = 0$ lead only to nodal points and do not contribute either.

²⁶ Where $\phi + \pi$ appears in the argument of $\mathcal{T}^{(\ell)}$, we perform the change of variable $\phi \rightarrow \phi - \pi$.

always respecting the order of the contributions, in terms of trigonometric functions and the dilogarithm or Bose function $g_2(z) = \sum_{n>0} z^n/n^2$:

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

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

A.3. Its dominant behavior

To obtain an asymptotic equivalent of $J_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega})$ or, what amounts to the same thing, of $I_{3,1}^{(\ell, \varepsilon)}(\bar{\omega})$ for large angular momentum, it suffices to restrict ourselves to the first contribution to the second side of equation (47), which comes from the term of order one in the kernel $\mathcal{K}_{3,1}^{(\ell)}$ in expansion (19). We then write it as an integral over the angle ξ by inserting a Dirac delta $\delta(\xi - \xi(u, \phi))$ linking ξ to u and ϕ as in equation (49), then explicitly calculating the integral over ϕ and then over u .²⁷ To simplify, we restrict ourselves to $\bar{\omega} = 0^+$ and find:

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

with the notation $\beta = 1/\alpha$, the prefactors and the auxiliary functions²⁸

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

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{\sqrt{2}(1+\alpha)^{5/2}}{\pi^2\alpha^2} \quad ; \\
w_1(Z) &= 8(1+\beta)Z^2 - (5\beta+7)Z + \beta(3\beta+1) \quad ;
\end{aligned} \tag{63}$$

$$\begin{aligned}
F_1(Z) &= Z \left(\frac{\pi}{2} - \arctan Z \right) \\
f_1(Z) &= \frac{w_1(Z)}{4\sqrt{1+\beta}\sqrt{1-Z} \left\{ \left[\frac{3\beta+1}{4} + (1+\beta)Z \right] [3\beta + (1-2Z)^2] \right\}^{1/2}}
\end{aligned} \tag{64}$$

²⁷After having reduced to an integral on $\phi \in [0, \pi]$ by periodicity and parity of the integrand, we use the relation $\delta(2\cos \xi + 1 - u(1 + \cos \phi) - \cos \phi) = \delta(\phi - \phi_0)/[(1+u)\sin \phi_0]$ with $\sin \phi_0 = 2(u - \cos \xi)^{1/2}(1 + \cos \xi)^{1/2}/(1+u)$ where the root ϕ_0 is in $[0, \pi]$ if and only if $0 \leq \theta \leq \xi$ given Footnote 22. We also use relation (51).

²⁸When we move to the complex plane, we mean that $\arctan Z = \ln[(1+iZ)/(1-iZ)]/(2i)$. As a result, the branch cut of the function $F_0(Z)$ is $]-\infty, -1]$ and that of $F_1(Z)$ is $i] -\infty, -1] \cup i[1, +\infty[$. Note that, despite appearances, $F_0(Z)$ is analytic in the unit disk, as shown by its series expansion at $Z = 0$. Note also that with this definition of the arctan function, we have $\pi/2 - \arctan(ix) = -i \operatorname{argth}(1/x) \forall x \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1]$, which is already used in the integral (61) on the real axis because the quantity under the last square root in the denominator of (64) can become negative; we have made here the choices $\ln(-1) = i\pi$ and $\sqrt{-1} = i$.

To reduce to contour integrals on the unit circle C , of the form

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

we proceed in three steps: (i) we eliminate the factors $\sin(\xi/2)$ in the integrand of (61), first by simplifying the sine in the denominator in front of the brackets with a sine in the numerator of $\rho_n(\xi)$, then by using the remaining sine to make $\cos[(\ell+1)\xi] - \cos(\ell\xi)$ appear as in Footnote 24; (ii) we extend the integral on ξ to $[-\pi, \pi]$ by parity of the integrand; (iii) we take as new integration variable $z = \exp(i\xi)$, which spans the unit circle, so that $\cos\xi = (z + 1/z)/2$, and we can write $\cos[(\ell+1)\xi] - \cos(\ell\xi) = \operatorname{Re}(z^{\ell+1} - z^\ell)$ and take out the function Re of the integral since the remainder of the integrand is real-valued on C . For the usual determinations of the logarithm and the square root in the complex plane (branch cut on \mathbb{R}^-), we find that the integrand of \mathcal{J}_0 has as singularity in the unit disk a trident-shaped branch cut, union of a segment OO' and an arc AA' , see Figure 7a, and that of \mathcal{J}_1 a flower-shaped branch cut, union of three arcs OB , OB' and BB' , see Figure 7b.²⁹ The point O is here the origin of the coordinates, A and A' are the points of affixes z_0 and z_0^* , B and B' are the points of affixes $z_1 = -z_0^*$ and z_1^* , and z_0 is the unique solution of the equation $z + z^{-1} + 1 + i\sqrt{3\beta} = 0$ in the unit disk (so that $w_0(\frac{z_0+1/z_0}{2}) = 0$):

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

Using Cauchy's integral theorem, we shrink the integration contour until it fits the branch cuts, without changing the value of \mathcal{J}_n . In the limit $\ell \rightarrow +\infty$, because of the factor z^ℓ , the integral is then dominated by the neighborhood of the singularity points farthest from O , namely A and A' for \mathcal{J}_0 , B and B' for \mathcal{J}_1 , this being true for any mass ratio α . \hookrightarrow For the computation of \mathcal{J}_0 in the neighborhood of z_0 , let $z = z_0(1 + \eta u)$, where u is a complex number and $\eta > 0$ is an infinitesimal, and approximate the horn of the trident by its right semitangent at the vertex A ; we then have the equivalents $f_0((z + 1/z)/2) \sim C_0/(\eta u)$ and $z^\ell \sim z_0^\ell \exp(\ell \eta u)$, and the semitangent becomes the half line of origin O of direction $-C_0$ in the u space (considering Footnote 28), that is the half line \mathbb{R}^- in the space of $v = \eta u/C_0$, so that

$$\mathcal{J}_0^{\otimes 0} \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(z_0 - 1) z_0^\ell}{2\sqrt{3\beta}(z_0 - 1/z_0)} \int_{\mathcal{C}_u} \frac{du}{u} e^{\ell \eta u} F_0\left(\frac{C_0}{\eta u}\right) = \frac{z_0^{\ell+1}}{2\sqrt{3\beta}(1 + z_0)} \int_{\mathcal{C}_v} \frac{dv}{v} e^{\ell C_0 v} F_0(1/v) \quad (67)$$

where the paths \mathcal{C}_u and \mathcal{C}_v surround the half-tangents counterclockwise in u or v space. The expression for C_0 is given in equation (21). The integral in the last side of (67) is easily computed:

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

The horn A' of affix z_0^* gives a complex conjugate contribution of the horn A . We get the first part of equation (20). \hookrightarrow For the calculation of \mathcal{J}_1 in the neighborhood of z_1 , we proceed in the same way, by setting $z = z_1(1 + \eta u)$, $\eta \rightarrow 0^+$. Now the local behavior $f_1((z + 1/z)/2) \sim \mathcal{A}/(\mathcal{B}\eta u)^{1/2}$ has itself a branch cut because of the square root and is characterized by two complex amplitudes \mathcal{A}

²⁹In this second case, we expect to have three branch cuts, the one L_1 coming from the function $F_1(Z)$, the ones L_3 and L_2 coming from $\sqrt{1-Z}$ and the other square root in the denominator of the function $f_1(Z)$. In reality, L_3 is included in L_1 . Moreover, the intersections $L_1 \cap L_2$ and $L_1 \cap L_3$ are not branch cuts of the integrand, for the reason that $z \mapsto z^{1/2}(\pi/2 - \arctan z^{1/2})$ has only $[-1, 0]$ as a branch cut (for $z \in]-\infty, -1]$, the change of sign of $\pi/2 - \arctan$ compensates for that of the square root). The arcs OB and OB' are made up of the points lying only on L_2 , and the arc BB' collects the points belonging only to L_1 .

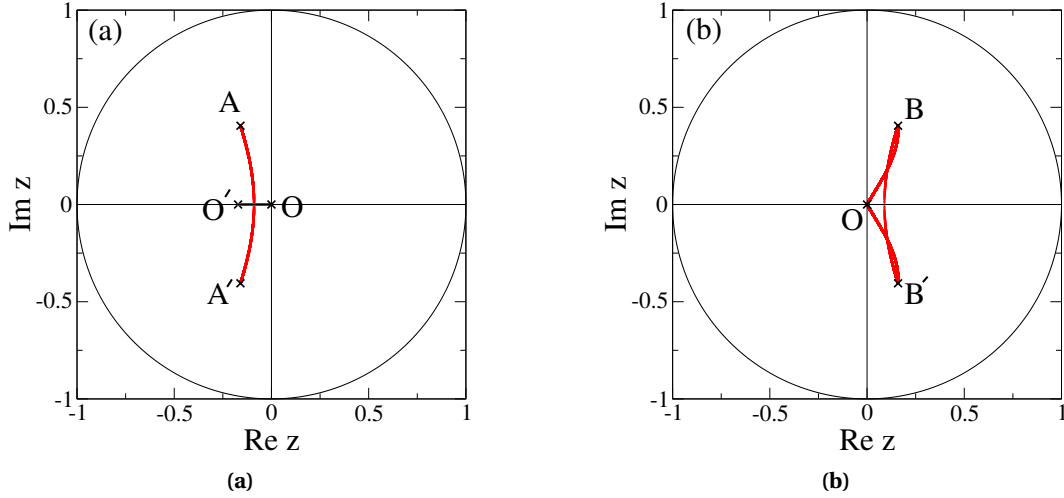


Figure 7 – Branch cuts of the integrand of equation (65) in the unit disk (thick red line) in the case (a) $n = 0$ and (b) $n = 1$, obtained numerically for a mass ratio $\alpha = 1$ taken as example.

and \mathcal{B} , hence the structure with two branch cuts, the one coming from f_1 and the one coming from $\arctan f_1$ in $F_1(f_1)$.³⁰ They are approximated by two semitangents corresponding in the space of $v = \eta \mathcal{B} u / \mathcal{A}^2$ simply to $\mathcal{A}^{-2} \mathbb{R}^-$ and, in light of Footnote 28, to \mathbb{R}^- . One has

$$\mathcal{I}_1^{\oplus} \underset{\ell \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{(z_1 - 1) z_1^\ell \mathcal{A}^2}{i \mathcal{B} w_1 \left(\frac{z_1 + 1/z_1}{2} \right)} \int_{\mathcal{C}_v} dv e^{\ell \mathcal{A}^2 v / \mathcal{B}} \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v \mathcal{A}^2}} \left(\frac{\pi}{2} - \arctan \frac{\mathcal{A}}{\sqrt{v \mathcal{A}^2}} \right) \quad (69)$$

where the path \mathcal{C}_v surrounds (in the third quadrant) the half line $\mathcal{A}^{-2} \mathbb{R}^-$ counterclockwise and then vertically joins the half line \mathbb{R}^- from below to surround it also counterclockwise. The calculation leads to³¹

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

which gives the second part of equation (20), where the coefficient \mathcal{B} is called C_1 and given by equation (21).

Appendix B. Asymptotic approximant of $I_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(0^+)$, its sum over ℓ and ε

³⁰In the previous case $n = 0$, this does not occur: In the function $F_0(z)$, on either side of the branch cut \mathbb{R}^- of the square root, \sqrt{z} can of course take two opposite values but \arctan is an odd function. As a consequence, the branch cut of $F_0(z)$ is imposed by the function \arctan and is $]-\infty, -1]$, in agreement with Footnote 28.

³¹One indeed has $\sqrt{\mathcal{A}^2 / \mathcal{B}} = -\mathcal{A} / \sqrt{\mathcal{B}}$ for any mass ratio α .

B.1. The asymptotic approximant

The aim here is to write as explicitly as possible an approximation $J_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ at large ℓ of the contribution $I_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(0^+)$ of angular momentum ℓ and parity ε to the quantity $I_{2,2}(0^+)$ of equation (4). We take as a starting point expansions ((38),(42)) according to the value of ε . Their insertion into the integrand of (4) leads, after integration on S , to the structure

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

where the subscript indicates that it is a cross contribution of the integral kernels K_i and K_j . The case $(i, j) = (1, 2)$ was treated in reference [40] for $\varepsilon = (-1)^{\ell-1}$, using forms (36) of the kernels; here we simply extend it to the case $\varepsilon = (-1)^\ell$, which is just a rewriting, and we copy the result:

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

with notations (17) and (48). The case $(i, j) = (1, 3)$ is much simpler to handle (especially numerically) by using forms (96) of the kernels, marked by a Czech accent. Only one factor depends on the scaling exponent iS , on which we have to integrate in (4). In the notations of (96) it comes after an integration by parts:

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

We decide to integrate the Dirac distribution on u' at fixed u, x, x' , which links the value of u' to these other variables:

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

As u' must be between -1 and 1 , the integration interval on u is constrained and reduces to $[u_{\min}, u_{\max}]$ with

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

To compute the resummed kernel (41), we recognize in the external part of \check{K}_3 (last contribution of (96)) a form factorized into an operator on x -space and an orthogonal projector of rank one on u -space, which reduces the problem to the inversion of an operator on x -space only: ³²

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

with

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

³²There is no gauge transform of type (39) to be made here because \check{K}_3 is directly independent of the scale exponent. We also notice in equation (95) that $\mathcal{D}_{22} \equiv 1$.

We finally obtain

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

where we have introduced the symmetric function of x and x' taking into account (75) by a Heaviside function Y :

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

The complex numbers z_i and z'_i and their arguments τ_i and τ'_i are defined below equation (94) as functions of the angles θ and θ' in the interval $[0, \pi]$ such that $u = \cos \theta$ and $u' = \cos \theta'$, where the angle θ' is related to θ by equation (74); the writing of the denominator of the integrand in (79) takes into account the equality of the moduli $|z'_1| = |z_1|$.³³ Finally, the last contribution in (71) is deduced from the second contribution by changing everywhere α into its inverse $1/\alpha$:

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

B.2. Its sum on ℓ and ε

It remains to compute the sum on all channels (ℓ, ε) of the asymptotic approximant (71). The contribution of type $K_1 K_2$ is treated exactly as in Appendix A:

³³ In practice, the angular integral in (79) is done numerically on the angle θ (rather than on u) with the 41-point Gauss-Legendre method; if x is close enough to but different from the singularity point $x_{\text{sing}} = \ln \sqrt{\alpha/2}$ where the first denominator $|z_1|$ can vanish, i.e. $0 < |x - x_{\text{sing}}| < \theta_c$ with $\theta_c = 0.15$ for example, a narrow structure in θ appears and the integration on $[\theta_{\min}, \theta_c]$ is performed with the change of variable $\theta = |x - x_{\text{sing}}| \sinh t$, with the midpoint rule on the variable t discretized in 100 equidistant points. On the other hand, the second denominator in (79) always remains greater than $1 + \min(\alpha, \alpha^{-1})$ on the integration domain and cannot vanish. The integration on x and x' is done with the midpoint method on a truncation interval $[x_{\min}, x_{\max}]$, by arranging that x_{sing} is the edge of one of the subintervals of width dx ; we make the fixed choice $x_{\min} = -5$ since $\mathcal{R}(x, x') = O(\min(\exp(x), \exp(x')))$ when $x, x' \rightarrow -\infty$, but we extrapolate to $x_{\max} = +\infty$ cubically in $1/x_{\max}$ from the four values $x_{\max}^{(0)} = 7$, $x_{\max}^{(1)} = 30$, $x_{\max}^{(2)} = 52$ and $x_{\max}^{(3)} = 75$. To take advantage of the fact that $\mathcal{R}(x, x') = O(\exp(-2x))$ on an increasingly narrow support $x - x' = O(\exp(-x))$ when $x \rightarrow +\infty$, we separate the matrix A , discretized version of the operator $\mathbf{1} + \hat{k}$, in blocks A_{ij} between the intervals number one $[x_{\min}, x_{\max}^{(0)}]$ and number two $[x_{\max}^{(0)}, x_{\max}^{(n)}]$, neglecting the blocks 12, 21 and 22 of its inverse A^{-1} and we then compute its block 11 by the expression $(A^{-1})_{11} = [A_{11} - A_{12}(A_{22})^{-1}A_{21}]^{-1}$ which includes the effect of the non-diagonal coupling in the form of a second-order effective Hamiltonian (it would be incorrect to neglect it completely because $\langle x | \hat{k} | x' \rangle$ does not tend to zero when $x, x' \rightarrow +\infty$ at $x - x'$ fixed). As the function $\mathcal{R}(x, x')$ shows near $x = x' = x_{\text{sing}}$ on the left more and more rapid oscillations when ℓ increases, we cannot take a fixed value of the step dx but we have to use an iterative method of Romberg type: From the initial choice $dx = 1/20$, we reduce the step dx by a factor of 2 and extrapolate at zero step linearly in $(dx)^2$ until the extrapolated value is stable at the percent level (or dx falls below the very small value 2×10^{-3}). The matrix element in $|\ell, m_x = 0\rangle$ is computed as above equation (52) with the same symmetry tricks as in Footnote 23 and the integral over ϕ is deduced from equation (52).

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

with $z = \sqrt{\alpha} + i\sqrt{1+\alpha}$, $z' = \sqrt{\alpha^{-1}} + i\sqrt{1+\alpha^{-1}}$ and g_2 the dilogarithm function. In the $K_1 K_3$ type contribution, let us first sum over the angular momentum ℓ of fixed parity $(-1)^\ell = \eta$, so that the operator \hat{k} in (78) takes the fixed value \hat{k}_η . Let us transform the quantum average in state $|\ell, m_x = 0\rangle$ in the numerator of the integrand of (79) by inserting a closure relation in the eigenbasis of L_x and using the expression of the corresponding matrix elements deduced from [53, equations (7.2–9) on page 101, (7.3–15) on page 105 and (7.4–7) on page 109]:

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

where Y_ℓ^m are the usual spherical harmonics. It then leads to^{34 35}

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

It remains to invoke the closure relation (8.6–10) on page 146 of reference [53] on spherical harmonics and the spatial parity property $Y_\ell^m(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi)$ to obtain the closure relation with fixed ℓ parity:³⁶

³⁴The relation (82) is used twice, in its direct form with $(\tau, \psi) = (\tau_1, \phi)$ and in its conjugated form with $(\tau, \psi) = (\tau'_1, 0)$. If τ_1 is in $[-\pi, 0]$, the relation does not apply, but it is then sufficient to change τ_1 into $-\tau_1$, which amounts to changing the integration variable ϕ into $\phi + \pi$ in (79) (indeed, $\exp(-i\tau_1 L_z / \hbar) = \exp(i\pi L_x / \hbar) \exp(i\tau_1 L_z / \hbar) \exp(i\pi L_x / \hbar)$) and does not modify the value of the integral. We proceed in the same way if $\tau'_1 \in [-\pi, 0]$. In the following, we can therefore assume that τ_1 and τ'_1 are in the interval $[0, \pi]$.

³⁵Using the addition theorem for spherical harmonics, see [53, equation (8.6–3) on page 145], we show that the second side of (83) is also written $(2\ell+1)P_\ell(\cos\delta)$ where P_ℓ is a Legendre polynomial and δ is the angle between the unit vectors of polar coordinates (τ_1, ϕ) and $(\tau'_1, 0)$; its cosine $\cos\delta = \cos\tau_1 \cos\tau'_1 + \sin\tau_1 \sin\tau'_1 \cos\phi$ appears in the denominator of the integrand of (79).

³⁶In the Dirac distributions $\delta(\phi - \phi_0)$, ϕ has a meaning modulo 2π ; thus, one can replace the arbitrary integration interval $[0, 2\pi]$ of equation (79) by the interval of length 2π centered on ϕ_0 .

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

where $u_0 \equiv \frac{2\alpha + e^{2x} - e^{2x'}}{2\sqrt{2\alpha}e^x}$

where we have replaced in the third side $\cos \tau_1 \pm \cos \tau'_1$ by its value, remembering that $|z_1| = |z'_1|$ and using (74). The integration on ϕ is straightforward in view of Footnote 36. To integrate over u , we need to know if the root u_0 is in the interval $[u_{\min}, u_{\max}]$. For this purpose, we divide the support of the Heaviside function in (79) into four distinct areas:

$$\exp(x) < \exp(x') < \exp(x) + \sqrt{2\alpha} \quad \text{and} \quad \exp(x) + \exp(x') > \sqrt{2\alpha}, \quad (\text{i})$$

$$\exp(x') < \exp(x) < \exp(x') + \sqrt{2\alpha} \quad \text{and} \quad \exp(x) + \exp(x') > \sqrt{2\alpha}, \quad (\text{ii})$$

$$\exp(x) < \exp(x') < \sqrt{2\alpha} - \exp(x), \quad (\text{iii})$$

$$\exp(x') < \exp(x) < \sqrt{2\alpha} - \exp(x'). \quad (\text{iv})$$

If the expressions depending on x in the definitions (75) are denoted by u_{\min}^{\exp} and u_{\max}^{\exp} , we find that we systematically have $u_{\min} = -1 < u_0 < u_{\max} = u_{\max}^{\exp}$ in zone (i), $u_{\min} = u_{\min}^{\exp} < u_0 < u_{\max} = 1$ in zone (ii), $u_{\min} = -1 < u_{\max} = 1 < u_0$ in zone (iii), $u_{\min} = u_{\min}^{\exp} < u_{\max} = u_{\max}^{\exp} < u_0$ in zone (iv). In other words, the integral of $\delta(u - u_0)$ over u is always equal to one in the first two areas and to zero in the last two. We deduce the sum of the quantity $\mathcal{R}(x, x')$ on all ℓ of fixed parity:

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

It remains to sum on $\eta = \pm 1$ to arrive at the desired result:

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

Again, the operator \hat{k}_{η} is deduced from equation (77) by replacing in the second side $(-1)^{\ell+1}$ by $(-\eta)$; the numerical inversion of the operators $\mathbb{1} + \hat{k}_{\eta}$ and the integration over x and x' are done with the same techniques and tricks as in Footnote 33 (on the other hand, there is no more integration to do on u). Finally, as shown in equation (80), $\sum_{\ell \in \mathbb{N}} \mathcal{J}_{K_2, K_3}^{(\ell)}$ is deduced from expression (86) by changing everywhere α to $1/\alpha$ (also in $S_{\eta}(x, x')$).

Appendix C. The operator $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(\text{iS})$ in the formulation of reference [52]

To obtain the operator $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(\text{iS})$ at the basis of conjecture ((4),(5)) on the cluster coefficient $B_{2,2}(\bar{\omega})$ of the trapped system, we first write a Faddeev ansatz for an eigenstate of the unitary 2+2-body $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ problem of zero energy and zero momentum in free space. This ansatz is expressed in terms of an unknown function D of two wave vectors. Taking into account the Wigner-Bethe-Peierls two-body $\uparrow\downarrow$ contact conditions (as in Footnote 1) leads to an integral equation for this

function. Then, we use the rotational invariance to project the equation on the subspace of angular momentum ℓ and parity ε as reference [54] explains it in detail. Finally, we use the scale invariance of the unitary problem (in the absence of three-body Efimov effect) to choose a function D with a well-defined scale exponent s . The integral equation is then reduced to the condition $\det M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(s) = 0$ where $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(s)$ is a kernel operator, which we have to extend on the pure imaginary axis $s = iS$ to evaluate expression (4).

Expression ((34), (35), (36)) of $M_{2,2}^{(\ell,\varepsilon)}(iS)$ corresponds to the choice of unknown function $D(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4)$ where \mathbf{k}_2 and \mathbf{k}_4 are the wave vectors of two opposite-spin fermions, as in reference [40] (the wave vectors \mathbf{k}_1 and \mathbf{k}_3 disappear in the limit expressing the contact condition). The starting integral equation is given by [40, equation (13)]. Another choice is made in reference [52], corresponding to the change of function

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

It has the advantage of providing a much simpler expression of the singular integral kernel K_3 , i.e. of the third contribution in (36) (but not of the kernels K_1 and K_2 , which justifies in the end keeping (36) in the numerical calculation of (4)). Up to a sign, the new variables are simply the wave vector of the center of mass and the relative motion of particles 2 and 4. In the following, we use the notation $\alpha = m_\uparrow / m_\downarrow$.

Let's follow the previously stated steps. The starting integral equation is written in parameterization (87) [52]

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

with the notations taken from reference [52],³⁷

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

$$\sigma_{23} = \mathbf{v} + \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \mathbf{u} - \mathbf{u}' ; \quad \mathbf{v}_{23} = \mathbf{v} + \frac{\mathbf{u}}{1+\alpha} - \frac{\mathbf{u}'}{1+\alpha}$$

by correcting what seems to us to be a sign error in the coefficient of the vector \mathbf{k} (here called \mathbf{u}') in the definition of \mathbf{v}_{23} (third row and first column of Table III of this reference) and in the expression of E_{coll} (notation not introduced here) just above equation (141) of this reference. As in reference [40], to make future transformations simpler, we adopt a variational formulation of equation (88), $\delta \mathcal{E} / \delta F^*(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0$ with the functional of F and F^* that follows:

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

where the parity $\varepsilon = \pm 1$ of the solution has been introduced to make the sign $-$ disappear in front of \mathbf{u} and \mathbf{v}' in $F(-\mathbf{u}, -\mathbf{v}')$. Let us now consider rotational invariance, restricting ourselves to the subspace of total angular momentum $\ell \in \mathbb{N}$, with a zero angular momentum component along the quantization axis Oz . The solution $F(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ is then expressed in terms of $2\ell + 1$ functions $f_{m_z}^{(\ell)}(u, v, w)$ ($-\ell \leq m_z \leq \ell$) of only three real variables, the moduli u and v of the two vectors and the non-oriented angle $\theta = \widehat{(\mathbf{u}, \mathbf{v})} \in [0, \pi]$ between them or, what amounts to the same thing, its cosine $w = \cos \theta$; to fix the parity at ε is to impose $(-1)^{m_z} = \varepsilon$ thus to decouple the problem into ℓ and $\ell + 1$ unknown functions, which we indicate by an exponent ε on the sum sign below. Our

³⁷Reference [52] arranges the fermions in the order $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$. We renumber the particles accordingly.

ansatz for F is that of [40, equation (14)]. We insert it into functional (90) and integrate over the variables other than the arguments of the functions $f_{m_z}^{(\ell)}$ in the same way as in that reference. For example, let us apply [40, equation (45)] to the last contribution of functional \mathcal{E} , the one with ε in factor, that gives rise to the singular kernel K_3 . First, a direct reference trihedron \mathcal{T} with polar axis \mathbf{u} and another \mathcal{T}' with polar axis \mathbf{u}' are chosen. The integration on \mathbf{v} (or on \mathbf{v}') is performed in the spherical coordinates associated to \mathcal{T} (or to \mathcal{T}'), the cosine of the corresponding polar angle being w (or w'). Integrating over the other variables then amounts to taking the average over the orientations of \mathcal{T} and \mathcal{T}' which can be done by fixing the direction of the vector \mathbf{u} along the convenient direction Ox and replacing the integration over the direction of \mathbf{u}' by an integration over rotation \mathcal{R} mapping \mathcal{T} to \mathcal{T}' in the $SO(3)$ group with an invariant measure, explicit $d\mathcal{R} = da(\sin b)dbdc/8\pi^2$ in the Euler parameterization $\mathcal{R} = \mathcal{R}_Z(a)\mathcal{R}_Y(b)\mathcal{R}_Z(c)$, where angles a and c span an interval of length 2π , angle b spans $[0, \pi]$ and the direct Cartesian reference frame $OXYZ$ is of any orientation with respect to the reference frame $Oxyz$ (see [53, Section 8.2]); it follows that

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

where operator R represents rotation \mathcal{R} in the Hilbert space of a quantum particle. The choice of axes $OZ = Oz$ and $OY = Ox$ leads to $(\sin b)\delta(u\mathbf{e}_x - u'\mathcal{R}\mathbf{e}_x) = (\sin b)\delta(u\mathcal{R}_Z(-a)\mathbf{e}_x - u'\mathcal{R}_X(b)\mathcal{R}_Z(c)\mathbf{e}_x) = \delta(u\cos a - u'\cos c)\delta(-u\sin a - u'\sin c\cos b)\delta(-u'\sin c) = [\delta(u - u')/(uu')][\delta(a)\delta(c) + \delta(a - \pi)\delta(c - \pi)]$ where we successively used the rotational invariance of the three dimensional Dirac distribution and decomposed its action into Dirac distributions along Ox , Oy and Oz . Integration in $SO(3)$ simply reduces to the line $\mathcal{R} = \mathcal{R}_X(b)$ if $a = c = 0$ and to the line $\mathcal{R} = \mathcal{R}_X(-b)$ if $a = c = \pi$, which is taken into account by an integration on b extended to $[-\pi, \pi]$, giving rise to a projector on the state of zero angular momentum along Ox ,

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{db}{2\pi} \langle \ell, m_z | e^{-ibL_x/\hbar} | \ell, m'_z \rangle = \langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle \langle \ell, m_x = 0 | \ell, m'_z \rangle.$$

We get

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

where we have introduced the complex numbers $Z_1 \equiv \alpha u/(1+\alpha) - v \exp(i\theta) = |Z_1| \exp(iT_1)$, $Z_2 \equiv u/(1+\alpha) + v \exp(i\theta) = |Z_2| \exp(iT_2)$ and their counterparts for the primed variables $Z'_1 \equiv$

$\alpha u'/(1+\alpha) - v' \exp(i\theta') = |Z'_1| \exp(iT'_1)$, $Z'_2 = u'/(1+\alpha) + v' \exp(i\theta') = |Z'_2| \exp(iT'_2)$. Finally, let us take advantage of scale invariance by means of the ansatz

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

chosen cleverly so that the diagonal part of the functional (first contribution in (92)) becomes scalar (independent of any variable) and so that the singular part (last contribution) does not depend on the mass ratio or even on the scaling exponent s . The integration on u brings out as in reference [40] an infinite constant factor, here $(\zeta^4/16) \int_0^{+\infty} du/u$, to give the regularized functional

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

where we have set $\beta = 1/\alpha$, $z_1 \equiv (\alpha/2)^{1/2} - \exp(x+i\theta) = |z_1| \exp(i\tau_1)$, $z_2 \equiv (\beta/2)^{1/2} + \exp(x+i\theta) = |z_2| \exp(i\tau_2)$ and the equivalent relations for the primed variables, $z'_1 \equiv (\alpha/2)^{1/2} - \exp(x'+i\theta') = |z'_1| \exp(i\tau'_1)$, $z'_2 \equiv (\beta/2)^{1/2} + \exp(x'+i\theta') = |z'_2| \exp(i\tau'_2)$ and where we recall that $\theta = \arccos w$ and $\theta' = \arccos w'$. A simple functional derivation of (94) with respect to $\Phi_{m_z}^{(\ell)*}(x, w)$, taking a pure imaginary scale exponent and returning to the notation $u = \cos \theta$ of the main article gives the new form of the operator $M_{2,2}^{(\ell, \varepsilon)}(iS)$, marked with a Czech accent to avoid confusion with ((34), (35), (36)):

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

with an integral kernel separated into three contributions $\check{K} = \check{K}_1 + \check{K}_2 + \check{K}_3$ written line by line:

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

where we remembered that $\langle \ell, m_z | \ell, m_x = 0 \rangle = 0$ if $\varepsilon \neq (-1)^\ell$. To verify that equation (96) is written in the same order as equation (36), i.e. that the kernel \check{K}_i is precisely the kernel K_i written in the formulation of reference [52], we show numerically that

$$\int_{\mathbb{R}} dS \operatorname{Tr} [\mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_1(iS) \mathcal{D}_{2,2}^{-1} K_3(iS)] = \int_{\mathbb{R}} dS \operatorname{Tr} [\check{K}_1(iS) \check{K}_3].$$

Références

- [1] Y. Castin, F. Werner, « The Unitary Gas and its Symmetry Properties », in *BCS-BEC Crossover and the Unitary Fermi gas* (W. Zwerger, éd.), Lecture Notes in Physics, vol. 836, Springer, 2011, p. 127-191.
- [2] M. Randeria, E. Taylor, « Crossover from Bardeen–Cooper–Schrieffer to Bose–Einstein Condensation and the Unitary Fermi Gas », *Ann. Rev. Cond. Matter Phys.* **5** (2014), n° 1, article no. 209.
- [3] M. W. Zwierlein, J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck, W. Ketterle, « Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas », *Nature* **435** (2005), p. 1047-1051.
- [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** (2013), p. 78-81.
- [5] S. Nascimbène, N. Navon, K. J. Jiang, F. Chevy, C. Salomon, « Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas », *Nature* **463** (2010), p. 1057-1060.
- [6] M. Horikoshi, S. Nakajima, M. Ueda, T. Mukaiyama, « Measurement of universal thermodynamic functions for a unitary Fermi gas », *Science* **327** (2010), n° 5964, p. 442-445.
- [7] M. J. 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** (2012), n° 6068, p. 563-567.
- [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** (2012), p. 615-618.
- [9] C. Ravensbergen, E. Soave, V. Corre, M. Kreyer, B. Huang, E. Kirilov, R. Grimm, « Resonantly Interacting Fermi-Fermi Mixture of ^{161}Dy and ^{40}K », *Phys. Rev. Lett.* **124** (2020), n° 20, article no. 203402.
- [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** (2020), n° 6, article no. 063602.
- [11] K. Van Houcke, F. Werner, E. Kozik, N. Prokof'ev, B. Svistunov, M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, A. Schirotzek, M. W. Zwierlein, « Feynman diagrams versus Fermi-gas Feynman emulator », *Nat. Phys.* **8** (2012), p. 366-370.
- [12] R. Rossi, « Contributions to unbiased diagrammatic methods for interacting fermions », Thèse, Université Paris sciences et lettres, Paris, France, 2017, thèse en ligne tel-01704724v2, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01704724v2>.
- [13] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2nd éd., John Wiley & Sons, New York, 1987.
- [14] X.-J. Liu, « Virial expansion for a strongly correlated Fermi system and its application to ultracold atomic Fermi gases », *Phys. Rep.* **524** (2013), n° 2, p. 37-83.
- [15] X.-J. Liu, H. Hu, « Virial expansion for a strongly correlated Fermi gas with imbalanced spin populations », *Phys. Rev. A* **82** (2010), n° 4, article no. 043626.
- [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** (2018), n° 13, article no. 130405.
- [17] E. Beth, G. E. Uhlenbeck, « The quantum theory of the non-ideal gas I. Deviations from the classical theory », *Physica* **3** (1936), n° 8, p. 729-745.
- [18] E. Beth, G. E. Uhlenbeck, « The quantum theory of the non-ideal gas. II. Behaviour at low temperatures », *Physica* **4** (1937), n° 10, p. 915-924.
- [19] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique statistique - 1ère partie*, troisième éd., Éditions Mir, Moscou, 1984.
- [20] Y. Castin, F. Werner, « Le troisième coefficient du viriel du gaz de Bose unitaire », *Canadian Journal of Physics* **91** (2013), n° 5, p. 382-389.
- [21] C. Gao, S. Endo, Y. Castin, « The third virial coefficient of a two-component unitary Fermi gas across an Efimov-effect threshold », *Eur. Phys. Lett. A* **109** (2015), n° 1, article no. 16003.
- [22] P. C. Hemmer, « The hard core quantum gas at high temperatures », *Phys. Lett., A* **27** (1968), n° 6, p. 377-378.
- [23] B. Jancovici, « Quantum-Mechanical Equation of State of a Hard-Sphere Gas at High Temperature », *Phys. Rev.* **178** (1969), n° 1, p. 295-297.
- [24] B. Jancovici, « Quantum-Mechanical Equation of State of a Hard-Sphere Gas at High Temperature. II », *Phys. Rev.* **184** (1969), n° 1, p. 119-123.

- [25] B. Jancovici, S. P. Merkuriev, « Quantum-mechanical third virial coefficient of a hard-sphere gas at high temperature », *Phys. Rev. A* **12** (1975), n° 6, p. 2610-2621.
- [26] T. D. Lee, C. N. Yang, « Many-Body Problem in Quantum Statistical Mechanics. II. Virial Expansion for Hard-Sphere Gas », *Phys. Rev.* **116** (1959), n° 1, p. 25-31.
- [27] A. Pais, G. E. Uhlenbeck, « On the Quantum Theory of the Third Virial Coefficient », *Phys. Rev.* **116** (1959), n° 2, p. 250-269.
- [28] S. K. Adhikari, R. D. Amado, « Low-Temperature Behavior of the Quantum Cluster Coefficients », *Phys. Rev. Lett.* **27** (1971), n° 8, p. 485-487.
- [29] W. G. Gibson, « Low-Temperature Expansion of the Third-Cluster Coefficient of a Quantum Gas », *Phys. Rev. A* **6** (1972), n° 6, p. 2469-2477.
- [30] A. Comtet, Y. Georgelin, S. Ouvry, « Statistical aspects of the anyon model », *J. Phys. A, Math. Gen.* **22** (1989), n° 18, p. 3917-3925.
- [31] J. McCabe, S. Ouvry, « Perturbative three-body spectrum and the third virial coefficient in the anyon model », *Phys. Lett. B* **260** (1991), p. 113-119.
- [32] X.-J. Liu, H. Hu, P. D. Drummond, « Virial Expansion for a Strongly Correlated Fermi Gas », *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009), n° 16, article no. 160401.
- [33] X.-J. Liu, H. Hu, P. D. Drummond, « Three attractively interacting fermions in a harmonic trap : Exact solution, ferromagnetism, and high-temperature thermodynamics », *Phys. Rev. A* **82** (2010), n° 2, article no. 023619.
- [34] F. Werner, Y. Castin, « Unitary gas in an isotropic harmonic trap : Symmetry properties and applications », *Phys. Rev. A* **74** (2006), n° 5, article no. 053604.
- [35] V. Efimov, « Energy levels of three resonantly interacting particles », *Nucl. Phys. A* **210** (1973), n° 1, p. 157-188.
- [36] F. Werner, Y. Castin, « Unitary Quantum Three-Body Problem in a Harmonic Trap », *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006), n° 15, article no. 150401.
- [37] S. T. Rittenhouse, N. P. Mehta, C. H. Greene, « Green's functions and the adiabatic hyperspherical method », *Phys. Rev. A* **82** (2010), n° 2, article no. 022706.
- [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** (2011), n° 6, article no. 062704.
- [39] Y. Castin, C. Mora, L. Pricoupenko, « Four-Body Efimov Effect for Three Fermions and a Lighter Particle », *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010), n° 22, article no. 223201.
- [40] S. Endo, Y. Castin, « Absence of a four-body Efimov effect in the $2+2$ fermionic problem », *Phys. Rev. A* **92** (2015), n° 5, article no. 053624.
- [41] S. 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, Math. Gen.* **49** (2016), n° 26, article no. 265301.
- [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** (2016), n° 23, article no. 230401.
- [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** (2021), n° 3, article no. 033099.
- [44] A. J. Czejdo, J. E. Drut, Y. Hou, K. J. Morrell, « Toward an automated-algebra framework for high orders in the virial expansion of quantum matter », *Condens. Matter* **7** (2022), n° 1, article no. 13.
- [45] Y. Hou, J. E. Drut, « Fourth- and Fifth-Order Virial Coefficients from Weak Coupling to Unitarity », *Phys. Rev. Lett.* **125** (2020), n° 5, article no. 050403.
- [46] D. S. Petrov, « Three-body problem in Fermi gases with short-range interparticle interaction », *Phys. Rev. A* **67** (2003), n° 1, article no. 010703.
- [47] S. 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, <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01246611>, 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** (2013), n° 20, article no. 200406.
- [49] B. Mukherjee, Z. Yan, P. B. Patel, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, J. Struck, M. W. Zwierlein, « Homogeneous Atomic Fermi Gases », *Phys. Rev. Lett.* **118** (2017), n° 2, article no. 123401.
- [50] T.-L. Ho, Q. Zhou, « Obtaining the phase diagram and thermodynamic quantities of bulk systems from the densities of trapped gases », *Nat. Phys.* **6** (2010), n° 2, p. 131-134.
- [51] R. Dum, M. Olshanii, « Gauge Structures in Atom-Laser Interaction : Bloch Oscillations in a Dark Lattice », *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), n° 11, p. 1788-1797.
- [52] L. Pricoupenko, « Isotropic contact forces in arbitrary representation : Heterogeneous few-body problems and low dimensions », *Phys. Rev. A* **83** (2011), n° 6, article no. 062711.
- [53] W.-K. Tung, *Group Theory in Physics*, World Scientific, Philadelphie, 1985.
- [54] C. Mora, Y. Castin, L. Pricoupenko, « Integral equations for the four-body problem », *C. R. Physique* **12** (2011), n° 1, p. 71-85.