HAL
open science

Effet tunnel dans les systèmes complexes

Jérémy Le Deunff

To cite this version:

Jérémy Le Deunff. Effet tunnel dans les systèmes complexes. Physique mathématique [math-ph]. Université François Rabelais - Tours, 2011. Français. NNT : . tel-00599680

HAL Id: tel-00599680

https://theses.hal.science/tel-00599680v1

Submitted on 10 Jun 2011

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

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

UNIVERSITÉ FRANÇOIS RABELAIS DE TOURS

École Doctorale Santé, Sciences, Technologies

LABORATOIRE DE MATHÉMATIQUES ET PHYSIQUE THÉORIQUE

THÈSE présenté par :

Jérémy LE DEUNFF

soutenue le : 18 mai 2011

pour obtenir le grade de : Docteur de l'Université François - Rabelais de Tours

Discipline/ Spécialité : Physique

EFFET TUNNEL DANS LES SYSTÈMES COMPLEXES

THÈSE DIRIGÉE PAR :

MOUCHET Amaury	Maître de Conférences - HDR, Université François - Rabelais de Tours, France

RAPPORTEURS :

SCHLAGHECK Peter	Professeur, Université de Liège, Belgique
SHUDO Akira	Professeur, Tokyo Metropolitan University, Japon

JURY :

BRODIER Olivier	Maître de Conférences, LMPT Tours, France
GIACOMINI Hector	Professeur, LMPT Tours, France
MOUCHET Amaury	Maître de Conférences - HDR, LMPT Tours, France
SCHLAGHECK Peter	Professeur, Université de Liège, Belgique
SHUDO Akira	Professeur, Tokyo Metropolitan University, Japon
ULLMO Denis	Directeur de Recherche CNRS, LPTMS - Université Paris Sud, France

Remerciements

Difficile de dresser une liste exhaustive de tous ceux qui ont compté et contribué, ces dernières années, à l'accomplissement de ce projet... En particulier, il est toujours une tâche délicate de n'oublier personne et c'est pour cela que je commencerai par une pirouette maladroite en remerciant et présentant mes excuses à ceux qui, juste le temps de ces quelques lignes, auront bien malgré moi échappé à ma mémoire.

Ma première pensée va naturellement à mon directeur de thèse Amaury Mouchet qui, le premier, m'a initié au monde fascinant de la recherche. On dit souvent que le choix du directeur de thèse est au moins aussi important que le choix du sujet lui-même. Je me félicite aujourd'hui d'avoir fait deux très bons choix que je ne regretterai certainement pas. J'ai beaucoup apprécié ses indéniables qualités de scientifique et de pédagogue qui m'ont guidé et inspiré tout au long de ces années. Bien plus pour moi qu'un directeur de thèse, je le remercie pour son amitié, sa disponibilité totale, sa gentillesse et son soutien. Pour ces raisons, et d'autres encore, quelque soient les surprises que réservent l'avenir, il aura laissé son empreinte dans la façon que j'aurai d'arpenter mon chemin, et je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie Denis Ullmo d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Je remercie Hector Giacomini d'avoir aussi accepté d'endosser ce rôle mais également pour sa passion pour la physique qu'il n'hésite pas à faire partager, en particulier durant ses cours dont je garderai un excellent souvenir. Merci à Akira Shudo d'avoir immédiatement accepté d'être rapporteur de ce manuscrit mais aussi pour son amitié et ses encouragements répétés, qui m'ont beaucoup touché, lors de chacune de nos rencontres. Peter Schlagheck a également accepté la lourde tâche d'écrire l'autre rapport de ma thèse. Je lui suis particulièrement reconnaissant de sa lecture détaillée du manuscrit et de ses nombreuses remarques pertinentes. Je le remercie de cette rigueur mais aussi de sa disponibilité et de m'avoir permis de visiter le laboratoire de Regensburg où nous avons commencé notre collaboration qui je l'espère se poursuivra dans l'avenir. Enfin, Olivier Brodier, dont les remarques sur ce manuscrit ont été également très profitables, a fait plus que d'accepter d'être membre de mon jury. Je l'ai côtoyé au laboratoire depuis le début de ma thèse et il a toujours gardé sa porte ouverte lorsque j'avais des questions. J'ai beaucoup apprécié son amitié et nos discussions sur la physique ainsi que sur un peu tout, et rien aussi !

J'ai eu la chance d'effectuer tout au long de ma thèse des visites à l'étranger dans des laboratoires de recherches internationaux. Je souhaiterai remercier Klaus Richter de m'avoir aimablement ouvert les portes de son laboratoire à Regensburg ainsi que Roland Ketzmerick et son équipe pour leur accueil toujours chaleureux lors de mes déplacements

à Dresden.

Bien sûr, je suis très reconnaissant envers tous les membres du Laboratoire de Mathématiques et de Physique Théorique de Tours et ceux du département de physique en général qui ont su m'accueillir et m'intégrer rapidement au sein de l'établissement. En particulier, je peux citer Emmanuel Lesigne et Hector Giacomini, directeurs du laboratoire et les remercier de leur accueil et leur disponibilité. De la même manière, je remercie Jean-Claude Soret et Gisèle Gruener, responsables du département, qui m'ont rapidement intégré au sein des équipes pédagogiques me permettant de garder globalement un excellent souvenir de mon monitorat. Un merci particulier à Nathalie Doris et Anne-Marie Chenais qui ont eu la gentillesse de me guider dans certaines démarches administratives ainsi qu'à Olivier Thibault qui a toujours été disponible pour résoudre le plus rapidement possible mes problèmes informatiques qui surviennent toujours aux plus mauvais moments. Je ne peux évidemment pas évoquer ma vie au laboratoire sans remercier ceux avec qui j'ai partagé mon bureau et de bons moments, Jean-Paul Ngome, Julien Garaud, Shuangwei Hu, Francesco Sardelli, Tanaya Bhattacharya, Keiichi Shigechi, mais aussi les physiciens des bureaux voisins Mauricio Valenzuela, Élisa Meunier & Kévin Morand.

Au-delà des murs du laboratoire, nombreux sont ceux qui ont aussi compté à mes yeux. Parmi eux, je pense aux moniteurs de ma promotion avec qui j'étais « dans le même bateau ». Malgré nos disciplines et champs d'intérêt différents, nous nous sommes tous réunis le temps d'un tournage afin de concurrencer, dans une ambiance de gosses survoltés digne des meilleures colonies de vacances, les plus grands films d'action du cinéma hollywoodien. Dans un registre plus zen, je me souviendrai des entrainements, rapidement devenus des rendez-vous incontournables, avec la Bio-team dans une ambiance *détendue* des plus agréables. Enfin, j'ai une pensée particulière pour toutes les « promo' de la prépa' CAPES » que j'ai eu beaucoup plaisir à accompagner (en modeste spectateur) et avec qui j'ai aussi vécu la pression, les joies et les peines des concours.

Il arrive maintenant le moment de remercier mes proches qui, paradoxalement, sont géographiquement les plus éloignés. Je pense à mes compagnons de route, rencontrés sur les bancs de la fac (et parfois un peu avant) et que je n'ai plus quittés. Ces amis avec qui j'aimerai que le temps devienne purement imaginaire, non pas pour geler la dynamique du « réel » mais pour transcender ces instants partagés avec eux, et bien au-delà des frontières naturelles imposées par une nature parfois trop capricieuse à mon goût. Certains m'offrent quelques lignes sur un papier dans un cadre en bois qui signifient bien plus qu'une vulgaire récompense, d'autres corrigent les "a" de mes équations ou me proposent la mer et le soleil, mais tous m'enivrent de leur amitié et me font la promesse, le temps d'un week-end ou d'un séjour en altitude, de moments exquis.

Et enfin, "*last but not least*", bien au contraire, j'ai une pensée émue pour ma famille proche, et en particulier mes parents, Cathy et Martial, qui me portent, me soutiennent de manière inconditionnelle depuis toutes ces années et pour qui il n'y a jamais eu de doute. Même si, bien entendu, ces quelques mots ne sont pas suffisants pour leur dire mon amour et combien ils comptent pour moi, je les remercie du fond du coeur. Merci à Tony, parce qu'il est mon frère.

À vous tous, Merci.

Résumé

Les travaux présentés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre général de la description de l'effet tunnel dans la limite semiclassique $\hbar \to 0$. Nous présentons une nouvelle méthode de calcul direct de la largeur des doublets tunnel. L'expression obtenue est basée sur l'utilisation de traces d'opérateurs quantiques, dont l'opérateur d'évolution $\hat{U}(T)$ prolongé analytiquement à l'aide d'un temps complexe T. L'étape suivante consiste en un développement semiclassique de ces traces. Nous nous plaçons dans le cadre des systèmes intégrables unidimensionnels afin d'insister sur l'importance d'un temps complexe et on montre que le choix d'un chemin du temps $[t]$ adapté, lors du calcul semiclassique des traces, fournit un critère de sélection efficace des trajectoires complexes dominantes. Nous verrons que cette approche retrouve la technique des instantons dans la limite d'un temps purement imaginaire et qu'elle permet d'inclure les descriptions, inaccessibles par une rotation de Wick complète, de l'effet tunnel dynamique et résonant. Nous montrons également comment adapter cette méthode au taux de transmission tunnel d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'états. Enfin, nous proposerons, en guise de perspectives, d'étudier l'effet tunnel résonant à partir de modèles intégrables présentant des îlots stables entourés de chaînes de tores pour lesquels nous tenterons d'adapter la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances.

Mots clés : Effet tunnel - effet tunnel dynamique - effet tunnel résonant - instantons - rotation de Wick - méthodes semiclassiques - temps complexe - trajectoires complexes.

Abstract

The present work is developed within the general framework of the description of the tunneling effect in the semiclassical limit $\hbar \to 0$. We introduce a new method for the direct computation of the tunneling splittings. We get a trace formula involving the evolution operator continued in the complex plane using a complex time T. The next step is to obtain semiclassical expansion of these traces. Within the framework of one dimensionnal integrable systems, we show the key role of a complex time. When performing semiclassical calculations, an appropriate complex-time paths provide an efficient criterion in order to select the dominant complex trajectories involved in the traces. We will show that our approach includes instanton techniques in the limit of a purely imaginary time and describes dynamical tunneling and resonant tunneling for which a complete Wick is not sufficient. We will show also how our method works for the decay rates. Finally, as a perspective, we will study resonant tunneling from integrable models which exhibit prominent islands surrounded by chains of tori. From these models, we will try to apply the theory of resonant assisted tunneling to integrable systems.

Keywords : Tunneling - dynamical tunneling, resonant tunneling - instantons - Wick rotation - semiclassical methods - complex time - complex trajectories.

Table des matières

Introduction **13**

I L'état des lieux **19**

1 Les méthodes standard **23**
1.1 L'approximation semiclassique JWKB 23
1.2 Formules de connexion 26
1.3 Quantification de Bohr-Sommerfeld 27
1.4 Le double puits 29
1.5 Formule d'Herring 31

2 Espace des phases et complexification **37**
2.1 L'espace des phases 37
2.2 Formes normales 40
2.3 Temps complexe et équations d'Hamilton 44
2.4 Propagateurs quantiques et intégrales de chemin 46

3 Résonances quantiques **53**
3.1 Un exemple simple : le triple puits 53
3.2 Approche spectrale 54
3.3 Matrices de transfert et expression semiclassique 59

II Une approche nouvelle **65**

4 Vers les instantons, et au-delà... **69**
4.1 Les instantons... 69
4.2 ... Et au-delà : Vers une formule de traces 71

5 Quelques exemples **77**

5.1 Le double puits 77
5.1.1 Formule pour le doublet fondamental $\Delta_0(T)$ 77
5.1.2 Formule pour un doublet arbitraire $\Delta_n(T)$ 90
5.2 Effet tunnel dynamique : le pendule 92
5.3 Taux de décroissance 101
5.4 Interprétation semiclassique d'une résonance : le triple puits 105

III Une voie vers les chaînes de résonances ? 113

6 Enrichir l'espace des phases 117
6.1 Une forme normale, un modèle 118
6.2 Effet tunnel assisté par les résonances 120
6.2.1 Systèmes quasi-intégrables 120
6.2.2 Systèmes intégrables 124

Conclusion 137

Annexes 143

A Contributions à l'expression semiclassique de $\operatorname{tr} \hat{A}\hat{U}(T)$ des trajectoires de longueur nulle et non nulle 143
A.1 Trajectoires de longueur nulle 144
A.2 Trajectoires de longueur non nulle 146

B Calcul de $\operatorname{tr} \hat{A}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ 149

C Développement asymptotique des actions $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$ et $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$ lorsque $E \to 0^+$ 153
C.1 Calcul de $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$ 153
C.2 Calcul de $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$ 155

D Article 157

Introduction

« *Les rêves, ça se compare pas.* »

Le Roi Arthur, **Kaamelott, Livre VI - Dies Irae**

L'effet tunnel est un phénomène qui intervient en physique quantique et est généralement décrit comme la capacité d'une particule quantique à traverser une barrière d'énergie même si son énergie est inférieure à cette barrière. Un exemple illustratif consiste à considérer un potentiel formé de deux puits symétriques séparés classiquement par une barrière d'énergie de hauteur finie et à préparer une particule quantique dans un des puits avec une énergie inférieure à la hauteur de cette barrière. Classiquement, cette particule est condamnée à osciller à l'intérieur de ce puits. En revanche, du point de vue de la mécanique quantique, la particule est associée à une fonction d'onde, dont le module au carré est relié à la probabilité de présence de cette particule, qui est alors initialement localisée dans le puits choisi. Ce paquet d'onde va progressivement se déplacer d'un puits à l'autre et ainsi effectuer des oscillations de part et d'autre de la barrière à une période τ. On peut alors dire que la particule quantique oscille d'un puits à l'autre par effet tunnel et on parle d'oscillations de Rabi [20].

Après la naissance de la théorie quantique et en particulier l'équation d'onde proposée par Schrödinger [84] en 1926, l'effet tunnel est très rapidement mis en avant pour expliquer les phénomènes de désintégration radioactive des éléments instables et leur loi de décroissance exponentielle, découverts seulement une trentaine d'années auparavant [30] [83]. Parmi la série d'articles publiés dans ce contexte, Hund s'intéresse à un potentiel borné $V(q)$ à une dimension sous la forme d'un double puits symétrique et est le premier à mettre en avant la sensibilité exponentielle de l'écart ΔE entre des énergies propres quasi-dégénérées (appelées doublets) dans le spectre en fonction de la hauteur de la barrière d'énergie [46] [47]. Au même moment, l'équation de Schrödinger suscite un interêt du point de vue mathématique et entraîne le développement de méthodes de résolution approchée de l'équation d'onde. Wentzel, Kramers, Brillouin et indépendamment Jeffreys posent les fondations de ce que l'on connaît aujourd'hui sous le nom d'*approximation semiclassique* ou *théorie JWKB* [99] [60] [15] [50]. Cette théorie fournit une solution à l'équation d'onde dans la limite où le paramètre $\hbar$, qui gouverne le monde quantique, tend formellement vers la valeur nulle. Dans cette limite $\hbar \to 0$, les remarques

de HUND se vérifient simplement et on montre que la largeur des doublets varie comme

$$\Delta E \overset{\hbar \to 0}{\sim} A\hbar \mathrm{e}^{-|S|/\hbar}, \tag{1}$$

où A dépend d'ingrédients classiques du système. La fonction $S = \int \mathrm{d}q\sqrt{2m(V(q)-E)}$ est l'action classique prolongée analytiquement sous la barrière de potentiel ($E < V(q)$) et dépend donc de la forme de la barrière qui sépare les deux puits [61]. Il apparaît que la période d'oscillation d'un paquet d'onde d'énergie E est reliée à la largeur de ce doublet comme $\Delta E \overset{\text{def}}{=} \hbar/\tau$. Elle sera d'autant plus grande que l'énergie sera proche de celle des fonds de puits et l'effet tunnel s'en verra donc diminué.

On peut énumérer quelques exemples notoires de la réussite d'une telle description. La théorie JWKB permet à FOWLER et NORDHEIM en 1928 de formaliser le phénomène d'émission d'électrons dans un métal froid soumis à un champ électrique intense [33] et la même année le succès de l'effet tunnel s'étend jusqu'au domaine de la physique nucléaire avec l'interprétation par GAMOW [35] et indépendamment GURNEY et CONDON [40], de la désintégration α. Quelques décennies plus tard, ESAKI met en place le premier modèle de diode à effet tunnel [32] et utilise le principe de l'effet tunnel résonant [14]. En 1962, JOSEPHSON prédit l'existence d'un courant tunnel entre deux supraconducteurs séparés par une barrière isolante très fine [51]. Enfin, en 1982, BINNING et ROHRER présente le mécanisme de fonctionnement du microscope à effet tunnel [10]. L'effet tunnel, ces dernières années, s'étend aux expériences sur les atomes froids et les condensats de BOSE-EINSTEIN [42] [91] dans l'idée de comprendre l'influence des nonlinéarités et des effets collectifs sur les phénomènes de transport.

La description semiclassique de l'effet tunnel requiert naturellement le prolongement analytique des solutions classiques du système [6]. Dans le cas des systèmes intégrables, on peut montrer que le comportement exponentiellement décroissant de l'écart des énergies propres quasi-dégénérées peut être obtenu en reliant des tores réels appartenant à des régions distinctes de l'espace des phases à l'aide d'un prolongement analytique de ces tores dans le plan complexe [24]. L'importance de ces trajectoires complexes a d'abord été mise en avant par GEORGE et MILLER [72] [37] afin de décrire certains processus chimiques comme les collisions moléculaires et les transitions électroniques. Ils abordent le problème de la transmission tunnel à travers une barrière d'énergie dans le cas intégrable en traitant semiclassiquement les propagateurs quantiques en énergie (fonction de GREEN) $\tilde{G}(q_f, q_i, E)$ et en extrayant les trajectoires complexes à l'aide d'un temps complexe [34] [18] [49]. Ce temps complexe peut être vu comme un point critique de la phase stationnaire lorsque l'on considère la fonction de GREEN comme la transformée de FOURIER du propagateur en temps $G(q_f, q_i, T)$. Pourtant bien adaptée pour les processus de diffusion, le calcul de la largeur des doublets ΔE_n dans les systèmes bornés par la fonction de GREEN n'est cependant pas direct et nécessite l'extraction des pôles de sa trace [27] [98]

$$\operatorname{tr} \tilde{G}(q, q, E) = \sum_n \frac{1}{E - E_n}. \tag{2}$$

En 1977, dans le cadre de la théorie des champs, COLEMAN donne finalement une méthode directe pour calculer la largeur des doublets [21], basée sur le propagateur en temps et fait le choix d'une transformation $t \mapsto -\mathrm{i}t$, appelée rotation de WICK, afin de calculer

l'intégrale de chemin du propagateur à l'aide de trajectoires réelles, appelées « instantons ». Il calcule ainsi le doublet pour le double puits et également le taux de décroissance d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'état. Cependant, le choix d'un temps purement imaginaire ne lui permet d'accéder qu'à l'état fondamental contrairement à d'autres approches directes utilisant la formule d'Herring [100] [25] [36] qui sont basées sur le prolongement des fonctions d'onde elles-mêmes.

Si l'effet tunnel $1D$ indépendant du temps est bien compris, les choses se compliquent lorsque l'on brise l'intégrabilité en augmentant le nombre de dimensions de l'espace des phases ou en rendant non autonome le hamiltonien. L'espace des phases est alors divisé génériquement en îlots réguliers composés de tores KAM séparés par une mer chaotique (systèmes mixtes). La définition de l'effet tunnel peut être alors généralisée, au-delà d'une barrière de potentiel, à deux régions classiquement distinctes de l'espace des phases, en général symétrique, et est qualifié d'effet tunnel dynamique par Davis et Heller [28]. L'effet tunnel entre deux îlots réguliers symétriques, caractérisées maintenant par des doublets de quasi-énergies dont les états sont localisés dans les tores réguliers, ne peut plus être décrit par un simple comportement exponentiel mais est clairement influencée par la structure plus riche de la dynamique classique. Bohigas, Tomsovic et Ullmo ont observé, en variant un paramètre du système (classique ou quantique), de larges fluctuations de la largeur des doublets [13] [96] d'autant plus isolées que le régime est quasi-intégrable, et ont proposé le processus d'effet tunnel assisté par le chaos. Les fluctuations sont causées par la proximité d'un niveau d'énergie associé à la mer chaotique avec le doublet tunnel créant des couplages entre les états associés. L'effet tunnel assisté par le chaos propose de décrire ces couplages à l'aide de propriétés statistiques du système calculées par la théorie des matrices aléatoires.

Greene et Percival ont montré que lorsque la dynamique n'est plus intégrable, le prolongement analytique des tores KAM réels dans l'espace complexe est limité par la présence de frontières naturelles [39] et que l'approche de Wilkinson qui consiste à connecter dans le plan complexe les tores KAM est donc inefficace. Néanmoins, la décennie suivante amène son lot de bonnes nouvelles lorsqu'il est remarqué que certaines caractéristiques de l'effet tunnel pouvaient être reproduites à l'aide de sommes d'orbites périodiques complexes (et aussi réelles) [64] [26]. Toujours dans cette direction, Shudo et Ikeda essayent d'isoler, ces dernières années, les trajectoires complexes dominantes qui permettraient de reconstruire par une approche WKB complexe les fonctions d'ondes localisées dans des îlots réguliers et, en particulier, leurs queues exponentielles qui s'étendent au-delà des bords de l'îlot, dans la mer chaotique [86] [87] [88] [89] [90]. Leur approche par l'étude des chaînes de Laputa apparaît comme une voie prometteuse afin de comprendre comment sélectionner, parmi le nombre gigantesque d'orbites classiques complexes, les contributions dominantes. Ce problème reste, à l'heure actuelle, encore ouvert.

Bien que principalement présentés dans le cadre des systèmes intégrables, les résultats obtenus dans cette thèse sont en partie motivés par ces derniers développements. Nous proposons une approche directe du calcul de la largeur des doublets ΔE_n, généralisant la méthode instantons, qui s'appuie sur le calcul de la trace de propagateurs quantiques en temps complexe et l'utilisation de certains chemins du temps complexe $[t]$ comme critère de sélection des orbites périodiques complexes. Les résultats obtenus dans le cadre de l'approximation semiclassique sont très convaincants pour les systèmes $1D$ indépendants du

temps. La discussion sur l'existence de trajectoires périodiques complexes qui contribuent à l'effet tunnel dans le cas non intégrable laisse entrevoir, pour l'avenir, notre approche comme un potentiel chemin (complexe ?) d'exploration vers l'interprétation semiclassique de l'effet tunnel chaotique.

Il n'existe pas encore de théorie semiclassique complète de l'effet tunnel dans les systèmes mixtes. La théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances, développée ces dernières années [16] [17] reste, à ce jour, le mécanisme le plus abouti afin de décrire les fluctuations géantes comme des couplages entre états localisés de part et d'autre d'une chaîne de résonances non linéaires classiques au sein d'un îlot régulier [31] [76]. L'objectif est de remplacer le hamiltonien exact par une approximation intégrable et traiter une perturbation de ce hamiltonien par la théorie des perturbations quantiques. Les dernières améliorations apportées [3] [67] [4] permettent d'obtenir des résultats en très bon accord avec les calculs numériques. Cette approche sera abordée dans la dernière partie de ce manuscrit en tentant de l'adapter dans le cadre de systèmes intégrables présentant deux îlots principaux séparés par une chaîne de résonances.

Cette thèse se décompose en trois parties. La première tente d'établir un état des lieux et de présenter les outils dont nous aurons besoin par la suite. En particulier, le premier chapitre présentera principalement l'incontournable approximation semiclassique JWKB qui conduit naturellement à la notion de quantification EBK. En suivant la démarche proposée par Garg [36], nous appliquerons cette approximation à l'exemple bien connu du double puits afin de retrouver simplement le comportement exponentiellement décroissant de la largeur des doublets tunnel. Le chapitre 2 introduit la notion d'espace des phases et d'intégrabilité. Dans le cas de systèmes non intégrables, nous décrivons comment approcher la dynamique autour d'un point d'équilibre à l'aide des formes normales. Cette section est un prétexte afin de construire une classe de hamiltoniens intégrables sous la forme de polynômes en les coordonnées de l'espace des phases. Nous proposerons ensuite de complexifier le temps d'évolution du système et d'en étudier les conséquences sur l'espace des phases. Cette étude est justifiée afin de pouvoir évaluer semiclassiquement, en termes de trajectoires complexes, les intégrales de chemins et les propagateurs quantiques en temps complexe. Le troisième chapitre permet de définir la notion de résonance quantique à l'aide d'un des systèmes intégrables parmi les plus simples : le triple puits.

La seconde partie présente le coeur de cette thèse. Le chapitre 4 expose les limites, déjà présentes dans les systèmes unidimensionnels, du calcul de la largeur des doublets tunnel en utilisant l'approche par les instantons et décrit une nouvelle méthode de calcul direct basée sur l'évaluation de traces de produits d'opérateurs incluant l'opérateur d'évolution $\hat{U}(T)$. Nous verrons qu'une rotation de Wick complète est insuffisante dans certaines situations comme la description de l'effet tunnel dynamique ou résonnant, par exemple. Nous insisterons sur l'importance de l'utilisation d'un temps complexe et le fait que cette approche englobe la technique instantons. Le chapitre 5 permet d'illustrer cette méthode au travers de plusieurs exemples utiles comme le double puits, illustrant différentes facettes de l'effet tunnel, comme l'effet tunnel en impulsion grâce au pendule ou encore l'effet tunnel résonant. La comparaison avec les résultats numériques montrent un très bon accord avec le calcul exact obtenu par diagonalisation.

La troisième partie est présentée comme une perspective prochaine de cette nouvelle approche en proposant d'évaluer l'effet tunnel dans des systèmes intégrables unidimensionnels présentant au moins une chaînes de résonances séparant deux tores symétriques et construits à l'aide des formes normales. Ces modèles peuvent rappeler les systèmes quasi-intégrables mais en gardant les bonnes propriétés des systèmes intégrables, nous garantissant une connaissance et un contrôle total de la dynamique classique. Nous commencerons par rappeler la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances dans le cadre des systèmes quasi intégrables ne présentant qu'une seule résonance dominante et tenterons d'adapter ce mécanisme à la classe de systèmes intégrables $1D$ que nous aurons contruits.

Enfin, nous conclurons et proposerons quelques ouvertures et pistes d'étude de cette méthode sur les questions encore ouvertes.

Première partie

L'état des lieux

STEPHANY: What did you do today ?
LEONARD: You know, I'm a physicist. I thought about stuff.
STEPHANY: That's it ? ? ?
LEONARD: Hum... and I wrote some of them.

(*The Big Bang Theory*, season 2, episode 8)

Chapitre 1

Les méthodes standard

Ce premier chapitre a pour but de présenter un ensemble de notions utiles qui seront évoquées dans la présentation des méthodes originales développées dans cette thèse. Les idées exposées dans ce manuscript étant centrées autour l'étude de l'effet tunnel dans la limite semiclassique, nous allons commencer par décrire la résolution de l'équation de Schrödinger dans la limite $\hbar \to 0$ à l'aide de la théorie jwkb, menant naturellement à la notion de quantification de Bohr-Sommerfeld. Nous présenterons l'effet tunnel en utilisant l'exemple standard du double puits unidimensionnel et comment il est interprété en termes de doublets d'énergie quasi-dégénérées présents dans le spectre du système quantique. Nous suivrons enfin la démarche proposée par Garg [36] afin de donner une première expression de la largeur de ces doublets tunnel dans la limite semiclassique.

1.1 L'approximation semiclassique jwkb

En 1926, Schrödinger rédige un article où il écrit pour la première fois l'équation d'onde indépendante du temps qui décrit le comportement d'une particule quantique massive sans spin dans un potentiel [84]. Très rapidement, G. Wentzel, H. Kramers et L. Brillouin proposent une méthode de résolution approchée de cette équation [99] [60] [15]. Cette méthode[1] consiste à résoudre l'équation dans la limite où le paramètre quantique $\hbar \to 0$ en exprimant les fonctions d'onde propres de l'équation de Schrödinger avec les ingrédients classiques du système. Cette idée semble assez naturelle si l'on remarque que lorsque la longueur d'onde de De Broglie λ d'une particule devient très petite comparée aux longueurs caractéristiques du système étudié, elle peut être interprétée « presque » classiquement.

Pour présenter cette méthode, plaçons nous dans le cas simple unidimensionnel. L'équation d'onde stationnaire d'une particule de masse m d'énergie E dans un potentiel constant V dans l'espace des positions q s'écrit dans ce cas :

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} + E - V(q)\right)\psi(q) = 0. \tag{1.1}$$

[1] On peut noter qu'en 1923, H. Jeffreys avait déjà développé une méthode de résolution approchée d'équations différentielles du second ordre dans un cadre plus général que celui de l'équation de Schrödinger.

Il est alors naturel de choisir une solution de cette équation sous la forme :

$$\psi(q) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(q;\hbar)}. \tag{1.2}$$

En injectant cette solution dans l'équation (1.1), on obtient une équation différentielle du 2nd ordre pour $S(q;\hbar)$:

$$\frac{\mathrm{d}^2 S(q;\hbar)}{\mathrm{d}q^2} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{\mathrm{d}S(q;\hbar)}{\mathrm{d}q}\right)^2 + \frac{2m\mathrm{i}}{\hbar}\left(V(q) - E\right) = 0. \tag{1.3}$$

Comme formellement l'approximation semiclassique revient à faire tendre $\hbar$ vers 0, il paraît raisonnable de développer la fonction $S(q;\hbar)$ en série de puissance de $\hbar$:

$$S(q;\hbar) = S_0(q) + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}S_1(q) + \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^2 S_2(q) + \cdots . \tag{1.4}$$

Cette série n'est pas *a priori* convergente, mais en utilisant (1.4) dans (1.3) et en intégrant de manière itérative on trouve à l'ordre 0, l'action classique associée à l'impulsion classique $p(q)$ de la particule à l'énergie E

$$S_0(q) = \pm\int^q \sqrt{2m(E - V(q'))}\mathrm{d}q' = \pm\int^q p(q')\mathrm{d}q' \tag{1.5}$$

(le $\pm$ correspond aux deux branches possibles de l'impulsion dans l'espace des phases) puis en injectant ce résultat dans l'équation à l'ordre 1, on voit apparaître un terme en préfacteur de l'exponentielle (1.2)

$$S_1(q) = \ln\frac{u}{\sqrt{|p|}} \tag{1.6}$$

où u correspond à une constante d'intégration. On peut continuer le même raisonnement aux ordres supérieurs, cependant ces termes deviennent plus difficiles à expliciter [7] d'un point de vue algébrique et n'apportent pas d'autres informations classiques pertinentes sur la fonction d'onde approchée $\psi(q)$. Les deux racines de (1.5) nous permettent d'écrire l'expression générale de la solution approchée au premier ordre en $\hbar$ dans la région classiquement autorisée ($E > V(q)$) comme une combinaison linéaire d'exponentielles complexes :

$$\psi(q) = \frac{\alpha_1}{\sqrt{|p(q)|}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^q p(q')\mathrm{d}q'} + \frac{\beta_1}{\sqrt{|p(q)|}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^q p(q')\mathrm{d}q'}. \tag{1.7}$$

L'avantage de cette méthode est de pouvoir prolonger analytiquement, de manière assez naturelle, les solutions dans les régions de l'espace qui sont classiquement interdites aux solutions réelles des équations du mouvement. Dans ces régions interdites ($V(q) > E$), l'impulsion p devient purement imaginaire

$$\sqrt{2m(V(q) - E)} = \mathrm{i}\sqrt{2m(E - V(q))} = \mathrm{i}|p| \tag{1.8}$$

et la forme de la solution dans ces régions s'écrit alors

$$\psi(q) = \frac{\alpha_2}{\sqrt{|p(q)|}}\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int^q |p(q')|\mathrm{d}q'} + \frac{\beta_2}{\sqrt{|p(q)|}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int^q |p(q')|\mathrm{d}q'}. \tag{1.9}$$

Elle apparaît alors comme une combinaison linéaire d'exponentielles réelles croissantes et décroissantes. Il est possible d'interpréter classiquement ces solutions. En effet, l'élément $|\psi(q)|^2 \mathrm{d}q$ représente la probabilité de présence de la particule quantique dans l'intervalle $[q, q+\mathrm{d}q]$. En négligeant les termes d'interférence entre les deux parties de la solution dans les régions classiquement autorisées

$$|\psi(q)|^2 \propto \frac{1}{p}. \tag{1.10}$$

Il est alors plus probable de mesurer une particule quantique aux endroits où l'impulsion classique p est petite. D'un point de vue classique, si l'impulsion, proportionnelle à la vitesse, est petite alors la particule passe plus de temps en ces endroits. Le préfacteur en $1/\sqrt{p}$ trouve donc bien une interprétation classique.

La dynamique classique nous indique qu'il peut exister des ensembles de points discrets, où l'impulsion est même exactement nulle. Ces points, appelés points de rebroussement (ou caustiques), relient, pour une énergie E donnée, les différentes régions (autorisées/interdites) de l'espace et correspondent à une zone de l'espace où la vitesse de la particule (classique) devient nulle. On voit dés lors une première limite : près de ces points les solutions (1.7) et (1.9) divergent. Ces solutions ne sont donc pas une bonne approximation des vraies fonctions d'onde partout et le second ordre en $\hbar$ de la théorie nous permet d'obtenir une condition de validité. Comme $S_2(q)$ ne va apparaître que dans l'argument des exponentielles, ceci nous permet de dire que si $|\hbar S_2(q)| \ll 1$, alors son influence sera négligeable dans la solution. En définissant la longueur d'onde de De Broglie comme $\lambda(q) = 2\pi\hbar/p(q)$, on arrive à l'égalité suivante

$$\hbar S_2(q) = \pm\frac{1}{2\pi}\left(\frac{\lambda'(q)}{4} - \frac{1}{8}\int^q \frac{\lambda'^2(x)}{\lambda(x)}\mathrm{d}x\right) \tag{1.11}$$

où le $'$ indique la dérivée par rapport à q. La seule façon de rendre ce terme petit est d'imposer $\lambda'(q) \ll 1$ qui signifie que les solutions JWKB ne sont valables que lorsque la longueur d'onde de De Broglie de la particule varie lentement sur une distance de l'ordre de grandeur de la taille du système. Une autre façon de présenter cette condition revient à dire que ces solutions sont exactes pour un système libre et décrivent plutôt bien les vraies fonctions d'onde pour des potentiels suffisamment « lisses » sur des échelles de l'ordre de grandeur de λ. S'assurer de la validité de ces solutions revient donc à être dans une zone de l'espace où $p(q)$ n'est pas trop petit, c'es-à-dire loin des points q tels que $p(q) = 0$, puisque dans le cas contraire $\lambda \to \infty$.

Les expressions (1.7) et (1.9) sont des approximations locales et ne prennent pas en compte ni les conditions aux bords ni la normalisation. C'est près de la frontière entre ces régions que les solutions locales deviennent singulières. L'approche semiclassique de solutions d'équations d'onde précède de beaucoup la naissance de la physique quantique avec des maîtres comme Hamilton ou Liouville sans cependant remédier aux divergences de ces solutions. C'est dans ce sens que la théorie JWKB est apparue nouvelle car elle permet de résoudre ce problème. Afin d'éviter les comportements singuliers des fonctions d'ondes JWKB, on peut choisir d'approcher le potentiel $V(q)$ au voisinage des points de rebroussement par son approximation linéaire. Près de ces points, l'équation de Schrödinger est

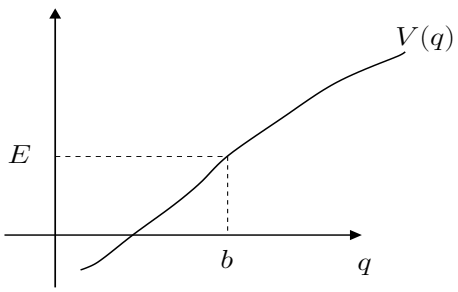


FIG. 1.1: Une particule classique d'énergie E, soumise à ce type de potentiel $V(q)$, qui arrive par la gauche rebroussera chemin lorsqu'elle atteindra le point b où sa vitesse s'annulera.

équivalente à l'équation d'AIRY. L'idée est alors de faire correspondre les solutions JWKB dans chaque région à des combinaisons linéaires des fonctions d'AIRY $A_i(q)$ et $B_i(q)$, solutions de l'équation du même nom. Supposons une situation où une particule, d'énergie E, approche un point de rebroussement $q = b$ comme celui présenté sur la figure (1.1). Le potentiel va, près du point de rebroussement b, prendre la forme suivante

$$E - V(q) \approx F_b(q-b), \qquad F_b = -\left.\frac{\mathrm{d}V(q)}{\mathrm{d}q}\right|_{q=b} < 0. \tag{1.12}$$

L'équation de SCHRÖDINGER décrit alors, au voisinage de b, une particule soumise à une force constante F_b. À partir des solutions de cette équation, il est possible d'établir des connexions entre les solutions locales des différentes régions de l'espace [62] [71].

1.2 Formules de connexion

Nous allons maintenant décrire le moyen de relier les coefficients des solutions semi-classiques de part et d'autre d'un point de rebroussement. L'équation de SCHRÖDINGER approchée autour d'un point de rebroussement à pente positive (comme le point b)

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} + F_b(q-b)\right)\psi(q) = 0 \tag{1.13}$$

aura comme solution générale une combinaison linéaire des fonctions d'AIRY [1]

$$\psi(q) = \alpha A_i(|F_b(q-b)|) + \beta B_i(|F_b(q-b)|). \tag{1.14}$$

Suffisamment loin à droite (respectivement à gauche) du point de rebroussement $q \gg b$ (respectivement $q \ll b$), dans la zone classiquement interdite (respectivement autorisée), la solution se réécrit à l'aide des formes asymptotiques des fonctions d'AIRY

$$\psi(q) \overset{q\gg b}{\approx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}|F_b(q-b)|^{\frac{1}{4}}}\left[\alpha\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^q |p(q')|\mathrm{d}q'\right) + 2\beta\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^q |p(q')|\mathrm{d}q'\right)\right] \tag{1.15}$$

$$\psi(q) \overset{q\ll b}{\approx} \frac{1}{\sqrt{\pi}|F_b(q-b)|^{\frac{1}{4}}}\left[\alpha\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_q^b p(q')\mathrm{d}q' + \frac{\pi}{4}\right) + \beta\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_q^b p(q')\mathrm{d}q' + \frac{\pi}{4}\right)\right] \tag{1.16}$$

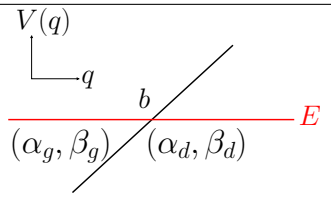
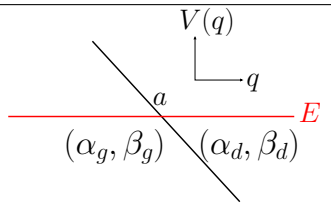
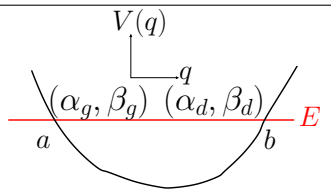
et prennent les formes (1.7) et (1.9) des solutions semiclassiques dans les régions interdite et autorisée

$$\psi(q) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi|p(q)|}} \left\{ \alpha_d \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_b^q |p(q')|\mathrm{d}q'} + \beta_d \mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_b^q |p(q')|\mathrm{d}q'} \right\}, & q > b \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi p(q)}} \left\{ \alpha_g \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_b^q p(q')\mathrm{d}q'} + \beta_g \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_b^q p(q')\mathrm{d}q'} \right\}, & q < b \end{cases} \tag{1.17}$$

en définissant

$$\begin{cases} \alpha_g &= \alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} + \beta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} \\ \beta_g &= \alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} + \beta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \alpha_d &= \alpha \\ \beta_d &= 2\beta \end{cases}.$$

Par identification des deux expressions (1.17) et (1.15), (1.16), on relie les coefficients α et β. La démarche précédente peut être reproduite avec un point de rebroussement à pente négative et également, plus simplement, une configuration sans point de rebroussement. Les résultats sont rassemblés dans le tableau (1.1) qui représente les matrices de transfert entre les coefficients de la fonction d'onde à droite et à gauche pour chacune des configurations.

Type de point de rebroussement	Matrice de transfert
	$\begin{pmatrix} \alpha_d \\ \beta_d \end{pmatrix} = T_+(b^+, b^-) \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \beta_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} & \frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \beta_g \end{pmatrix}$
	$\begin{pmatrix} \alpha_d \\ \beta_d \end{pmatrix} = T_-(a^+, a^-) \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \beta_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} \\ \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \beta_g \end{pmatrix}$
	$\begin{pmatrix} \alpha_d \\ \beta_d \end{pmatrix} = T(b^-, a^+) \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \beta_g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}q} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_g \\ \beta_g \end{pmatrix}$

TAB. 1.1: Matrices de transfert entre les coefficients des fonctions d'onde semiclassiques de gauche et droite.

1.3 Quantification de BOHR-SOMMERFELD

Lorsque une particule est confinée dans un potentiel comme, par exemple, celui décrit par la figure (1.2), le spectre en énergie est discret et l'approche semiclassique permet de

retrouver cette propriété [94]. En effet, dans la région autorisée, la solution est donnée par l'équation (1.7) où les exponentielles peuvent être combinées sous la forme d'un sinus pour donner

$$\psi(q) = \frac{A}{\sqrt{p(q)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^q p(q')\mathrm{d}q' + \frac{\pi}{4}\right) \tag{1.18}$$

$$= \frac{A}{\sqrt{p(q)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p(q')\mathrm{d}q' + \frac{\pi}{2} + \frac{1}{\hbar}\int_b^q p(q')\mathrm{d}q' - \frac{\pi}{4}\right). \tag{1.19}$$

La phase $\pi/4$ apparaît naturellement lorsque l'on raccorde les solutions JWKB avec les formes asymptotiques des fonctions d'Airy. Il en est de même pour le facteur A qui relie les constantes α_g et β_g comme $\alpha_g = -\beta_g = 2\mathrm{i}A$. Seulement les solutions semiclassiques sont définies à une constante près qui correspond à une des bornes de l'intégrale dans l'exponentielle. Il est donc possible d'écrire cette même solution sous la forme

$$\psi(q) = \frac{B}{\sqrt{p(q)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_q^b p(q')\mathrm{d}q' + \frac{\pi}{4}\right). \tag{1.20}$$

avec $\alpha_d = -\beta_d = 2\mathrm{i}B$. Comme la fonction d'onde doit être univaluée, les deux équations (1.18) et (1.20) doivent être égales. Il apparaît alors deux relations qui lient les préfacteurs et les phases

$$A = (-1)^n B \tag{1.21}$$

$$\oint p(q', E_n)\mathrm{d}q' = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{1.22}$$

La notation $\oint$ correspond à l'intégrale le long du chemin classique partant de a allant jusqu'à b puis revenant à a. On reconnaît l'action classique associée à une particule réalisant un aller-retour complet, pendant une période, dans un système borné. Cette action représente également l'aire entourée par l'orbite dans l'espace des phases comme nous le verrons au chapitre suivant. Dans le cas d'un système unidimensionnel, cette dernière relation permet de déterminer explicitement les niveaux d'énergie, caractérisés par l'indice n, en inversant la définition de l'impulsion $p(q, E_n) = \sqrt{2m(E_n - V(q))}$.

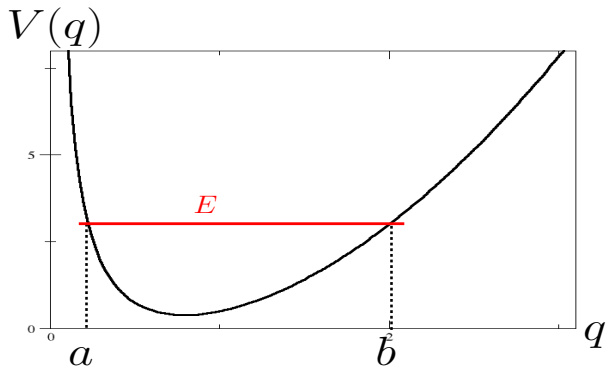


FIG. 1.2: Une particule classique d'énergie E piégée dans un puits simple oscille à une période $T(E)$ entre les points de rebroussement a et b.

1.4 Le double puits

Le double puits est un exemple standard traité lorsque l'on étudie l'effet tunnel. Il peut modéliser les oscillations de RABI entre deux configurations stables de la molécule d'ammoniac NH_3 comme présenté sur la figure (1.3), processus classiquement interdit lorsque $E_0 < V_{max}$, à l'aide d'un hamiltonien du type

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{q}), \tag{1.23}$$

avec le potentiel

$$\hat{V}(\hat{q}) = \frac{V_{max}}{a^4}(\hat{q} + a)^2(\hat{q} - a)^2. \tag{1.24}$$

Le symbole ˆ nous permettra par la suite de distinguer les opérateurs quantiques des fonctions classiques. Classiquement, il existe 2 configurations énergétiques identiques possibles pour une particule d'énergie E donnée, inférieure à V_{max} : elle peut être piégée soit dans le puits de droite ou celui de gauche. Semiclassiquement, ces deux configurations peuvent être décrites par des quasimodes $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$, orthogonaux, localisés respectivement dans le puits de gauche et de droite. Ces deux états ne sont pas des fonctions propres du système et sont associés à la même énergie E_0 qui vérifie la condition de quantification de BOHR-SOMMERFELD dans chaque puits. Dans ce cas, on néglige le couplage entre les deux puits. En effet, en réalité les fonctions propres du système stationnaire sont globalement délocalisées sur l'ensemble des deux puits. Au premier ordre de l'approximation JWKB, les fonctions propres s'écrivent comme des combinaisons linéaires symétriques et antisymétriques des états $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$

$$|\psi_\pm\rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_G\rangle \pm |\psi_D\rangle\right) \tag{1.25}$$

et doivent vérifier exactement

$$\hat{H}|\psi_\pm\rangle = E_\pm|\psi_\pm\rangle. \tag{1.26}$$

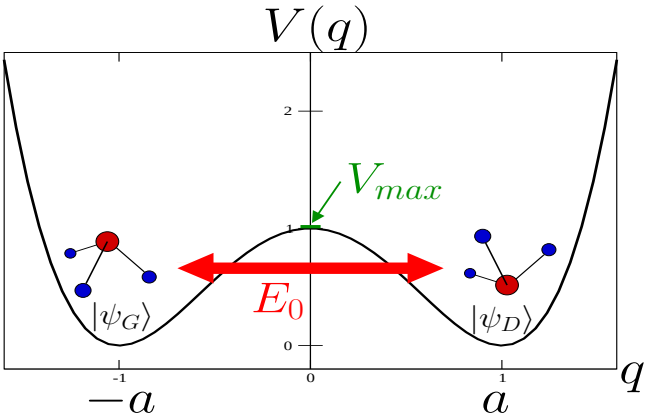


FIG. 1.3: Une molécule d'ammoniac NH_3 est constituée d'un atome d'azote (N) lié à trois atomes d'hydrogène (H). Le plan formé par les trois atomes d'hydrogène est classiquement infranchissable par l'atome d'azote pour $E_0 < V_{max}$. Quantiquement, l'atome d'azote oscille de part et d'autre du plan par effet tunnel, correspondant à deux états quantiques distincts $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$. Ce système peut être décrit à partir du potentiel (1.24) (ici $a = V_{max} = 1$).

La symétrie du système nous autorise à classer les états propres selon leur parité ($\pm$). Évaluer quantitativement l'effet tunnel revient à calculer la différence d'énergie $\Delta E = E^- - E^+$. Pour cela, on commence par calculer les éléments de matrices

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{G/D}|\hat{H}|\psi_{D/G}\rangle &\approx \frac{1}{2}\left[\left(\langle\psi_+| \pm \langle\psi_-|\right)\hat{H}\left(|\psi_+\rangle \mp |\psi_-\rangle\right)\right] && (1.27)\\
&= \frac{1}{2}\left[\langle\psi_+|\hat{H}|\psi_+\rangle - \langle\psi_-|\hat{H}|\psi_-\rangle \pm \langle\psi_-|\hat{H}|\psi_+\rangle \mp \langle\psi_+|\hat{H}|\psi_-\rangle\right] && (1.28)\\
&= \frac{1}{2}(E^+ - E^-) = -\frac{\Delta E}{2} && (1.29)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\langle\psi_{G/D}|\hat{H}|\psi_{G/D}\rangle &\approx \frac{1}{2}\left[\left(\langle\psi_+| \pm \langle\psi_-|\right)\hat{H}\left(|\psi_+\rangle \pm |\psi_-\rangle\right)\right] && (1.30)\\
&= \frac{1}{2}\left[\langle\psi_+|\hat{H}|\psi_+\rangle + \langle\psi_-|\hat{H}|\psi_-\rangle \pm \langle\psi_-|\hat{H}|\psi_+\rangle \pm \langle\psi_+|\hat{H}|\psi_-\rangle\right] && (1.31)\\
&= \frac{1}{2}(E^+ + E^-) \approx E_0. && (1.32)
\end{aligned}$$

La théorie semiclassique nous permet donc de réduire le problème à un système à deux niveaux, dont la matrice du hamiltonien s'écrit dans la base $\{|\psi_G\rangle, |\psi_D\rangle\}$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -\frac{\Delta E}{2} \\ -\frac{\Delta E}{2} & E_0 \end{pmatrix}.$$

Les termes en dehors de la diagonale représente le couplage entre les deux états localisés dans les deux puits. Les vecteurs propres et énergies propres de ce hamiltonien sont

$$|\psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_G\rangle \pm |\psi_D\rangle) \tag{1.33}$$

$$E_\pm = E_0 \mp \frac{\Delta E}{2}. \tag{1.34}$$

Le couplage lève la dégénérescence des niveaux d'énergie associés aux quasimodes. Ne pas négliger ce couplage revient à autoriser un état localisé dans un des puits sous la barrière d'énergie à traverser cette barrière par effet tunnel. Ce modèle à deux niveaux n'est cependant valable que sous l'hypothèse où le doublet (E_+,E_-) est suffisamment loin des autres niveaux d'énergie du système afin d'assurer un couplage faible avec ceux-ci. Nous verrons par la suite qu'il n'est pas toujours possible de réduire le système de cette manière comme, par exemple, lorsque l'on étudie l'effet tunnel entre deux puits séparés par un troisième puits intermédiaire. Le couplage entre les niveaux d'énergie n'est alors pas toujours négligeable même dans un régime semiclassique.

1.5 Formule d'Herring

À partir des informations précédentes, il possible d'obtenir une première expression semiclassique pour la différence des niveaux d'énergie ΔE en utilisant une formule générale dérivée par Herring [43],[44] dans les années soixante, largement utilisée par la suite [100], [25]. Nous allons ici utiliser une forme simplifiée (dans le cadre d'une théorie unidimensionnelle avec certaines propriétés de symétrie) de cette formule en donnant un développement alternatif [36] à la démonstration originale.

Supposons, par exemple, que l'on prépare une particule dans un état localisé dans le puits de droite à l'instant initial $t = 0$

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\psi_D\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle). \tag{1.35}$$

Celle-ci va alors évoluer dans le temps et osciller d'un puits à l'autre suivant l'expression de la fonction d'onde

$$|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_0}{\hbar}t}\left\{\cos\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right)|\psi_D\rangle + \mathrm{i}\sin\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right)|\psi_G\rangle\right\} \tag{1.36}$$

avec une période d'oscillation $T = 4\pi\hbar/\Delta E$. La période d'oscillation est donc d'autant plus courte que la largeur du doublet est grande. La probabilité de trouver la particule dans le puits de droite est donc donnée par le module au carré du recouvrement de $|\psi_D\rangle$ avec $|\Psi(t)\rangle$

$$P_D(t) = |\langle\psi_D|\Psi(t)\rangle|^2 \overset{1.36}{=} \cos^2\left(\frac{\Delta E}{2\hbar}t\right). \tag{1.37}$$

On peut également retrouver cette probabilité en utilisant l'équation de conservation du courant de probabilité $|\langle q|\Psi(t)\rangle|^2 = |\Psi(q,t)|^2$

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial q}\mathrm{Im}\left\{\Psi^*(q,t)\frac{\partial\Psi}{\partial q}(q,t)\right\}. \tag{1.38}$$

Il suffit alors d'intégrer $P(q,t)$ sur l'espace

$$P_D(t) \approx \int_0^\infty P(q,t)\mathrm{d}q. \tag{1.39}$$

L'hypothèse semiclassique nous permet de négliger le couplage entre le puits de gauche et de droite et justifie le fait que, pour obtenir la probabilité de trouver la particule dans le puits de droite, on intègre seulement dans l'intervalle $[0,\infty[$. On remarque que les solutions bornées de l'équation de Schrödinger doivent être de carré intégrable

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(q,t)|^2 \mathrm{d}q < \infty \tag{1.40}$$

et que la symétrie du système permet de décrire les deux états stationnaires $\langle q|\psi_D\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \psi_D(q)$ et $\langle q|\psi_G\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \psi_G(q) = \psi_D(-q)$ par la même fonction. Si l'on calcule maintenant la dérivée temporelle de $P_D(t)$

$$\frac{\mathrm{d}P_D}{\mathrm{d}t}(t) \approx \int_0^\infty \frac{\partial P(q,t)}{\partial t}\mathrm{d}q \stackrel{1.38}{=} \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{\Psi^*(0,t)\frac{\partial \Psi}{\partial q}(0,t)\right\} \tag{1.41}$$

$$\stackrel{1.36}{=} -\frac{\hbar}{m}\psi_D(0)\frac{\mathrm{d}\psi_D}{\mathrm{d}q}(0)\sin\left(\frac{\Delta E}{\hbar}t\right) \tag{1.42}$$

$$\stackrel{1.37}{=} -\frac{\Delta E}{2\hbar}\sin\left(\frac{\Delta E}{\hbar}t\right), \tag{1.43}$$

les deux dernières expressions nous donnent finalement une première formule semiclassique de l'écart des niveaux d'énergie

$$\Delta E = \frac{2\hbar^2}{m}\psi_D(0)\frac{\mathrm{d}\psi_D}{\mathrm{d}q}(0) \tag{1.44}$$

qui ne nécessite la connaissance du quasimode du puits de droite et de sa dérivée uniquement en 0. À partir de cette expression, il est possible de décrire le comportement exponentiellement décroissant de ΔE, en particulier pour le doublet fondamental, c'est à dire pour les deux premiers niveaux $\Delta E_0 = E_0^- - E_0^+$. L'approche habituelle, décrite par Landau & Lifshitz [61], consiste à remplacer ψ_D et $\mathrm{d}\psi_D/\mathrm{d}q$ par leur approximation semiclassique en utilisant, grâce aux formules de connexions, le prolongement analytique des fonctions d'ondes dans les régions interdites. Il s'avère cependant que l'expression obtenue n'est qu'exponentiellement précise et afin d'obtenir le bon préfacteur, Garg [36] préconise la comparaison des fonctions propres de l'oscillateur harmonique avec les solutions semiclassiques en s'exemptant des formules de connexions.

Il n'est pas nécessaire de considérer exactement le potentiel défini en (1.24). La démonstration reste valable dans le cas d'un hamiltonien quadratique en p avec un potentiel simplement en forme de double puits symétrique. En supposant que On note $\pm b$ les points de rebroussement tels que l'approximation harmonique de fond de puits donne $V(\pm b) = E_0 = \hbar\omega/2$ où ω est la fréquence des petites oscillations dans les puits centrés en $\pm a$, tels que $V(\pm a) = 0$, comme présentés sur la figure (1.4) La théorie jwkb nous fournit une expression de la fonction d'onde $\psi_D(q)$ du puits de droite, loin dans la région classiquement interdite $[-b,b]$

$$\psi_D(q) = \frac{C}{\sqrt{p(q)}}\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_0^q |p(q')|\mathrm{d}q'} \tag{1.45}$$

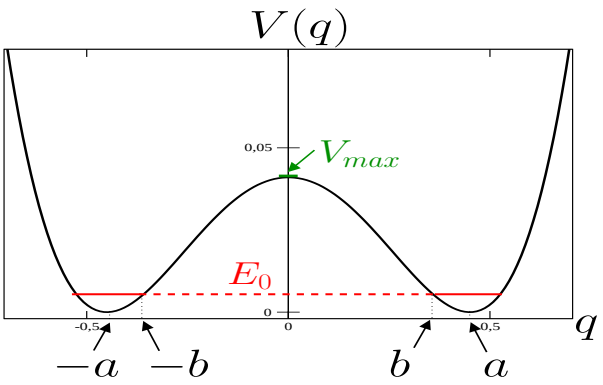


FIG. 1.4: Double puits symétrique défini par l'équation (1.24) avec les paramètres $a = 0.45$ et $V_{max} = 0.04100625$. Les minima sont centrés en $\pm a$.

ainsi que de sa dérivée

$$\frac{\mathrm{d}\psi_D}{\mathrm{d}q}(q) \approx \frac{|p(q)|}{\hbar}\psi_D(q). \tag{1.46}$$

Le choix de la borne inférieure de l'intégrale dans l'argument de l'exponentielle est arbitraire et peut être absorbée dans la constante C. Elle est le plus souvent choisie de manière à rendre commodes les calculs. La largeur du doublet (1.44) s'écrit alors

$$\Delta E_0 = \frac{2\hbar}{m}C^2. \tag{1.47}$$

Afin d'obtenir C, on remarque qu'en fond de puits la fonction d'onde $\psi_D(q)$ est bien représentée par l'état fondamental de l'oscillateur harmonique

$$\psi_D(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(q-a)^2} \tag{1.48}$$

et qu'elle reste en particulier valable dans la région interdite $[-b, b]$. L'impulsion classique associée au niveau fondamental de l'oscillateur harmonique dans cette région devient alors imaginaire dont le module $|p(q)| = \sqrt{2m(V(q) - E_0)} = m\omega\sqrt{(a-q)^2 - \hbar/(m\omega)}$ et permet de réécrire (1.45) comme

$$\psi_D(q) \approx \frac{C}{\sqrt{m\omega(a-q)}} \mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_0^b |p(q')|\mathrm{d}q' + \phi(q)} \tag{1.49}$$

où

$$\phi(q) = -\frac{m\omega}{\hbar}\int_q^b \sqrt{(a-q')^2 - \frac{\hbar}{m\omega}}\mathrm{d}q' \tag{1.50}$$

$$\approx -\frac{m\omega(a-q)^2}{2\hbar} + \frac{1}{2}\ln\left(\frac{2\sqrt{m\omega}(a-q)}{\sqrt{\hbar}}\right) + \frac{1}{4}. \tag{1.51}$$

Il suffit enfin de comparer les deux expressions de $\psi_D(q)$ (1.48) et (1.49) pour trouver C et remplacer dans (1.47) pour obtenir la loi de l'écart du doublet fondamental

$$\Delta E_0 = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\mathrm{e}\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{b}|p(q)|\mathrm{d}q}. \tag{1.52}$$

La formule obtenue par Landau & Lifshitz [61] diffère de celle-ci d'un facteur $\sqrt{\mathrm{e}/\pi}$. Nous reviendrons plus tard sur ce facteur qui semble apparaître uniquement pour le fondamental. On note que les bornes de l'intégrale dépendent des points de rebroussement $\pm b$ et donc de l'énergie moyenne E_0 du fondamental. La formule ne montre pas explicitement la dépendance en $\hbar$ et rend par conséquent l'utilisation de cette formule délicate. Garg dérive alors une expression dont les bornes de l'intégrale sont fixées par le fond des puits $\pm a$ et constate que le préfacteur varie en réalité comme $\sqrt{\hbar}$

$$\Delta E_0 = 2a\omega \left(\frac{m\omega\hbar}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{A} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}\sqrt{2mV(q)}\mathrm{d}q} \tag{1.53}$$

avec

$$A = \int_0^a \left(\frac{m\omega}{\sqrt{2mV(q)}} - \frac{1}{a-q}\right)\mathrm{d}q. \tag{1.54}$$

Cette forme est identique à celle obtenue par la méthode standard des instantons développée par Coleman [22]. À partir de la démarche décrite précédemment, on généralise (1.52) à un doublet arbitraire $\Delta E_n = E_n^- - E_n^+$ tant que l'on reste dans un régime suffisamment semiclassique. L'idée est toujours de comparer la forme jwkb de la fonction d'onde à l'état de l'oscillateur harmonique correspondant [36] pour obtenir

$$\Delta E_n = g_n \frac{\hbar\omega}{\pi} \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-b_n}^{+b_n}|p(q)|\mathrm{d}q} \tag{1.55}$$

avec

$$g_n = \frac{\sqrt{2\pi}}{n!}\,(n+1/2)^{n+\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{-(n+1/2)}. \tag{1.56}$$

Les $\pm b_n$ correspondent aux points de rebroussement d'une particule classique d'énergie $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$. Il est clair que plus le niveau n du doublet est élevé, moins l'approximation est bonne. Il est donc nécessaire de rester dans un régime très semiclassique afin de s'assurer que l'approximation harmonique de fond de puits reste valable.

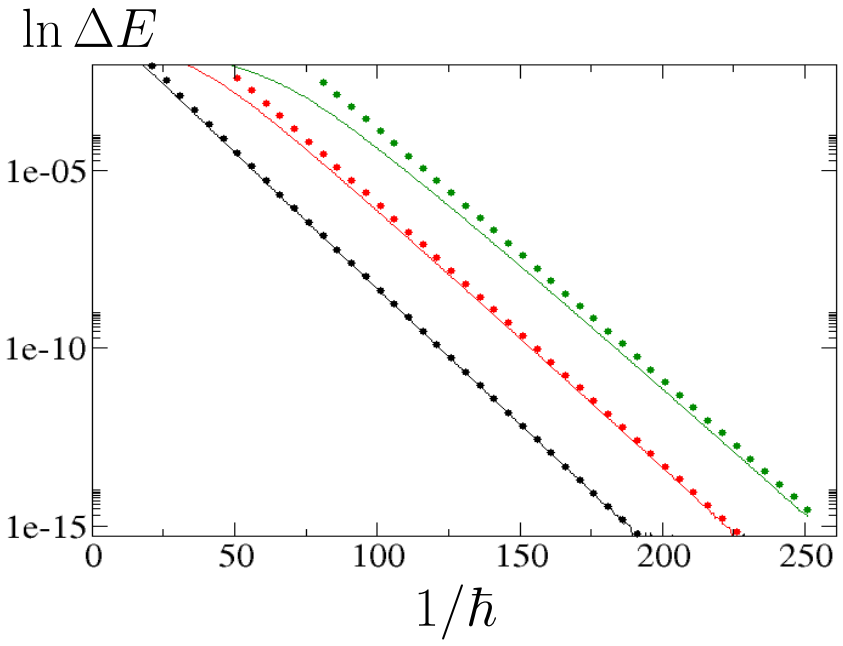


FIG. 1.5: On trace la largeur des trois premiers doublets d'énergie ΔE_0, ΔE_1 et ΔE_2 (respectivement en noir, rouge et vert) en échelle semi-logarithmique pour le potentiel donné par l'équation (1.24) avec $a = 0.45$ et $V_{max} = 0.04100625$. Les lignes représentent le calcul « exact » (diagonalisation) tandis que les points correspondent à l'équation (1.55). L'accord avec la diagonalisation est très bon pour le fondamental tandis que pour les deux premiers doublets excités, la formule semble être d'autant plus précise que $\hbar \to 0$.

Chapitre 2

Espace des phases et complexification

Dans le cadre d'une interprétation de l'effet tunnel en termes d'ingrédients classiques, l'espace des phases s'avère être un outil très puissant. La première partie de ce chapitre consiste à présenter les caractéristiques de l'espace des phases de systèmes intégrables et certains objets semiclassiques (quantification, distribution de Husimi) ainsi qu'une méthode d'approximation intégrable de l'espace des phases dans le cas où l'intégrabilité du système n'est pas vérifiée. Dans la suite, une description semiclassique de l'effet tunnel nécessitant d'étendre les trajectoires classiques dans l'espace complexe, nous proposerons une complexification de l'espace des phases et insisterons sur l'importance de ces trajectoires complexes lors du calcul semiclassique de propagateurs quantiques.

2.1 L'espace des phases

La mécanique hamiltonienne est la description de l'évolution au cours du temps d'un système physique classique à N degrés de liberté en termes de coordonnées canoniques généralisées $q_i(t)$ et de leurs moments conjugués $p_i(t)$ $(i = 1 \dots N)$. Cette description est particulièrement bien adaptée à l'analyse quantique et semiclassique et permet de discerner assez naturellement le caractère intégrable ou non-intégrable de ces systèmes. Il est toujours possible, à l'aide d'un changement de variables, de réécrire un hamiltonien dépendant explicitement du temps comme un système autonome à $N + 1$ degrés de liberté. Considérons alors, sans perte de généralité, un hamiltonien indépendant du temps $H(p_1, \dots, p_N, q_1, \dots, q_N)$ soumis aux équations du mouvement

$$\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \tag{2.1}$$

$$\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{2.2}$$

avec $i = 1 \dots N$. Les solutions des équations d'Hamilton (2.1) et (2.2)

$$q_i(t) = q_i(\mathbf{q_0}, \mathbf{p_0}, t), \qquad p_i(t) = p_i(\mathbf{q_0}, \mathbf{p_0}, t), \tag{2.3}$$

où $\mathbf{q_0} = (q_1(0), \dots, q_N(0))$ et $\mathbf{p_0} = (p_1(0), \dots, p_N(0))$ sont les conditions initiales qui déterminent entièrement et de manière unique la trajectoire classique, se propagent au cours du

temps dans un espace de dimension $2N$ appelé espace des phases. Un système hamiltonien sera défini comme intégrable s'il est possible de trouver autant de fonctions indépendantes $I_i(p_1, \ldots, p_N, q_1, \ldots, q_N)$, qui commutent entre elles, que de degrés de liberté. Ces fonctions doivent respecter la condition suivante sur les crochets de Poisson

$$\{I_i, I_j\} = 0, \qquad i = 1, \ldots, N \text{ et } j = 1, \ldots, N. \tag{2.4}$$

L'existence de ces N fonctions indépendantes signifie que les trajectoires classiques restent confinées sur une variété de dimension N au sein de l'espace des phases de taille $2N$ et cette variété possède la topologie d'un tore de dimension N plongé dans un espace de dimension $2N$ [2]. Si ces N fonctions peuvent être écrites comme N moments conjugués constants alors les équations du mouvement s'intègrent très simplement

$$\frac{\mathrm{d}I_i}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial}{\partial \theta_i}\tilde{H}(I_1, \ldots, I_n) = 0, \tag{2.5}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta_i}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial I_i} = \omega_i(I_1, \ldots, I_n) \tag{2.6}$$

où $\tilde{H}(I_1, \cdots, I_N)$ est le hamiltonien écrit dans le nouveau jeu de variables (I_i, θ_i), appelées coordonnées actions-angles. Elles sont obtenues par une transformation canonique

$$I_i = \frac{1}{2\pi}\oint_{\mathcal{C}_i}\sum_{n=1}^{N} p_n \mathrm{d}q_n \tag{2.7}$$

$$\theta_i = \frac{\partial}{\partial I_i}F(q_1, \ldots, q_N, I_1, \ldots, I_N). \tag{2.8}$$

où $F(q_1, \ldots, q_N, I_1, \ldots, I_N)$ est la fonction génératrice associée à la transformation et où les $\mathcal{C}_i$ correspondent aux N chemins irréductibles topologiquement indépendants sur le $N-$tore qui contient la trajectoire. Les conditions initiales $(\mathbf{q_0}, \mathbf{p_0})$ définissent les tailles des $N-$tores et les fréquences ω_i de rotation des angles θ_i sur le tore. Par la suite nous nous intéresserons principalement aux systèmes conservatifs unidimensionnels, c'est-à-dire

$$E = H(p, q) \tag{2.9}$$

où E représente l'énergie du système dépendant alors des conditions initiales (q_0, p_0). L'intégrale du mouvement du système dépend explicitement et uniquement de l'énergie $I = I(E)$. Dans ce cas le tore sur lequel évolue la trajectoire et la surface d'énergie correspondent à une variété de dimension 1. Un hamiltonien unidimensionnel et indépendant du temps, tel qu'il a été défini précédemment, est donc nécessairement intégrable puisqu'il possède autant de degrés de liberté que de constantes du mouvement, l'énergie.

L'approximation semiclassique permet de quantifier, dans le cas multidimensionnel, les énergies du système grâce à la quantification EBK (Einstein-Brillouin-Keller) [55] [54] qui généralise la condition de Bohr-Sommerfeld vue au chapitre précédent

$$I_i = \frac{1}{2\pi}\oint_{\mathcal{C}_i}\sum_{m=1}^{N} p_m \mathrm{d}q_m = \hbar\left(n_i + \frac{\alpha_i}{4}\right) \tag{2.10}$$

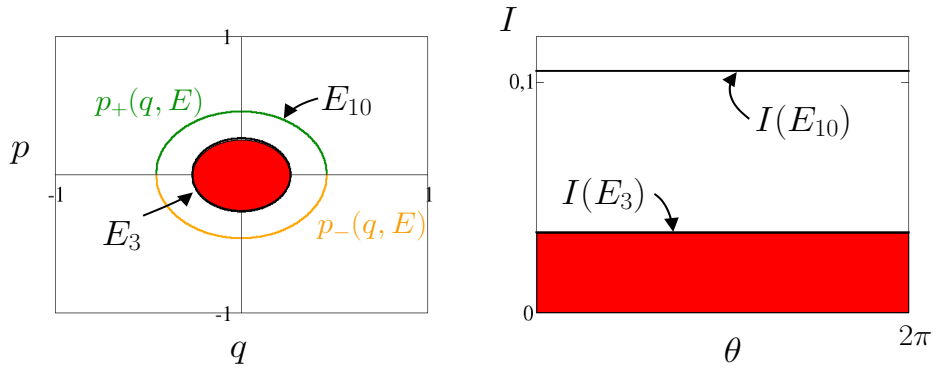


FIG. 2.1: On représente ici l'espace des phases d'un oscillateur harmonique $H(p,q) = (1/2)(p^2+q^2)$ dans les coordonnées (p,q) (à gauche) puis dans les coordonnées action-angle (I,θ) (à droite) où le hamiltonien se réécrit $\tilde{H}(I) = I$. L'approximation EBK en (2.10) permet de quantifier les niveaux d'énergie $E_n = I = \hbar(n+1/2)$. Les lignes d'isoénergie des niveaux $n = 3$ et 10 sont représentées pour $\hbar = 0.01$. Dans le cas d'un hamiltonien quadratique en p, chaque ligne est composée de deux branches $p_\pm(q)$. La transformation qui permet de passer de (p,q) à (I,θ) est canonique. Elle conserve donc les aires (actions) couvertes (en rouge) par les lignes d'isoénergies d'un espace des phases à l'autre $\oint p(q,E_n)\mathrm{d}q = \int_0^{2\pi} I(E_n)\mathrm{d}\theta = 2\pi I(E_n)$. L'action apparaît donc comme un invariant géométrique.

où les α_i sont appelés indices de MASLOV et représentent le nombre de caustiques traversées par la trajectoire. Pour un système unidimensionnel, cette condition représente simplement le fait que l'on compte n états semiclassiques de taille $\Delta p \Delta q \propto \hbar$ sous l'aire balayée par la ligne (1−tore) d'isoénergie E_n. L'exemple de l'oscillateur harmonique est brièvement présenté sur la figure (2.1). L'espace des phases permet aussi de représenter naturellement les fonctions d'onde quantiques des systèmes classiques étudiés. Une façon de procéder est d'utiliser la distribution de HUSIMI [48] [95] qui représente la décomposition d'un état dans une base adaptée à l'espace des phases, la base des états cohérents [58]. En utilisant la définition d'un état cohérent projeté sur la base des états propres de l'oscillateur harmonique

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \tag{2.11}$$

où $\alpha \stackrel{\text{def}}{=} (p+\mathrm{i}q)/\sqrt{2\hbar}$ et les $|n\rangle$ correspondent aux vecteurs propres de l'oscillateur harmonique, on construit la distribution de HUSIMI qui est, par définition, le module au carré de la projection d'un état $|\psi\rangle$ sur un état cohérent

$$h(p,q) \stackrel{\text{def}}{=} |\langle\alpha|\psi\rangle|^2 = \mathrm{e}^{-(p^2+q^2)/(2\hbar)} \left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle\psi|n\rangle \right|^2 . \tag{2.12}$$

Cette fonction est une représentation, par construction positive, de l'état $|\psi\rangle$ et permet de connaître la densité de probabilité de cet état en chaque point de l'espace des phases. Elle

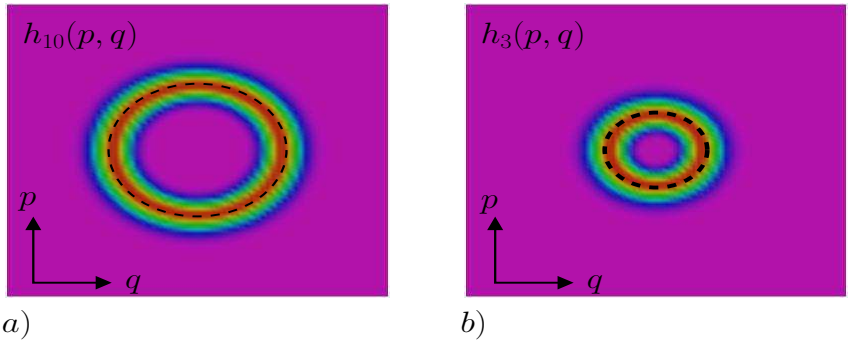


FIG. 2.2: Les distributions de HUSIMI des états propres 3 (b)) et 10 (a)) de l'oscillateur harmonique défini à la figure (2.1) sont tracées ici. Les pointillés noirs représentent la trajectoire classique d'énergie constante associée au niveau correspondant. Les distributions sont d'autant plus localisées sur leur tore classique que l'on se trouve dans un régime très semiclassique. Dans le cas particulier de l'oscillateur harmonique, il est important de souligner que le traitement semiclassique est parfaitement exact.

peut-être vue encore comme le cas particulier de la convolution de la fonction de WIGNER avec une gaussienne [95] [29]

$$h(p,q) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\mathrm{d}p' W(q',p') \exp\left\{-\frac{(p-p')^2}{2\hbar^2 b^2} - \frac{(q-q')^2 b^2}{2\hbar^2}\right\} \tag{2.13}$$

où b est un paramètre qui gouverne la largeur de la gaussienne et $W(q,p)$ la fonction de WIGNER définie comme

$$W(q,p) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(q+y/2)\psi^*(q-y/2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}py/\hbar}\mathrm{d}y. \tag{2.14}$$

2.2 Formes normales

Dans le cadre des systèmes quasi-intégrables, le théorème KAM nous dit que, si la perturbation qui brise l'intégrabilité du système est suffisamment faible, une fraction des tores invariants de fréquences incommensurables[1], appelés tores KAM, survit. Les autres tores sont détruits et forment une structure caractéristique appelée résonances[2] de POINCARÉ-BIRKHOFF [11]. Ces résonances ont une structure fractale qui, lorsque la perturbation augmente, conduit à l'apparition de régions chaotiques. Du point de vue de la quantification des énergies du système, la coexistence de ces régions se traduit dans le spectre quantique par une partie régulière, associée aux tores invariants, et par une partie irrégulière principalement liée aux régions chaotiques [79]. Les tores KAM, à l'instar des tores intégrables, peuvent servir de support au développement des méthodes semiclassiques, ce qui permet de reproduire la partie régulière du spectre ; cependant on ne peut pas appliquer

[1]Ici, l'adjectif « incommensurable » se rapporte à la irrationnalité du rapport entre les fréquences des trajectoires vivant sur ces tores et la fréquence de la perturbation.

[2]Ces tores résonants satisfont une condition du type (2.22).

ces méthodes au-delà des régions régulières. Pour tenter de décrire ces différentes parties du spectre, en particulier la partie irrégulière, des méthodes d'approximations intégrables ont été mises au point [66]. Ces approches ne sont que partiellement efficaces en ce qui concerne la partie irrégulière du spectre [92]. Parmi elles, nous proposons de présenter brièvement comment construire les formes normales de Birkhoff-Gustavson [41] [11] autour d'un point d'équilibre de la dynamique du système

$$\left.\frac{\partial H}{\partial p}\right|_{(p,q)=(0,0)} = 0, \tag{2.15}$$

$$\left.\frac{\partial H}{\partial q}\right|_{(p,q)=(0,0)} = 0 \tag{2.16}$$

(on peut se ramener à un point fixe centré en $(p,q) = (0,0)$ sans perte de généralité). Nous allons principalement suivre la démarche proposée dans [77] et [65]. Supposons ce hamiltonien à une dimension et $2\pi-$périodique en temps $H = H(p,q,t)$ (notons qu'ici nous ne supposons pas l'intégrabilité du système). Dans le cas d'un point d'équilibre stable, on peut toujours développer en série de Fourier-Taylor le hamiltonien

$$H(z,\bar{z},t) = \mathrm{i}\omega z\bar{z} + \sum_{\alpha+\beta=k}^{\infty}\sum_{l=-\infty}^{\infty} 2\mathrm{i}H_{\alpha\beta l} z^{\alpha}\bar{z}^{\beta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}lt}, \qquad k > 2 \text{ et } (\alpha,\beta) \in \mathbb{N}^2, \tag{2.17}$$

où les coordonnées réelles (p,q) ont été remplacées par les coordonnées complexes indépendantes $(z,\bar{z})$ grâce à la transformation

$$z = p + \mathrm{i}q, \qquad \bar{z} = p - \mathrm{i}q. \tag{2.18}$$

Afin d'être sûr que le hamiltonien $H(z,\bar{z},t)$ reste purement imaginaire (ou de manière équivalente $H(p,q,t)$ réel) pour n'importe quel couple (p,q) réel, on impose $H^*_{\alpha\beta l} = H_{\beta\alpha(-l)}$. Ici, k désigne le plus petit entier tel qu'il existe au moins un l tel que $H_{\alpha\beta l} \neq 0$. L'objectif est maintenant de simplifier l'expression (2.17) à l'aide d'une transformation symplectique (canonique) $(z,\bar{z}) \mapsto (Z,\bar{Z})$

$$z = \partial S/\partial\bar{z}, \quad \bar{Z} = \partial S/\partial Z, \quad H(Z,\bar{Z},t) = H(z,\bar{z},t) + \partial S/\partial t, \tag{2.19}$$

ayant pour fonction génératrice un polynôme d'ordre k

$$S(Z,\bar{z},t) = Z\bar{z} + \sum_{\alpha+\beta=k}\sum_{l=-\infty}^{\infty} S_{\alpha\beta l} Z^{\alpha}\bar{z}^{\beta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}lt}. \tag{2.20}$$

Les relations (2.19) peuvent être inversées à l'ordre k afin d'obtenir

$$H(Z,\bar{Z},t) = \mathrm{i}\omega Z\bar{Z} + \sum_{\alpha+\beta=k}\sum_{l}\left[2\mathrm{i}H_{\alpha\beta l} + \mathrm{i}(\omega(\beta-\alpha)+l)S_{\alpha\beta l}\right] Z^{\alpha}\bar{Z}^{\beta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}lt} + O_{Z,\bar{Z}}(k+1). \tag{2.21}$$

L'idée est d'annuler un maximum de termes situé entre chaque crochet de l'équation précédente et de réécrire le hamiltonien sous la forme d'une série en puissance de hamiltoniens quadratiques en éliminant tous les termes d'ordre k non résonants, c'est-à-dire tous les termes (α,β,l) qui ne vérifient pas la condition

$$\omega(\beta-\alpha) + l = 0. \tag{2.22}$$

Pour cela, Il suffit de choisir

$$\begin{cases} S_{\alpha\beta l} = \frac{2H_{\alpha\beta l}}{\omega(\beta-\alpha)+l} & \text{dans le cas non résonant,} \\ S_{\alpha\beta l} = 0 & \text{dans le cas résonant.} \end{cases} \tag{2.23}$$

La procédure peut être répétée ordre par ordre. On remarque d'ailleurs que la fonction génératrice $S(Z, \bar{z}, t)$ est construite de sorte qu'elle ne modifie pas les termes d'ordre inférieur à k dans le hamiltonien.

Dans le cas où $\omega = m/n$ est rationnel ($m \neq 0$ et $n > 2$ sont des entiers naturels premiers entre eux), la relation de résonance (2.22) devient $m(\alpha - \beta) = -nl$. On peut alors se débarrasser de la dépendance temporelle et du terme quadratique devant la somme dans (2.21) à l'aide d'une nouvelle transformation canonique $(Z, \bar{Z}) \mapsto (Z', \bar{Z}')$

$$Z = \partial S'/\partial Z', \quad \bar{Z}' = \partial S'/\partial \bar{Z}, \quad H(Z', \bar{Z}', t) = H(Z, \bar{Z}, t) + \partial S'/\partial t, \tag{2.24}$$

avec comme fonction génératrice

$$S'(Z', \bar{Z}) = Z'\bar{Z}\mathrm{e}^{i\omega t}. \tag{2.25}$$

Les nouvelles coordonnées sont alors associées à un repère tournant à la fréquence ω attaché à la dynamique [65]. Il reste finalement une forme normale d'ordre n avec uniquement les termes « diagonaux » ($\alpha = \beta$) construits ordre par ordre plus les termes résonants « non diagonaux » de plus petit degrés ($\alpha = n, \beta = 0, l = m$) et ($\alpha = 0, \beta = n, l = -m$)

$$H(Z', \bar{Z}', t) = \sum_{k=2}^{n/2} 2\mathrm{i}H_{kkl}(Z'\bar{Z}')^k + 2\mathrm{i}H_{n0m}(Z')^n + 2\mathrm{i}H^*_{n0m}(\bar{Z}')^n + O_{Z',\bar{Z}'}(n+1). \tag{2.26}$$

Le hamiltonien peut être réécrit dans les coordonnées initiales (p, q)

$$H(p, q, t) = \sum_{k=2}^{n/2} H_{kkl}(p^2 + q^2)^k + |H_{n0m}|\Re[(p + \mathrm{i}q)^n] + O_{p,q}(n+1) \tag{2.27}$$

ou bien encore dans les coordonnées actions-angles $I = (p^2 + q^2)/2$ et $\theta = \arctan(q/p)$

$$H(I, \theta, t) = \sum_{k=2}^{n/2} 2^k H_{kkl} I^k + 2^{n/2}|H_{n0m}|I^{n/2}\cos(n\theta) + O_{\sqrt{I}}(n+1). \tag{2.28}$$

On peut généraliser ces deux dernières expressions en supposant que le hamiltonien original dépend d'un paramètre réel ϵ tel que $\omega'(\epsilon = 0) = \omega$. Pour de petites valeurs de ϵ, le point fixe de $H(p, q, t, \epsilon = 0)$ restera un point fixe de $H(p, q, t, \epsilon)$. Dans ce cas, la démarche précédente est reconduite et en choisissant $\omega'(\epsilon) - \omega = \epsilon$, on obtient alors la forme

$$H(p, q, t, \epsilon) = \frac{\epsilon}{2}(p^2+q^2) + \sum_{k=2}^{n/2} H_{kkl}(\epsilon)(p^2 + q^2)^k + |H_{n0m}(\epsilon)|\Re[(p + \mathrm{i}q)^n] + O_{p,q}(n+1) \tag{2.29}$$

ou encore dans les coordonnées actions-angles

$$H(I, \theta, t, \epsilon) = \epsilon I + \sum_{k=2}^{n/2} 2^k H_{kkl}(\epsilon) I^k + 2^{n/2}|H_{n0m}(\epsilon)|I^{n/2}\cos(n\theta) + O_{\sqrt{I}}(n+1). \tag{2.30}$$

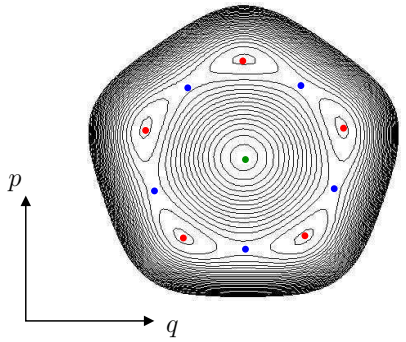


FIG. 2.3: On illustre, par un exemple, le flot hamiltonien autour d'un point fixe stable (point vert). La forme normale utilisée est $H = (p^2+q^2)/2 - 0.55(p^2+q^2)^2 + 0.05\Re[(p+\mathrm{i}q)^5]$. Les points rouges représentent les points fixes stables de la dynamique (k pair) et les points bleus indiquent les points instables (k impair). Les points fixes sont obtenus par (2.32) de manière exacte puisque nous n'avons pas à négliger les ordres supérieurs d'après le hamiltonien choisi. L'ordre n de la forme normale définit le nombre de petits îlots que contient la chaîne qui entoure le point fixe central (ici $n = 5$).

La géométrie de ces formes normales est ici intéressante puisqu'il est possible de créer des chaînes de tores autour du point fixe considéré à l'aide du terme résonant (qui dépend de θ). En effet, les points fixes du hamiltonien (2.30) sont donnés à partir des équations

$$\begin{cases} 2^{n/2} n |H_{n0m}(\epsilon)| I^{n/2} \sin(n\theta) + O_{\sqrt{I},\sqrt{|\epsilon|}}(n+1) = 0, \\ \epsilon + \displaystyle\sum_{k=2}^{n/2} 2^k k H_{kkl}(\epsilon) I^{k-1} + 2^{n/2} \frac{n}{2} |H_{n0m}(\epsilon)| I^{n/2-1} \cos(n\theta) + O_{\sqrt{I},\sqrt{|\epsilon|}}(n) = 0. \end{cases} \tag{2.31}$$

Au premier ordre, on trouve $2n$ points fixes, autres que l'origine, dont les points de coordonnées sont

$$\rho_k = \begin{pmatrix} I = -\epsilon/(8H_{22l}) \\ \theta_k = k\pi/n \end{pmatrix}, \text{ où } k \in \{0, \ldots, 2n-1\} \text{ et } H_{22l} \stackrel{\text{def}}{=} H_{22l}(\epsilon = 0). \tag{2.32}$$

En supposant que $\epsilon/H_{22l} < 0$, les $2n$ nouveaux points fixes sont maintenant réels. Le point fixe à l'origine est, dans ce cas, entouré de n points fixes stables et n instables (figure (2.3)).

Les termes résonants apparaissent comme un obstacle à la linéarisation des systèmes d'équations différentielles. Lorsque ω n'est pas rationnel, on pourrait penser que la procédure peut être étendue à l'ordre souhaité. Il s'avère cependant que même dans ce cas, il est malgré tout toujours possible de construire une approximation rationnelle de ω telle que la condition de résonance (2.22) soit « presque » vérifiée. On retrouve alors le problème bien connu des petits dénominateurs qui apparaît dans les théories perturbatives. La procédure de normalisation lorsque $n \to \infty$ n'a alors aucune raison de converger. Le cas d'un point fixe instable peut être traité de manière similaire à la différence que la convergence des transformations successives peut être prouvée localement [74].

L'objectif de cette section est double. Premièrement, on a obtenu une classe de hamiltoniens intégrables exprimés sous forme de polynômes qui permettent de simuler localement un ilôt stable entouré de chaînes de résonance. Du point de vue de l'espace des phases, nous verrons par la suite que nous pouvons générer ainsi, dans le cadre de l'effet tunnel résonant dans les systèmes intégrables, deux tores symétriques séparés par des chaînes de résonance de façon plus sophistiquée que le triple puits présenté dans le chapitre suivant. Enfin, les formes normales présentées seront également utiles afin de justifier la dépendance en action I des coefficients de couplage mis en jeu dans le cadre de la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances [16] [67] [56].

2.3 Temps complexe et équations d'Hamilton

L'approche semiclassique permet de retrouver les résultats de la physique quantique à l'aide des trajectoires classiques du système étudié. Il s'avère cependant que ces trajectoires ne sont pas toujours exclusivement réelles et il devient également nécessaire de retenir la contribution de trajectoires qui sont solutions des équations d'Hamilton complexes [6]. En particulier, ces trajectoires apparaissent naturellement dans l'étude des processus classiquement interdits comme l'exemple des oscillations de Rabi dans le double puits traité dans le premier chapitre. En effet, dans une région classiquement interdite ($E < V(q)$), on a vu, par exemple, que l'impulsion classique devient purement imaginaire. Plus généralement, afin de décrire la transmission tunnel d'une particule, partant du point q_i et traversant une barrière d'énergie pour atteindre q_f, avec une énergie E inférieure à la hauteur de cette barrière, on peut utiliser la fonction de Green $\tilde{G}(q_i, q_f, E)$ qui requiert de prendre en compte certaines trajectoires classiques complexes dans l'espace des phases en utilisant un temps complexe [34] [73]. Une façon généralement admise de comprendre ce temps complexe est de voir la fonction de Green comme la transformée de Fourier du propagateur quantique en temps $G(q_i, q_f, t)$

$$\tilde{G}(q_i, q_f, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{+\infty} G(q_i, q_f, t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar} \mathrm{d}t, \tag{2.33}$$

et d'observer qu'en appliquant la méthode de la phase stationnaire, les points critiques donnant une contribution dominante à l'intégrale (2.33) correspondent à des temps complexes. Nous reviendrons, dans la section suivante, sur le calcul semiclassique des propagateurs quantiques en temps qui constituent un point clé de la méthode générale proposée dans la seconde partie de cette thèse pour calculer la largeur d'un doublet tunnel arbitraire.

Il existe différentes façons de complexifier un hamiltonien [52]. D'après les remarques précédentes, nous choisirons de paramétrer de manière générale le temps d'évolution du système avec un paramètre s réel tel que $s \mapsto t(s)$ suivant un chemin dans le plan complexe. Les équations d'Hamilton (2.1) et (2.2) deviennent alors

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}, \tag{2.34}$$

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}. \tag{2.35}$$

où $(p(s), q(s))$ et $H = H(p(s), q(s))$ apparaissent maintenant comme des fonctions complexes. La dynamique classique est maintenant décrite en termes de coordonnées conjuguées canoniques complexes. Dans le cas où le hamiltonien $H(p, q)$ est analytique en (p, q), ce que nous supposerons vrai tout au long de cette thèse (excluant ainsi le cas important des billards), il est alors possible de décomposer les équations du mouvement (2.34) et (2.35) suivant leurs parties réelles et imaginaires. Nous choisirons de décomposer les variables conjuguées (p, q) comme

$$p(s) \stackrel{\text{def}}{=} \operatorname{Re} p(s) + \mathrm{i} \operatorname{Im} p(s) = p_1(s) + \mathrm{i} p_2(s), \tag{2.36}$$

$$q(s) \stackrel{\text{def}}{=} \operatorname{Re} q(s) + \mathrm{i} \operatorname{Im} q(s) = q_1(s) + \mathrm{i} q_2(s). \tag{2.37}$$

D'autres complexifications de l'espace des phases sont possibles [53] comme $p = p_1 + \mathrm{i} q_2$ et $q = q_1 + \mathrm{i} p_2$ qui est, par exemple, utilisée dans l'étude de l'évolution d'états cohérents dans un espace des phases complexes [101] [102]. À l'aide des relations de Cauchy-Riemann

$$\operatorname{Re}\left(\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}z}\right) = \frac{\partial(\operatorname{Re} g)}{\partial(\operatorname{Re} z)} = \frac{\partial(\operatorname{Im} g)}{\partial(\operatorname{Im} z)}, \tag{2.38}$$

$$\operatorname{Im}\left(\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}z}\right) = \frac{\partial(\operatorname{Im} g)}{\partial(\operatorname{Re} z)} = -\frac{\partial(\operatorname{Re} g)}{\partial(\operatorname{Im} z)}, \tag{2.39}$$

valable pour toute fonction $g(z)$ analytique, on obtient explicitement les relations entre les parties réelles et imaginaires

$$\frac{\mathrm{d}(\operatorname{Re} q)}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial}{\partial(\operatorname{Re} p)}\left[\operatorname{Re}\left(H\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}\right)\right], \tag{2.40}$$

$$\frac{\mathrm{d}(\operatorname{Im} q)}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial}{\partial(-\operatorname{Im} p)}\left[\operatorname{Re}\left(H\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}\right)\right], \tag{2.41}$$

$$\frac{\mathrm{d}(\operatorname{Re} p)}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial}{\partial(\operatorname{Re} q)}\left[\operatorname{Re}\left(H\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}\right)\right], \tag{2.42}$$

$$\frac{\mathrm{d}(-\operatorname{Im} p)}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial}{\partial(\operatorname{Im} q)}\left[\operatorname{Re}\left(H\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}\right)\right]. \tag{2.43}$$

La nouvelle dynamique est complètement équivalente à une dynamique décrite par le hamiltonien $H_1(p_1, p_2, q_1, q_2, s) \stackrel{\text{def}}{=} \operatorname{Re}(H\mathrm{d}t/\mathrm{d}s)$ possédant deux fois plus de degrés de liberté que celle du hamiltonien réel. Les nouvelles variables sont $(\operatorname{Re} q, \operatorname{Im} q)$ et leurs moments conjugués $(\operatorname{Re} p, -\operatorname{Im} p)$. On aurait également pu choisir la partie imaginaire du hamiltonien $H_2(p_1, p_2, q_1, q_2, s) \stackrel{\text{def}}{=} \operatorname{Im}(H\mathrm{d}t/\mathrm{d}s)$ dont la dynamique est équivalente à H_1 (bien que la transformation qui permet de passer de H_1 à H_2 ne soit pas canonique). H_1 et H_2 ne sont cependant pas autonomes par rapport au nouveau paramètre d'évolution s lorsque $\mathrm{d}t/\mathrm{d}s$ varie avec s. Par exemple

$$\frac{\mathrm{d}H_1}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial H_1}{\partial p_1}\frac{\mathrm{d}p_1}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial H_1}{\partial p_2}\frac{\mathrm{d}p_2}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial H_1}{\partial q_1}\frac{\mathrm{d}q_1}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial H_1}{\partial q_2}\frac{\mathrm{d}q_2}{\mathrm{d}s} + \frac{\partial H_1}{\partial s}, \tag{2.44}$$

$$\stackrel{(2.40)-(2.43)}{=} -\underbrace{\{H_1, H_2\}}_{\stackrel{(2.38),(2.39)}{=} 0} + \frac{\partial H_1}{\partial s}. \tag{2.45}$$

Le fait que le crochet de Poisson $\{\cdot,\cdot\}$ soit nul indique que H_1 et H_2 sont en involution. La définition que nous avons donnée de l'intégrabilité dans la section (2.1), nous assure alors que le nouveau hamiltonien complexe reste intégrable. Ceci est une bonne nouvelle puisque la description semiclassique de l'effet tunnel requiert l'étude des trajectoires complexes. En effet, l'interprétation du phénomène ne peut pas être expliquée uniquement à l'aide des trajectoires réelles. Maitra et Heller ont d'ailleurs montré que le calcul semiclassique des propagateurs quantiques en temps nécessite d'inclure des trajectoires classiquement interdites et que, pour des temps suffisamment longs, celles-ci dominent les trajectoires classiques autorisées [69]. De plus, pour des systèmes intégrables, le calcul semiclassique de la largeur des doublets entre deux états localisés sur des tores symétriques est basé sur la connexion régulière de ces tores prolongés analytiquement dans le plan complexe [24] [25]. De manière générale, les trajectoires complexes possèdent une topologie difficile à comprendre, ce qui rend les calculs laborieux. Nous proposerons par la suite d'adapter le temps complexe afin de simplifier la géométrie de ces trajectoires et d'appréhender plus facilement les orbites dominantes dans le calcul des propagateurs quantiques. La figure (2.4) illustre la projection d'un ensemble de trajectoires complexes dans l'espace $3D$ $(\mathrm{Re}\,p, \mathrm{Re}\,q, \mathrm{Im}\,p)$, formant une variété lagrangienne, partant d'un tore réel d'énergie E et connectant son symétrique.

2.4 Propagateurs quantiques et intégrales de chemin

Nous avons brièvement justifié dans la section précédente le recours à la complexification du temps (et de l'espace des phases) par le fait que la description de la transmission tunnel à une énergie inférieure à la hauteur d'une barrière d'énergie nécessite de prendre en compte des trajectoires classiques avec un temps complexe lorsque l'on calcule la fonction de Green (2.33) comme la transformée de Fourier du propagateur quantique en temps $G(q_f, q_i, T)$. Alors que l'étude de la fonction de Green est plutôt bien adaptée pour les processus de diffusion [49] [18], dans le cas des systèmes bornés, il est nécessaire d'extraire les signatures spectrales de l'effet tunnel des pôles de la trace de la fonction de Green [45] [63] [98]

$$\mathrm{tr}\,\tilde{G}(E) = \sum_n \frac{1}{E - E_n} \tag{2.46}$$

où les E_n correspondent aux énergies propres du système et la somme s'effectue sur tous les états propres. Ces signatures caractéristiques de l'effet tunnel correspondent à la présence de niveaux quasi-dégénérés (doublets) dans le spectre. La procédure pour obtenir la largeur du doublet tunnel en termes d'ingrédients classiques n'est donc pas directe puisqu'il faut évaluer les contributions semiclassiques de la trace puis en extraire les pôles [78]. L'approche développée dans cette thèse va consister à utiliser la trace du produit de plusieurs opérateurs dont l'opérateur d'évolution avec la possibilité de travailler avec un temps complexe et non purement imaginaire, contrairement à l'approche par les instantons [22], pour permettre de calculer directement la largeur d'un doublet tunnel arbitraire. Cette section à pour but de présenter le développement semiclassique de certaines expressions qui seront utilisées dans le cadre de cette méthode.

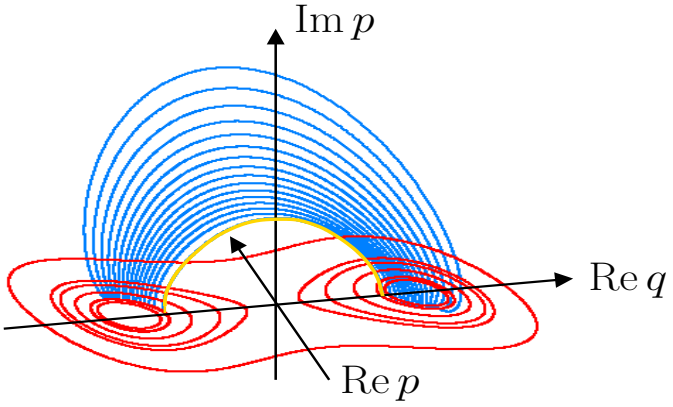


FIG. 2.4: On présente ici l'espace des phases complexes pour le double puits défini par le hamiltonien $H = p^2/2 + V(q)$ avec $V(q) = -q^2/2 + q^4/4$. L'espace des phases possède 4 dimensions et nous choisissons de nous restreindre à l'espace $3D$ $(\mathrm{Re}\, p, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, p)$ pour projeter les trajectoires complexes reliant deux tores réels symétriques d'énergie E (ici $E = -0.2$). Les lignes rouges sont dans le plan $(\mathrm{Re}\, p, \mathrm{Re}\, q)$ et correspondent à des trajectoires réelles calculées avec $t(s) = s$ réel. Les équations d'HAMILTON (2.41) et (2.43) sont alors identiquement nulles et on retrouve les équations d'HAMILTON usuelles (2.1) et (2.2). La transformation du temps est triviale et on retrouve simplement le portrait de phases habituel du double puits. Les trajectoires bleues sont les solutions des équations classiques du mouvement lorsque l'on opère une transformation du temps $t(s) = -\mathrm{i}s$. Dans ce cas, les quatre équations d'HAMILTON complexes sont nécessaires pour décrire la dynamique. On peut noter le cas particulier décrit par la courbe jaune qui correspond à la condition initiale $(\mathrm{Re}\, p = 0, \mathrm{Re}\, q = q(E))$ sur le tore réel. Cette trajectoire n'évolue que dans le plan $(\mathrm{Im}\, p, \mathrm{Re}\, q)$ et est appelée « trajectoire instanton ». Elle est équivalente à une trajectoire réelle évoluant dans le potentiel inversé $-V(q)$. La première section du chapitre 4 présente plus en détails sur cette trajectoire et son utilité.

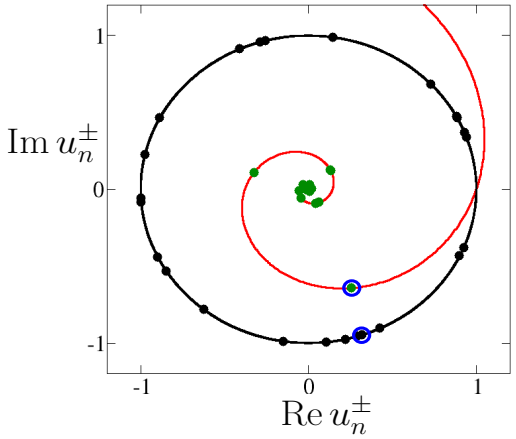


FIG. 2.5: On représente dans le plan complexe les quinze premières valeurs propres $u_n^{\pm}$ de l'opérateur d'évolution pour le double puits (1.24) avec les paramètres de la figure (1.4) et $\hbar = 0.01$. Les valeurs propres (points noirs) sont réparties sur le cercle unité (en noir) lorsque $T = |T|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}$ est réel ($|T| = 2$ et $\theta = 0$). En revanche, si l'on effectue une rotation du temps, d'un angle θ, dans le plan complexe ($|T| = 2$ et $\theta = 0.3$), les valeurs propres (points verts) sont disposées sur une spirale logarithmique (rouge) d'équation $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}sT/\hbar}$ où s est un paramètre réel. Dans ce cas, les valeurs propres les plus éloignées du centre de la spirale correspondent aux énergies les plus basses. Les cercles bleus indiquent la position du doublet fondamental dont la largeur est ici trop petite pour pouvoir distinguer les deux niveaux.

On définit l'opérateur d'évolution comme

$$\hat{U}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar} \tag{2.47}$$

Les états propres de $\hat{U}(T)$ sont les mêmes que ceux du hamiltonien. Par conséquent, les symétries du hamiltonien sont aussi celles de $\hat{U}(T)$. Si le hamiltonien est invariant sous un opérateur de symétrie $\hat{S}$ tel que $H(-p,-q) = H(p,q)$, ce qui sera vrai pour tous les systèmes que l'on considérera par la suite, alors on sait qu'il existe une base commune qui codiagonalise $\hat{S}$, $\hat{H}$ et $\hat{U}(T)$. Dans cette base, les énergies propres $E_n^{\pm}$ sont classées selon la parité ($\pm$) des fonctions propres associées $|\psi_n^{\pm}\rangle$, et l'on a en particulier

$$\hat{S}|\psi_n^{\pm}\rangle = \pm|\psi_n^{\pm}\rangle, \qquad \hat{S}^2 = 1. \tag{2.48}$$

On pourra faire de même avec les valeurs propres $u_n^{\pm}$ de l'opérateur d'évolution

$$\hat{U}(T)|\psi_n^{\pm}\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{\pm}T/\hbar}|\psi_n^{\pm}\rangle \stackrel{\text{def}}{=} u_n^{\pm}|\psi_n^{\pm}\rangle \tag{2.49}$$

où n est un entier naturel qui ordonne les énergies propres. Tant que le temps T est réel, l'opérateur d'évolution est unitaire et ses valeurs propres se répartissent sur le cercle unité mais lorsque le temps devient complexe, l'opérateur n'est plus unitaire et ses valeurs propres s'ordonnent le long d'une spirale logarithmique [75] comme présenté sur la figure (2.5).

L'amplitude de probabilité qu'un état initial, disons $|q_i\rangle$, évolue dans un état final, disons $|q_f\rangle$, en un temps complexe T fixé est donné par le propagateur quantique en temps

$$G(q_f, q_i, T) \stackrel{\text{def}}{=} \langle q_f|\hat{U}(T)|q_i\rangle = \langle q_f|(\hat{U}(T/N))^N|q_i\rangle \tag{2.50}$$

où N est un entier naturel qui permet de découper en N intervalles le chemin du temps partant de $t_i = 0$ et allant à $t_f = T$. Nous choisissons de travailler dans la représentation des positions $|q\rangle$ mais les formules présentées peuvent également être démontrées dans l'espace des impulsions $|p\rangle$. En injectant $2N$ relations de fermeture $\int \mathrm{d}p|p\rangle\langle p|$ et $\int \mathrm{d}q|q\rangle\langle q|$ entre chaque opérateur $\hat{U}(T/N)$ et en notant le produit scalaire (à une dimension)

$$\langle p|q\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq/\hbar}, \tag{2.51}$$

le propagateur se réécrit sous une forme discrétisée

$$G(q_f, q_i, T) = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S(p_1,q_1,\ldots,p_N,q_N)} \frac{\mathrm{d}p_1\mathrm{d}q_1 \ldots \mathrm{d}p_N\mathrm{d}q_N}{(2\pi\hbar)^N} \tag{2.52}$$

où $S(p_1, q_1, \ldots, p_N, q_N)$ est l'action discrète définie comme

$$S(p_1, q_1, \ldots, p_N, q_N) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{n=1}^{N} \left(p_n(q_n - q_{n-1}) - \left(\frac{T}{N}\right) H(p_n, q_{n-1}) \right) \tag{2.53}$$

avec $q_N = q_f$ et $q_0 = q_i$. Formellement, le passage à la limite continue $(T/N) \to 0$ permet d'obtenir le propagateur (2.50) sous la forme d'une intégrale de chemin dans l'espace des phases

$$G(q_f, q_i, T) \stackrel{(T/N)\to 0}{=} \int_{\mathcal{P}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S(p,q,t)} \mathcal{D}q\mathcal{D}p \tag{2.54}$$

où l'action continue correspond à la fonctionnelle

$$S(p, q, t) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{s_i}^{s_f} \left(p(s)\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s}(s) - \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}(s)H(p(s), q(s)) \right) \mathrm{d}s. \tag{2.55}$$

L'intégrale de chemin (2.54) est définie sur le sous-ensemble $\mathcal{P}$ de tous les chemins possibles de l'espace des phases (complexes) partant de q_i et allant à q_f en un temps T avec la mesure formelle $\mathcal{D}p\mathcal{D}q$. Le chemin continu du temps complexe $s \mapsto t(s)$, paramétré par la variable réelle s, est donné avec ses extrémités fixées $t(s_i) = t_i = 0$ et $t(s_f) = t_f = T$. McLaughlin a montré [70] que le découpage de T en petits intervalles de module d'ordre $(|T|/N)$ dans l'expression (2.52) est arbitraire et que, par conséquent, l'intégrale de chemin (2.54) est indépendante du chemin complexe du temps $t(s)$ choisi. Cependant, ceci est vrai uniquement lorsque la partie imaginaire du chemin du temps $\operatorname{Im} t(s)$ est non croissante quand s varie de s_i jusqu'à s_f. Cette condition est nécessaire afin de s'assurer que le propagateur reste bien défini. En effet, une variation positive de $\operatorname{Im} t(s)$, rendrait l'opérateur d'évolution intermédiaire $\hat{U}(T/N)$ non-borné. Par la suite, ces chemins temporels valables seront notés $[t]$. Nous verrons que cette notion d'indépendance de contour va s'avérer être un point crucial dans la façon de sélectionner les trajectoires classiques complexes qui contribuent à l'effet tunnel.

On peut approcher la résolution de ce type d'intégrales de chemin (2.54) dans la limite semiclassique $\hbar \to 0$. La méthode du col permet d'extraire les contributions à l'intégrale et celles-ci correspondent aux chemins de $\mathcal{P}$ qui extrémisent l'action (2.55), c'est-à-dire des chemins dans l'espace des phases qui sont solutions des équations complexes classiques d'Hamilton (2.34) et (2.35) avec les conditions aux bords $q(s_i) = q_i$ et $q(s_f) = q_f$ pour un chemin du temps $[t]$ donné tel que $t(s_i) = 0$ et $t(s_f) = T$. En retenant les contributions dominantes, on aboutit au prolongement analytique de l'approximation de Van Vleck habituelle à un degré de liberté [97] [80]

$$G(q_f, q_i, T) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \sum_{\mathfrak{o}} (-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} \sqrt{\left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}\right)} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}}. \tag{2.56}$$

La somme s'effectue alors sur des trajectoires $\mathfrak{o}$ de l'espace des phases qui sont solutions des équations d'Hamilton complexes avec les conditions aux bords décrites précédemment. L'action $S_{\mathfrak{o}} = S_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i, T)$, définie par l'équation (2.55), est calculée le long de ces trajectoires. L'exposant $\kappa_{\mathfrak{o}}$ est défini selon le choix du feuillet de Riemann sur lequel est évalué la racine carrée et permet également de compter le nombre de fois où l'approximation semiclassique (2.56) n'est plus valable le long de la trajectoire $\mathfrak{o}$. L'indépendance de contour de l'intégrale de chemin nous assure que tant que l'on ne traverse pas de bifurcations (points de rebroussement) des trajectoires classiques lorsque l'on déforme continûment le chemin du temps $[t]$, le nombre de trajectoires $\mathfrak{o}$ qui contribuent à l'intégrale, l'exposant $\kappa_{\mathfrak{o}}$ et l'action complexe $S_{\mathfrak{o}}$ restent invariants.

Dans le même esprit que le calcul usuel de la trace de la fonction de Green (2.46), nous allons maintenant traiter la trace du produit d'opérateurs $\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{U}(T)$ avec $\hat{A} = \hat{S}$ ou 1. Formellement, cette expression peut s'écrire à l'aide de la base continue des positions $\{|q\rangle\}$

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{U}(T) &= \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q' \langle q|\hat{A}|q'\rangle\langle q'|\hat{U}(T)|q\rangle, && (2.57)\\
&= \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q' \delta(q - \eta q') G(q', q, T), && (2.58)\\
&= \int G(\eta q, q, T)\mathrm{d}q && (2.59)
\end{aligned}$$

où $\eta = +1$ si $\hat{A} = 1$ et $\eta = -1$ si $\hat{A} = \hat{S}$. Il faut alors évaluer l'intégrale de chaque trajectoire $\mathfrak{o}$ qui contribue au propagateur $G(\eta q, q, T)$ et la contribution d'une telle trajectoire s'écrit

$$\int \mathrm{d}q (-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} \sqrt{\left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar}\left.\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}\right|_{(\eta q, q, T)}\right)} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}(\eta q, q, T)} \tag{2.60}$$

La méthode du col nous indique que les contributions à l'expression (2.60) sont les points critiques q_c de l'action $S_{\mathfrak{o}}(\eta q, q, T)$ qui doivent satisfaire la condition

$$\frac{\partial S_{\mathfrak{o}}}{\partial q} = \frac{\partial S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_f}\frac{\partial q_f}{\partial q} + \frac{\partial S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i}\frac{\partial q_i}{\partial q} = (p_f)\frac{\partial q_f}{\partial q} + (-p_i)\frac{\partial q_i}{\partial q} = \eta p_f - p_i = 0 \tag{2.61}$$

où on a utilisé les conditions $(q_i = q)$, $(q_f = \eta q)$ et également les propriétés des fonctions génératrices des transformations canoniques

$$p(s_f) = p_f = \frac{\partial S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_f}(q_f, q_i, T), \tag{2.62}$$

$$p(s_i) = p_i = -\frac{\partial S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i}(q_f, q_i, T). \tag{2.63}$$

Il apparaît alors que les trajectoires qui vont contribuer à la trace $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{U}(T)$ sont des orbites demi-périodiques ($\eta = -1$), plus précisément des trajectoires correspondant à la moitié d'orbites périodiques de période $2T$, puisqu'elles respectent la condition $(p_i, q_i) = (-p_f, -q_f)$. En revanche, les trajectoires qui donneront une contribution dominante à l'expression $\operatorname{tr} \hat{U}(T)$ sont des orbites périodiques ($\eta = +1$) de période T qui vérifient la condition $(p_i, q_i) = (p_f, q_f)$.

Il faut distinguer deux types de contributions : celles provenant de trajectoires $\mathfrak{e}$ de longueur nulle, qui correspondent à des points d'équilibre, et les trajectoires périodiques $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle. Pour un système à un degré de liberté, la contribution d'un point fixe dans (2.60) est

$$(-1)^{\mu_{\mathfrak{e}}} \frac{\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)H(p_{\mathfrak{e}}, q_{\mathfrak{e}})T}}{\mathrm{e}^{\lambda_{\mathfrak{e}} T/2} - \eta \mathrm{e}^{-\lambda_{\mathfrak{e}} T/2}} \tag{2.64}$$

où la définition de $\mu_{\mathfrak{e}}$ dépend encore une fois de la façon dont sont calculées les racines carrés et $\pm\lambda_{\mathfrak{e}}$ correspondent aux exposants de Lyapunov associés au point d'équilibre $(p_{\mathfrak{e}}, q_{\mathfrak{e}})$ que l'on considère. La contribution d'une trajectoire $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle à l'expression (2.60) donne

$$(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{\sum_\beta T_\beta}{\sqrt{-2\eta \mathrm{i}\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\mathrm{d}E_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}T}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}}. \tag{2.65}$$

L'exposant $\mu_{\mathfrak{o}}$ va compter principalement le nombre de points de rebroussement traversés par l'orbite $\mathfrak{o}$. La somme discrète sur β correspond au temps (complexe) de parcours de l'orbite $\mathfrak{o}$, soit $\sum_\beta T_\beta = T_{\mathfrak{o}}$. Ce temps $T_{\mathfrak{o}}$ correspond dans le cas d'une trajectoire périodique ($\eta = +1$) à la période de l'orbite $\mathfrak{o}$ et dans le cas d'une trajectoire $\mathfrak{o}$ qui est la moitié d'une orbite périodique ($\eta = -1$), à la moitié de la période (complexe) de l'orbite complète. Chaque terme T_β correspond au temps passé sur chaque branche β (portion de trajectoire entre deux points de rebroussement) qui compose l'orbite $\mathfrak{o}$. La démonstration des deux expressions (2.64) et (2.65) est donnée dans l'annexe A. Il est important de noter l'ordre dans lequel nous avons effectué les passages à la limite $\hbar \to 0$ et $(T/N) \to 0$. Nous avons d'abord choisi de faire tendre vers 0 les intervalles de temps T/N de l'intégrale de chemin afin d'obtenir La limite du temps continu puis nous avons appliqué la méthode du col sur l'intégrale oscillante, justifiée par l'approximation semiclassique. Cette limite nous permet d'obtenir des trajectoires continues dans l'espace des phases. En revanche, choisir l'autre limite ($\lim\limits_{(T/N)\to 0} \lim\limits_{\hbar \to 0}$) revient à étudier une dynamique discrétisée gouvernée par des équations d'Hamilton discrètes comme le cas de systèmes pulsés. Dans ce cas, les contributions aux traces (2.59) dépendent explicitement du paramètre de contrôle T/N du système. Les développements présentés dans l'annexe A montrent que les contributions (2.64) et (2.65) sont pratiques dans le sens où elles sont écrites à l'aide de quantités purement géométriques

(T_β, $E_{\mathfrak{o}}$, $S_{\mathfrak{o}}$) et donc indépendantes du choix de coordonnées et de la base sur laquelle sont évaluées les traces. Elles présentent également l'avantage d'être valables même lorsque le hamiltonien n'est pas de la forme $H = p^2 + V(q)$.

Chapitre 3

Résonances quantiques

Ce chapitre est motivé par l'observation numérique de nombreuses fluctuations de plusieurs ordres de grandeurs de l'effet tunnel dans le cadre de systèmes mixtes [96] [16]. L'objectif est de créer un système intégrable simple dans lequel ces résonances sont observables (ces fluctuations n'étant alors pas une signature caractéristique des systèmes chaotiques). Nous présenterons alors un mécanisme de création de ces résonances ainsi qu'une étude semiclassique à l'aide des outils développés dans le premier chapitre.

3.1 Un exemple simple : le triple puits

L'effet tunnel résonant est généralement décrit dans les systèmes ouverts avec une double barrière [104] [14] et la caractéristique principale est la présence de pics de résonances dans le diagramme de la transmission tunnel lorsque l'on varie un paramètre du système à l'image, par exemple, des figures d'intensité lumineuse créées par un interféromètre type Fabry−Perot. Une manière simple de faire apparaître des résonances quantiques dans un système fermé consiste à traiter le double puits étudié précédemment et à introduire entre les deux puits un troisième puits intermédiaire. Pour cela, nous utiliserons un potentiel polynomial d'ordre 6

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{q}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + (\hat{q}^2 - a^2)^2(\hat{q}^2 - b^2) \tag{3.1}$$

Les paramètres classiques a et b seront choisis tels que $a > b$ de sorte à fixer le minimum des puits extérieurs à zéro et à s'assurer que le puits central est plus profond que les deux autres comme l'illustre la figure (3.1). L'objectif est toujours d'étudier la transmission tunnel d'une particule entre le puits de gauche et de droite, comme dans le cadre du double puits, à la différence que la présence d'un puits supplémentaire va modifier drastiquement le comportement principalement exponentiel des doublets ΔE_n observés pour le double puits intégrable. Par souci de clarté, nous choisirons de travailler dans ce chapitre avec les paramètres classiques du potentiel

$$\begin{cases} a &= 1.5 \\ b &= 0.6. \end{cases} \tag{3.2}$$

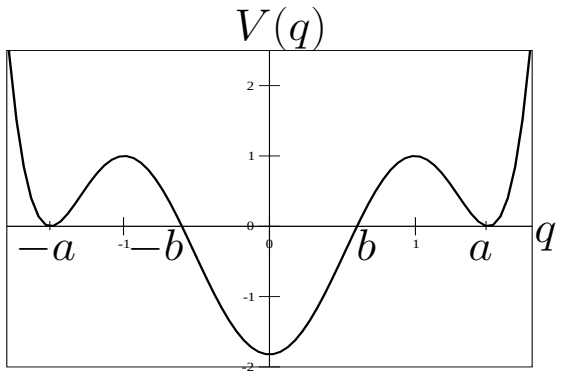


FIG. 3.1: Exemple d'un triple puits symétrique dont les minima locaux sont centrés en $\pm a$ et sont séparés par un minimum global centré en 0. Le passage tunnel d'une particule située dans un des minima locaux doit franchir maintenant deux barrières afin d'atteindre l'autre minimum local.

3.2 Approche spectrale

Afin de définir clairement ce que nous appellerons « résonances », il semble naturel de commencer par étudier le spectre en énergie d'un tel système. Dans le cadre d'une étude semiclassique ultérieure, il est raisonnable d'utiliser comme paramètre d'étude $\hbar$. La figure (3.2) représente donc l'évolution des niveaux d'énergie d'un triple puits en fonction de $1/\hbar$. Il est possible d'isoler deux types de comportement. Le premier correspond aux énergies isolées du puits central. Elles tendent à descendre en fond de puits comme prévoit l'approximation harmonique $E_n \propto \hbar\omega(n + 1/2)$ lorsque $\hbar \to 0$ (en bleu sur la figure (3.2)). D'un autre côté, on voit apparaître certains niveaux qui semblent « traverser » ceux associés au puits central. Ces niveaux sont reliés aux puits extérieurs et sont rassemblés en doublets (en rouge). Il est important de noter que, dans notre cas, la notion de doublet n'a de sens que grâce la structure symétrique qui existe entre les deux puits de droite et gauche[1]. Il est toujours possible d'organiser les états propres du système selon une classe de symétrie, encore une fois ici leur parité ($\pm$). Un système à une seule dimension décrit par un hamiltonien du type $H(p, q) = p^2/2 + V(q)$, où $V(q)$ est borné et ne possède pas de singularités, ne peut pas être associé à un spectre énergétique contenant des dégénérescences [19]. Les zones où les doublets paraissent « traverser » les niveaux du puits central ne correspondent donc pas à des croisements mais à des anti-croisements comme le montre la figure (3.3). Une résonance est alors décrite de la façon suivante : un doublet est, par définition, la différence d'énergie entre deux niveaux de parité opposée et suffisamment éloignés des autres niveaux. En faisant varier $\hbar$, on voit se rapprocher du doublet, un troisième niveau provenant du

[1] L'étude de l'effet tunnel au sein d'un potentiel composé de N puits identiques nécessiterait l'étude de la largeur des N-uplets qui composeraient le spectre. C'est d'ailleurs dans ce sens que l'on peut voir les bandes continues d'énergie permises dans la limite des systèmes unidimensionnels composés d'une infinité de puits périodiques, comme par exemple certains modèles de cristaux métalliques (bandes de conduction et de valence) en théorie du solide [20].

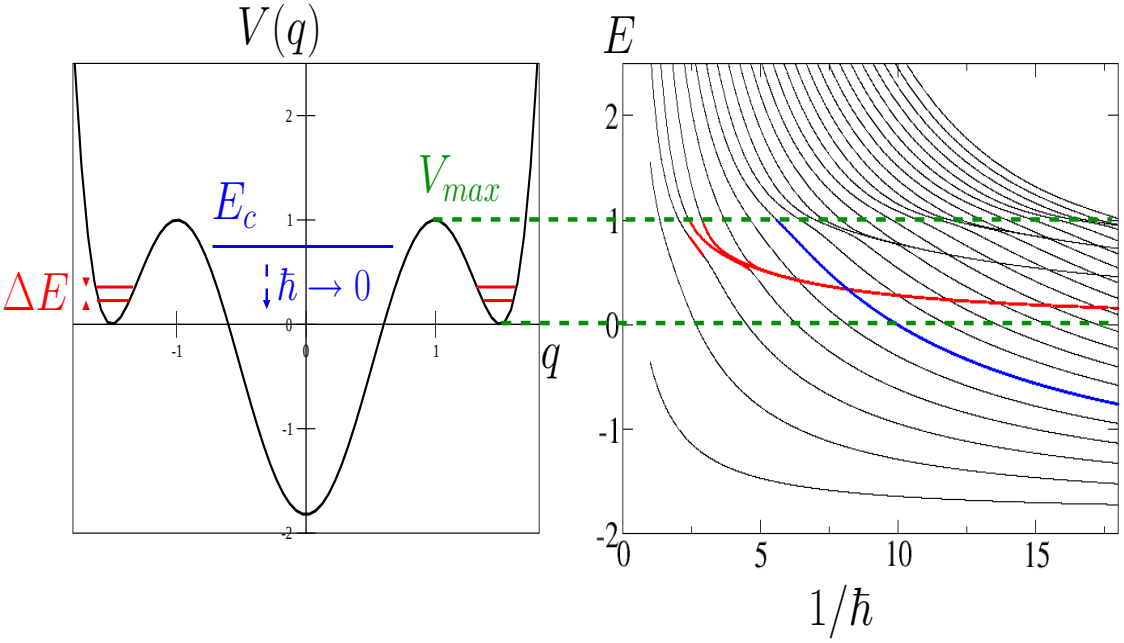


FIG. 3.2: La figure de gauche représente le potentiel décrit par l'équation (3.1) avec les paramètres donnés par (3.2). Le spectre énergétique du système en fonction de $1/\hbar$ (à droite) montre un comportement particulier des niveaux d'énergie situés entre la valeur des minima locaux et la hauteur maximum V_{max} des barrières (cette zone est séparée par les deux lignes vertes pointillées). Dans cet intervalle, on peut isoler des niveaux regroupés en doublets localisés sur les puits extérieurs (les deux niveaux constituant le doublet fondamental sont représentés en rouge) et des niveaux isolés localisés dans le puits central (en bleu).

puits central. À mesure que l'on s'approche d'une valeur critique $\hbar_*$, les trois niveaux deviennent suffisamment proches de sorte que la notion de doublet devient ambigüe. Cette dernière phrase deviendra plus claire lors de l'étude complémentaire des distributions de HUSIMI des états mis en jeu. Cette valeur $\hbar_*$ est définie comme la valeur pour laquelle, dans le spectre, les deux énergie de même parité sont à égales distances de l'énergie de parité opposée (voir figure (3.3)). Nous choisirons de mesurer l'écart du doublet au voisinage de l'anti-croisement comme l'écart minimum entre deux des trois niveaux mis en jeu. On comprend alors qu'au plus proche de $\hbar_*$, l'écart du doublet prend sa valeur la plus grande. La figure (3.4) illustre la correspondance entre le spectre au voisinage d'anti-croisements et les pics de résonance observés sur le profil de l'écart d'un doublet en fonction de $1/\hbar$. Un pic apparaît donc à chaque fois qu'un niveau appartenant au puits central vient perturber le doublet que l'on considère. L'augmentation de la largeur du doublet diminue le temps de passage tunnel entre un puits extérieur et son symétrique. Ceci a alors pour conséquence de faciliter le transport de la particule d'un puits à l'autre. La façon de calculer la largeur du doublet nous indique que les résonances ne sont pas des divergences au sens où les pics ne représentent pas des singularités (néanmoins, la largeur n'est pas différentiable en

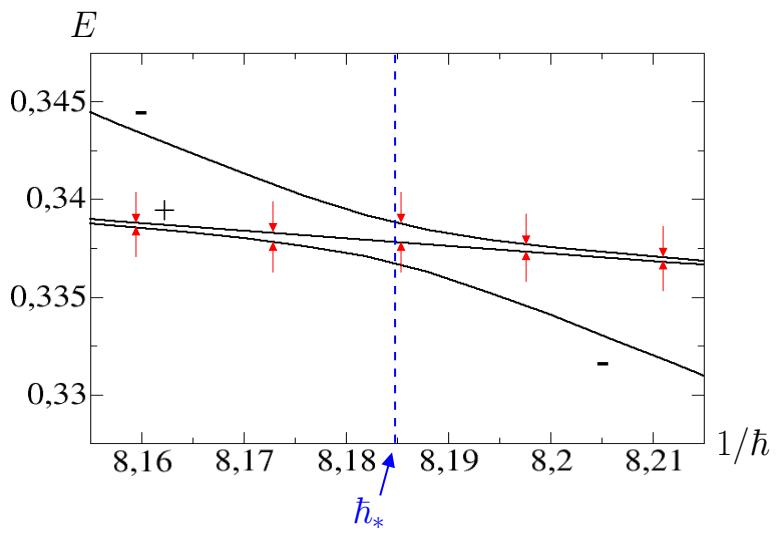


FIG. 3.3: Agrandissement de la zone d'anticroisement entre les niveaux rouges et bleu décrits sur la figure (3.2). $\hbar_*$ représente la valeur à partir de laquelle il y a un échange des niveaux d'énergies qui constituent le doublet. Les flèches rouges indiquent les niveaux qui constituent le doublet. C'est au voisinage de cette valeur du paramètre ($\hbar$) que la largeur du doublet est la plus grande. Parmi les trois niveaux, on observe que le niveau de parité différente (ici +) des deux autres fait toujours partie du doublet.

$\hbar_*$ puisque l'évaluation de l'écart du doublet immédiatement avant la valeur critique (en $\hbar_*^-$) et juste après (en $\hbar_*^+$) n'utilise pas les mêmes niveaux d'énergie). Chaque pic a, par conséquent, une hauteur finie et elle peut être approchée dans le cadre de l'approximation semiclassique comme nous le verrons dans la section suivante. Comme nous l'avons fait remarquer dans le chapitre précédent, contrairement au double puits, il n'est pas possible ici de décrire le triple puits comme un système à deux niveaux étant donné que le doublet n'est pas toujours isolé des autres énergies. Il est donc nécessaire de faire intervenir un troisième état, non dégénéré, couplé aux deux autres. Ainsi on peut modéliser le hamiltonien défini par l'expression (3.1) par la matrice suivante

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & \delta & \gamma \\ \delta & E_0 & \gamma \\ \gamma & \gamma & E_C \end{pmatrix}$$

écrite dans la base des états $\{|\psi_G\rangle, |\psi_D\rangle, |\psi_C\rangle\}$ qui correspondent respectivement aux états semiclassiques des puits de gauche, de droite et du puits central. Par analogie au double puits, le paramètre δ correspond au couplage entre les états des puits de gauche et de droite (dont l'énergie moyenne est E_0) et représente la largeur du doublet loin des résonances. Parallèlement, γ représente le couplage local entre les états des puits extérieurs et celui du puits central (d'énergie E_C) ce qui signifie que même dans la limite où il n'y a pas d'effet tunnel entre les deux quasimodes $|\psi_G\rangle$ et $|\psi_D\rangle$ ($\delta \to 0$), il existe un effet tunnel « indirect » dû au couplage avec un état du puits intermédiaire. Il est important de remarquer que,

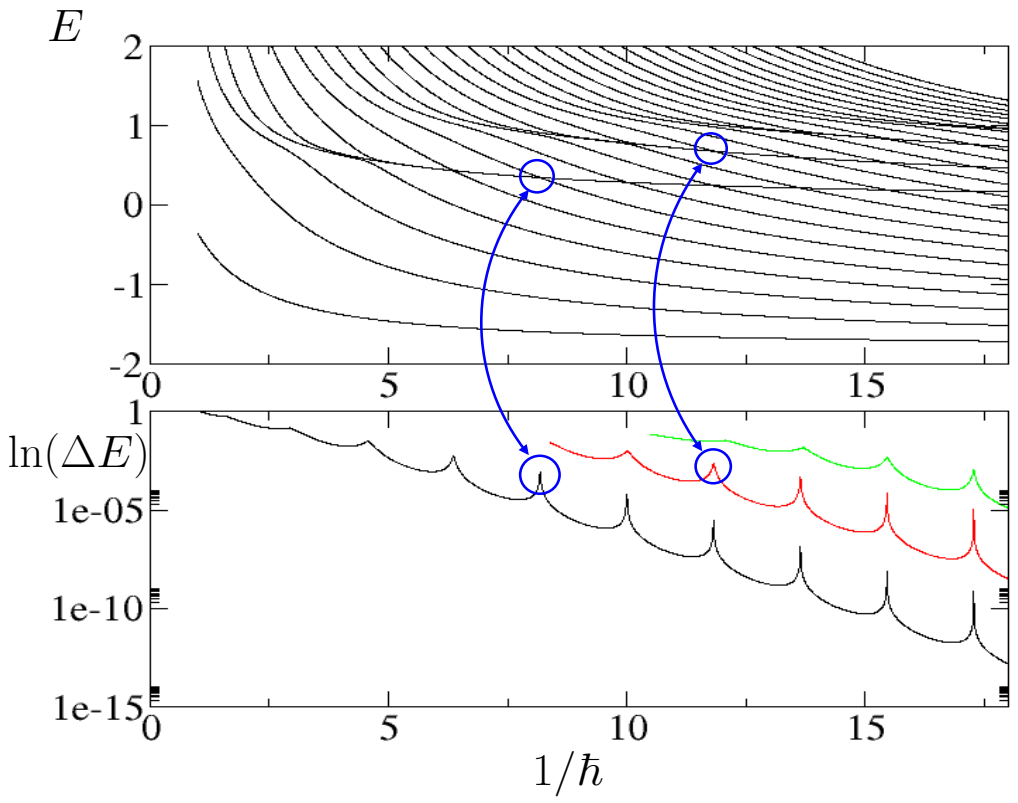
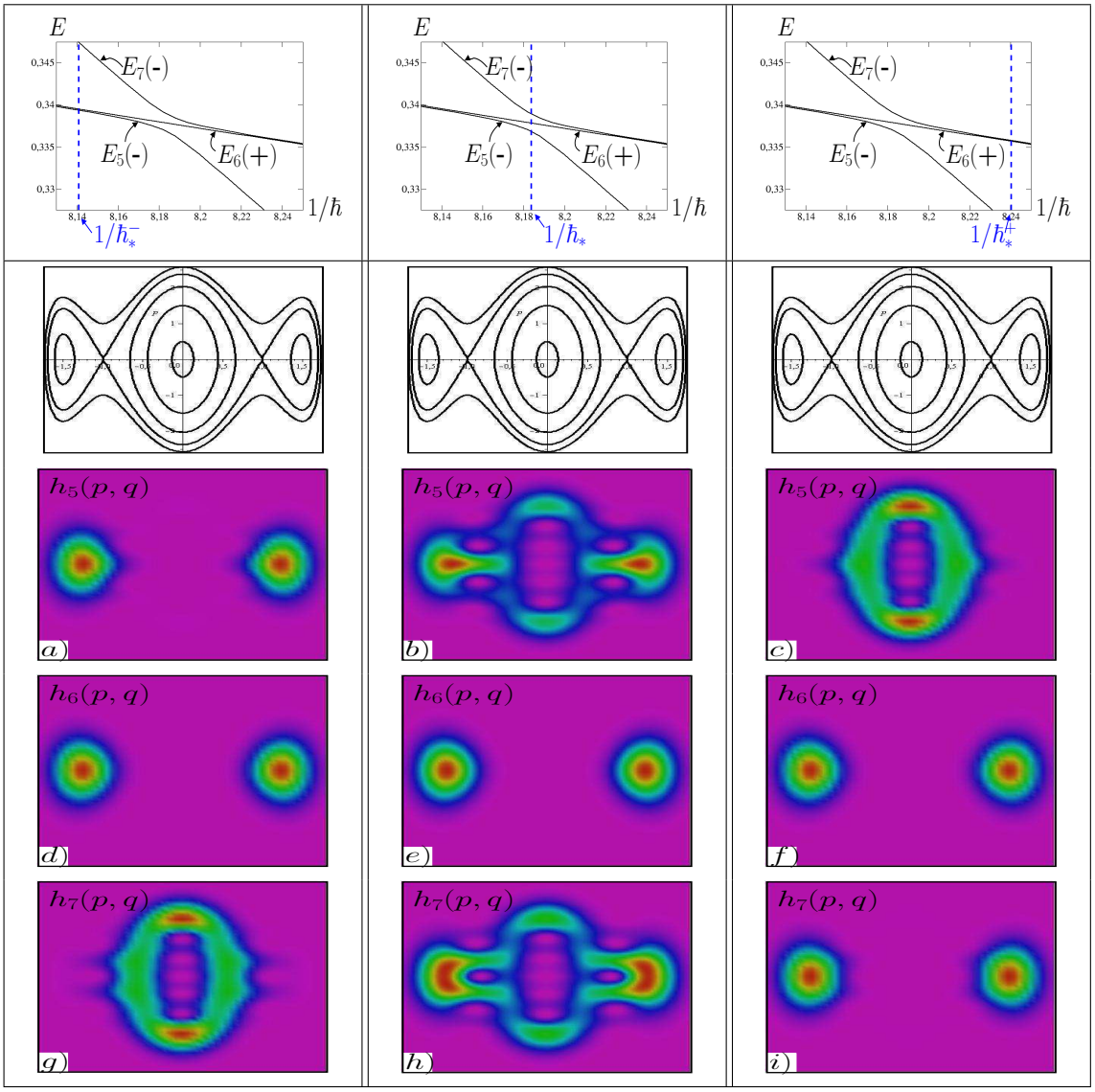


FIG. 3.4: On compare le spectre du potentiel (en haut) défini en (3.1) avec la largeur des trois premiers doublets ΔE_0, ΔE_1 et ΔE_2 (respectivement en noir, rouge et vert) en échelle semi-logarithmique (en bas). Les pics de résonances sont espacés de manière régulière (typique d'un effet FABRY – PÉROT) et chacun d'entre eux est clairement associé à un anticroisement.

contrairement aux niveaux constituant le doublet tunnel, l'état propre localisé dans le puits central ne fait pas partie d'un doublet et n'a alors pas de correspondance avec un état de parité opposé. Ce type de modèle est retrouvé dans des systèmes plus complexes afin de décrire des couplages de quasimodes localisés sur des tores réguliers avec la mer chaotique dans des systèmes mixtes [96]. Les éléments δ et γ représentent alors le couplage avec les états chaotiques et sont évalués à l'aide de modèles de matrices aléatoires [12] [9].

Attardons nous quelques instants sur les fonctions d'ondes associées aux niveaux mis en jeu à proximité de l'anti-croisement représentée sur la figure (3.3). Le tableau (3.1) présente les distributions de HUSIMI des trois états propres projetées sur l'espace des phases pour différentes valeurs de $\hbar$. Loin de la résonance, il est facile d'identifier les niveaux provenant du doublet, puisque ceux-ci sont distinctement localisés dans les puits extérieurs. Il en est de même pour ceux reliés au puits central localisés sur les tores situés au centre de l'espace des phases. En revanche, au voisinage d'une résonance, on constate que les deux états de même parité sont complètement délocalisés sur l'ensemble des trois puits (Dans ce sens, la notion de doublet devient alors ambigüe) tandis que l'état de parité opposé n'est pas affecté par le couplage et reste localisé dans les puits extérieurs. Il appartient toujours au

doublet tunnel.



TAB. 3.1: On compare les distributions de HUSIMI au voisinage de l'anticroisement décrit à la figure (3.3). Entre les figures d'anticroisement et les distributions, on trace l'espace des phases du triple puits. Avant la résonance ($\hbar_*^-$), les niveaux E_5 et E_6 constituent le doublet et sont clairement localisés sur les puits extérieurs en a) et d) tandis que le niveau E_7 est associé au puits central (g)). Juste après l'anticroisement ($\hbar_*^+$) le niveau E_7 fait maintenant partie du doublet avec E_6 sur les figures f) et i) au détriment de E_5 qui correspond alors à un état situé principalement dans le puits central en c). Enfin au plus proche de la résonance ($\hbar_*$) E_6 est toujours associé aux puits extérieurs de e) tandis que les niveaux de même parité E_5 et E_7 sont complètement délocalisés sur l'ensemble des trois puits. Dans ce sens, la notion de doublet devient mal définie.

3.3 Matrices de transfert et expression semiclassique

L'objectif de cette section est de reproduire le comportement de l'effet tunnel résonnant décrit précédemment avec le triple puits à l'aide de la théorie semiclassique développée dans le premier chapitre. Pour un état d'énergie E comprise entre les minima locaux des puits extérieurs et la hauteur V_{max} des barrières, il existe trois points de rebroussement (q_1, q_2, q_3) et leur symétriques associés aux trajectoires classiques, comme décrit sur la figure (3.5). La fonction d'onde semiclassique de cet état s'écrit de manière différente selon

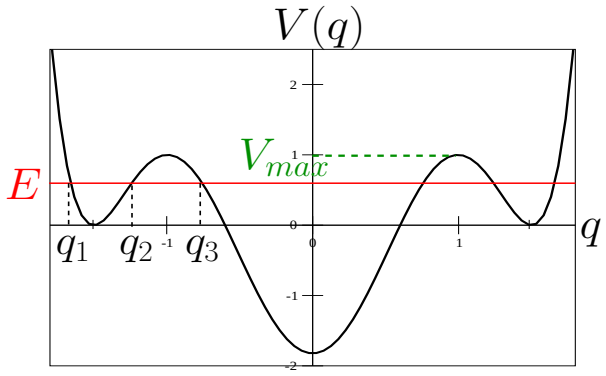


FIG. 3.5: Une particule classique piégée dans un triple puits à une énergie E comprise entre la valeur des minima locaux et la hauteur maximum de la barrière V_{max} peut osciller soit dans un des puits extérieurs soit dans le puits central. Il existe alors 6 points de rebroussement réels (q_1, q_2 et q_3 ainsi que leur symétriques).

la constante d'intégration choisie dans l'argument de l'exponentielle, modifiant ainsi les préfacteurs devant chaque exponentielles

$$\psi(q) = \frac{A_0}{\sqrt{p(q)}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^q p(q')\mathrm{d}q'} + \frac{B_0}{\sqrt{p(q)}} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^q p(q')\mathrm{d}q'} = \frac{A_{q_1}}{\sqrt{p(q)}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{q_1}^q p(q')\mathrm{d}q'} + \frac{B_{q_1}}{\sqrt{p(q)}} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{q_1}^q p(q')\mathrm{d}q'} \tag{3.3}$$

et les coefficients (A_0, B_0) et (A_{q_1}, B_{q_1}) sont reliés, grâce aux matrices de transfert définies dans le tableau (1.1) au premier chapitre, de la façon suivante

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = T(0, q_1^-) \begin{pmatrix} A_{q_1} \\ B_{q_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{q_1} \\ B_{q_1} \end{pmatrix} \tag{3.4}$$

avec

$$T(0, q_1^-) = T(0, q_3^+) T_-(q_3^+, q_3^-) T(q_3^-, q_2^+) T_+(q_2^+, q_2^-) T(q_2^-, q_1^+) T_-(q_1^+, q_1^-). \tag{3.5}$$

Le produit des matrices va déterminer les quatre éléments T_{11}, T_{12}, T_{21} et T_{22} de l'équation (3.4) à l'aide des trois intégrales d'action suivantes

$$\begin{cases} \sigma_{q_1 q_2}(E) & \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{q_1}^{q_2} p(q,E)\mathrm{d}q, \\ \\ \sigma_{q_2 q_3}(E) & \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{q_2}^{q_3} |p(q,E)|\mathrm{d}q, \\ \\ \sigma_{q_3 0}(E) & \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{1}{\hbar}\displaystyle\int_{q_3}^{0} p(q,E)\mathrm{d}q - \dfrac{\pi}{4}. \end{cases} \tag{3.6}$$

Comme la symétrie du potentiel permet de distinguer les états propres suivant leur parité paire ou impaire ($\pm$), les fonctions d'onde seront alors classées suivant deux conditions

$$\begin{cases} \text{états impairs (-) :} & \psi(0) = 0 \Rightarrow A_0 = -B_0, \\ \\ \text{états pairs (+) :} & \dfrac{\mathrm{d}\psi(0)}{\mathrm{d}q} = 0 \Rightarrow A_0 = B_0. \end{cases} \tag{3.7}$$

En ajoutant la condition supplémentaire que $\psi(q)$ doit être nulle à l'infini, il vient naturellement $A_{q_1} = 0$. Ces trois conditions couplées fournissent, en utilisant les éléments de matrice de l'équation (3.4), des équations transcendantales de discrétisation de l'énergie

$$\begin{cases} F_-(E) & \stackrel{\text{def}}{=} T_{12} + T_{22} = 0 \\ & = \cos(\sigma_{q_3 0}(E))\cos(\sigma_{q_1 q_2}(E)) + \dfrac{1}{4}\mathrm{e}^{-2\sigma_{q_2 q_3}(E)}\sin(\sigma_{q_3 0}(E))\sin(\sigma_{q_1 q_2}(E)), \\ \\ F_+(E) & \stackrel{\text{def}}{=} T_{12} - T_{22} = 0 \\ & = \sin(\sigma_{q_3 0}(E))\cos(\sigma_{q_1 q_2}(E)) - \dfrac{1}{4}\mathrm{e}^{-2\sigma_{q_2 q_3}(E)}\cos(\sigma_{q_3 0}(E))\sin(\sigma_{q_1 q_2}(E)). \end{cases} \tag{3.8}$$

En écartant les termes exponentiellement petits, les énergies sont données approximativement par

$$\begin{cases} F_-(E) \approx & \cos(\sigma_{q_3 0}(E))\cos(\sigma_{q_1 q_2}(E)) = 0, \\ F_+(E) \approx & \sin(\sigma_{q_3 0}(E))\cos(\sigma_{q_1 q_2}(E)) = 0. \end{cases} \tag{3.9}$$

On remarque qu'il est possible d'annuler simultanément les deux équations (3.9) lorsque $\cos[\sigma_{q_1 q_2}(E)] = 0$. En première approximation, il existe alors deux niveaux dégénérés en énergie. On note E_n la valeur qui annule $\cos[\sigma_{q_1 q_2}(E)]$ et qui vérifie par conséquent

$$\sigma_{q_1 q_2}(E_n) = \pi(n + \frac{1}{2}) \Rightarrow 2\int_{q_1}^{q_2} p(q,E_n)\mathrm{d}q = 2\pi\hbar(n + \frac{1}{2}). \tag{3.10}$$

On voit apparaître ici une première quantification semiclassique des niveaux d'énergie. Ces niveaux sont associés aux quasimodes localisés sur les puits extérieurs du triple puits et vont permettre de construire les doublets qui nous intéressent. Le fait de négliger les termes exponentiellement petits dans les équations (3.8) est équivalent à ne pas tenir compte

des termes sous dominants lors des connexions des fonctions d'ondes entre les différentes régions de l'espace [62] [8]. Cela revient, dans un premier temps, à supprimer la levée de dégénérescence des niveaux d'énergie et donc l'effet tunnel. Il est encore possible d'annuler les deux équations (3.9) indépendamment via $\sin[\sigma_{q_3 0}(E)] = 0$ et $\cos[\sigma_{q_3 0}(E)] = 0$ et les états auxquels elles sont associés sont localisés dans le puits central. Nous verrons un peu plus loin comment ces niveaux sont responsables des résonances.

Les doublets tunnels vont se trouver au voisinage de E_n : $E_n^{\pm} = E_n + \epsilon^{\pm}$ où $\epsilon^{\pm}$ correspond au décalage créé en tenant compte des termes sous dominants négligés précédemment. Afin d'évaluer cette différence, les équations (3.8) de discrétisation de l'énergie sont développées au premier ordre autour des $E_n^{\pm}$

$$F_{\pm}(E_n + \epsilon^{\pm}) = F_{\pm}(E_n) + (\epsilon^{\pm})\frac{\mathrm{d}F_{\pm}}{\mathrm{d}E}(E_n) + o((\epsilon^{\pm})^2) = 0. \tag{3.11}$$

Lorsque l'on impose $\cos[\sigma_{q_3 0}(E_n)] \neq 0$ et $\sin[\sigma_{q_3 0}(E_n)] \neq 0$, on considère qu'il n'y a pas de quasimode localisé dans le puits central dont l'énergie serait égale à l'énergie moyenne du doublet E_n et que nous ne sommes pas à proximité d'une résonance. On peut extraire les écarts à l'énergie des équations (3.11) pour donner

$$\begin{cases} \epsilon^+ \approx -\dfrac{F_+(E_n)}{(\mathrm{d}F_+(E_n)/\mathrm{d}E)} = -\dfrac{\hbar}{2T_{q_1 q_2}(E_n)}\mathrm{e}^{-2\sigma_{q_2 q_3}(E_n)}\dfrac{1}{\tan[\sigma_{q_3 0}(E_n)]}, \\ \epsilon^- \approx -\dfrac{F_-(E_n)}{(\mathrm{d}F_-(E_n)/\mathrm{d}E)} = \dfrac{\hbar}{2T_{q_1 q_2}(E_n)}\mathrm{e}^{-2\sigma_{q_2 q_3}(E_n)}\tan[\sigma_{q_3 0}(E_n)] \end{cases} \tag{3.12}$$

en remarquant que la période de l'orbite périodique d'énergie E dans les puits extérieurs est $T_{q_1 q_2}(E) = 2\hbar(\mathrm{d}\sigma_{q_1 q_2}/\mathrm{d}E)$. La largeur du doublet devient

$$\Delta E_n = E_n^- - E_n^+ = \epsilon^- - \epsilon^+ \tag{3.13}$$

$$= \frac{\hbar}{2T_{q_1 q_2}(E_n)}\mathrm{e}^{-2\sigma_{q_2 q_3}(E_n)}\left(\tan[\sigma_{q_3 0}(E_n)] + \frac{1}{\tan[\sigma_{q_3 0}(E_n)]}\right). \tag{3.14}$$

L'expression (3.14) fait apparaître, premièrement, le comportement exponentiellement décroissant avec $\hbar \to 0$ et le facteur 2 dans l'argument de l'exponentielle compte bien le passage tunnel à travers les deux barrières du système. En revanche, contrairement à une simple barrière, il est clair que si on note E_m la valeur d'énergie telle que

$$\sigma_{q_3 0}(E_m) = m\frac{\pi}{2} \Rightarrow 4\int_{q_3}^{0} p(q, E_m) = 2\pi\hbar(m + \frac{1}{2}) \tag{3.15}$$

la formule (3.14) présente des divergences pour ces valeurs là. La nouvelle condition de quantification (3.15) provient des équations (3.9) et gouverne les niveaux d'énergie associés au puits central. On est alors en présence d'une résonance lorsque l'énergie d'un état pair ($\sin[\sigma_{q_3 0}(E)] = 0$) ou impair ($\cos[\sigma_{q_3 0}(E)] = 0$) quantifie au premier ordre. Son énergie est alors dégénérée avec les niveaux localisés sur les puits extérieurs.

Le spectre énergétique ne possède pas de dégénérescence donc les pics de résonances ne sont pas divergents mais présentent un maximum. L'équation (3.14) n'étant valable

que loin d'une résonance, il est nécessaire d'étendre l'expression (3.11) à l'ordre suivant en $\epsilon^{\pm}$ afin d'obtenir ce maximum. On différentie une résonance par la parité du niveau qui vient perturber le doublet tunnel. Les résonances paires sont décrites par la condition $\sigma_{q_3 0}(E) = m\pi$ et les équations de discrétisation deviennent

$$F_+(E_n + \epsilon^+) = \frac{(-1)^{n+m}}{4}\left[\mathrm{e}^{-2\sigma_{q_2 q_3}(E_n)} - \frac{(\epsilon^+)^2}{2}\frac{\mathrm{d}\sigma_{q_1 q_2}}{\mathrm{d}E}(E_n)\frac{\mathrm{d}\sigma_{q_3 0}}{\mathrm{d}E}(E_n)\right] + o(\mathrm{e}^{-3\sigma_{q_2 q_3}}) = 0 \tag{3.16}$$

qui permet d'extraire ϵ^+, tandis que $F_-(E_n)$ est exactement nul et donne immédiatement $\epsilon^- = 0$. La hauteur maximum d'un pic créé par un état pair est alors

$$\Delta E_n^{res.paire} = \epsilon^- - \epsilon^+ = \frac{2\hbar}{\sqrt{T_{q_3 0}(E_n)T_{q_1 q_2}(E_n)}}\mathrm{e}^{-\sigma_{q_2 q_3}(E_n)} \tag{3.17}$$

en notant cette fois que $T_{q_3 0}(E) = 4\hbar(\mathrm{d}\sigma_{q_3 0}/\mathrm{d}E)$. De manière analogue, la procédure est réalisée dans le cas d'une résonance impaire, décrite par $\sigma_{q_3 0}(E) = (2m+1)\pi/2$, et fournit le même résulat

$$\Delta E_n^{res.impaire} = \epsilon^- - \epsilon^+ = \frac{2\hbar}{\sqrt{T_{q_3 0}(E_n)T_{q_1 q_2}(E_n)}}\mathrm{e}^{-\sigma_{q_2 q_3}(E_n)}. \tag{3.18}$$

Les résultats (3.14), (3.17) et (3.18) sont regroupés sur la figure (3.6) et comparés au calcul « exact » de la largeur du doublet obtenu par diagonalisation.

Il est intéressant de constater que l'application d'une rotation de Wick complète

$$t \mapsto -\mathrm{i}|t| \Rightarrow \begin{cases} p(q, E_n) \mapsto \mathrm{i}|p(q, E_n)| \\ \sigma_{q_3 0}(E_n) \mapsto \mathrm{i}|\sigma_{q_3 0}(E_n)| \end{cases} \tag{3.19}$$

dans le cas d'un effet tunnel résonant amène à une destruction totale des résonances. L'expression (3.14) devient

$$|\Delta E_n| = \frac{\hbar}{2|T_{q_1 q_2}(E_n)|}\left|\mathrm{i}\tanh[\sigma_{q_3 0}(E_n)] + \frac{\mathrm{i}}{\tanh[\sigma_{q_3 0}(E_n)]}\right| \tag{3.20}$$

$$\approx \frac{2\hbar}{|T_{q_1 q_2}(E_n)|}\mathrm{e}^{-2|\sigma_{q_3 0}(E_n)|} \tag{3.21}$$

et décrit un comportement exponentiellement décroissant comparable à celui d'une barrière simple (de la largeur du puits central). Nous verrons dans le chapitre suivant le mécanisme mis en jeu et dans quelles mesures une rotation complète (ou incomplète) est responsable de la destruction totale ou partielle des pics de résonances.

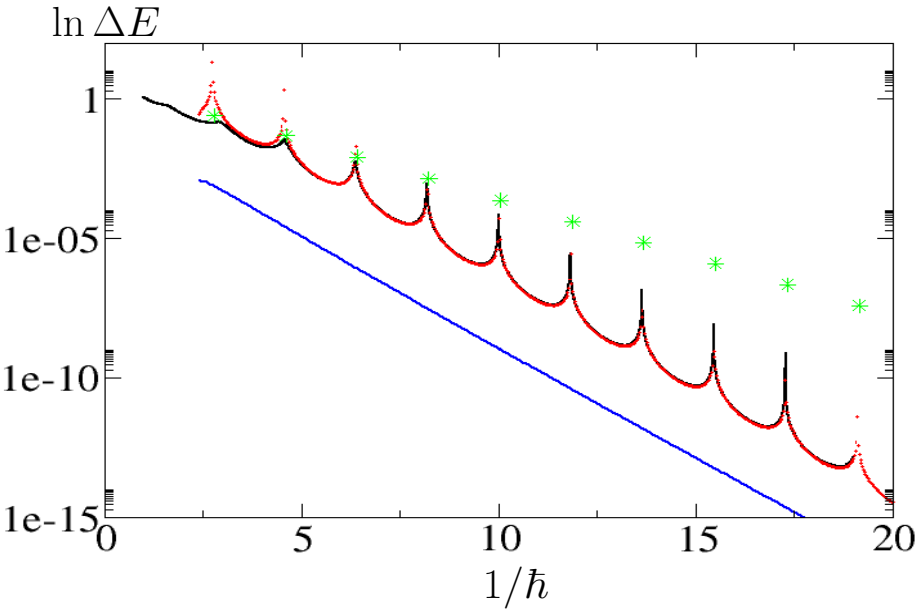


FIG. 3.6: On représente la largeur du doublet fondamental en échelle semi-logarithmique pour le triple puits défini par l'équation (3.1) avec les paramètres (3.2). La courbe en trait plein noir correspond au calcul « exact » (diagonalisation) et est comparée à la formule (3.14) (pointillés rouges). La hauteur maximum des résonances est décrites par les expressions (3.17) et (3.18) (étoiles vertes). L'accord avec les expressions semiclassiques n'est évidemment pas bon pour des valeurs de $\hbar$ trop grande ($1/\hbar \lesssim 7.5$). Enfin on trace l'expression (3.21) (trait plein bleu) qui représente la destruction des pics de résonance lors d'une rotation de WICK complète.

Deuxième partie

Une approche nouvelle

♪ *I see skies of blue and clouds of white,*
The bright blessed day, the dark sacred night,
And I think to myself,
What a wonderful world. ♪

Louis Armstrong, **What a wonderful world**

Chapitre 4

Vers les instantons, et au-delà...

4.1 Les instantons...

À travers les chapitres précédents, nous avons mis en place différents outils (approximation semiclassique, complexification, propagateur quantique, etc. . .) qui vont être utiles au developpement d'une méthode générale pour évaluer directement la largeur des doublets tunnel. Cette méthode va nécessiter le prolongement analytique dans le plan complexe de propagateurs quantiques (2.50) en complexifiant le temps. Dans ce sens, elle peut être comprise comme une « extension » de l'approche par les instantons. La méthode des instantons est initiée par Coleman et Polyakov dans les années soixante-dix [22] [81] dans le cadre de la théorie des champs afin de décrire le taux de décroissance d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'états ou encore l'effet tunnel entre N vides dégénérés de la théorie (dans la limite où $N = 2$, on retrouve le double puits présenté précédemment). Cette technique a été, par la suite, largement utilisée et est présentée dans les livres de références de théorie des champs [85] [103].

Les instantons sont présentés généralement comme des solutions classiques des équations du mouvement où le temps réel est remplacé par un temps purement imaginaire $t \mapsto -\mathrm{i}t$. Cette transformation est appelée rotation de Wick. Supposons, par exemple, un système à une dimension gouverné par un hamiltonien classique réel de la forme

$$H(p,q) = E = \frac{p^2}{2} + V(q). \tag{4.1}$$

sur lequel on applique une rotation de Wick

$$t = s\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}, \qquad \theta = \frac{\pi}{2}, \tag{4.2}$$

où s est le paramètre réel du chemin du temps. Les équations d'Hamilton complexes (2.34) et (2.35) deviennent

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}}(\tilde{p}, q), \tag{4.3}$$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{p}}{\mathrm{d}s} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q}(\tilde{p}, q) \tag{4.4}$$

où $\tilde{p} = \mathrm{i}p$ et le nouveau hamiltonien $\tilde{H}$ peut être vu comme un système dont la dynamique réelle évolue dans le potentiel retourné

$$\tilde{H}(\tilde{p}, q) = E = -\frac{\tilde{p}^2}{2} + V(q). \tag{4.5}$$

Des trajectoires classiquement interdites pour le hamiltonien $H(p, q)$ deviennent alors autorisées dans la nouvelle dynamique. L'action associée au nouveau système s'écrit en fonction de l'ancienne action

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\tilde{p}, q, s) &= \int_{s_i}^{s_f} \left(\tilde{p}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} - \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s}\tilde{H}(\tilde{p}(s), q(s)) \right) \mathrm{d}s, & (4.6) \\ &= \int_{s_i}^{s_f} \left(\mathrm{i}p\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} - \mathrm{i}H(p(s), q(s)) \right) \mathrm{d}s, & (4.7) \\ &= \mathrm{i}S(p, q, t) & (4.8) \end{aligned}$$

La méthode de Coleman requiert également le calcul semiclassique de propagateurs du type (2.50) mais avec un temps purement imaginaire et l'inversion du potentiel par une rotation de Wick rend l'intégrand réel dans l'intégrale de chemin. Cependant, comme nous l'avons dit précédemment, Coleman cherche à décrire le transport tunnel d'une particule initialement localisée dans le fond d'un puits vers un continuum d'états ou vers un des N autres puits dégénérés. Les bornes du propagateur sont alors $q_i = a$ et $q_f = b$ où a est la position du fond du puits où se trouve la particule au départ et b peut être égal à a ou bien à la position du fond de puits d'un des autres puits. Par conséquent, les contributions dominantes aux propagateurs en temps purement imaginaire sont des orbites réelles du hamiltonien $\tilde{H}$. Pour illustrer ce propos, on présente l'exemple du double puits sur la figure (4.1). Cette façon de procéder ne peut toutefois prédire le passage tunnel que pour l'état de plus basse énergie.

Plus généralement, on parlera d'effet tunnel pour décrire un processus classiquement interdit par la dynamique du hamiltonien $H(p, q)$. Cela implique qu'au-delà de l'effet tunnel en position, la théorie quantique autorise également la réflection d'une particule face à une barrière d'énergie qu'elle peut classiquement franchir [68] [69]. Cet effet tunnel en impulsion est généralement appelé *effet tunnel dynamique* [56]. Un exemple révélateur est d'imaginer un pendule simple dans un mouvement de révolution autour d'un axe. Quantiquement, il est possible que le pendule se mette soudainement à tourner en sens contraire alors que classiquement, ces deux mouvements sont déconnectés dans l'espace des phases réel. L'approche par les instantons échoue à expliquer cet effet tunnel dynamique parce que l'énergie des états associés aux rotations dans un sens où l'autre ne correspond pas au fondamental. Elle échoue également à la description de l'effet tunnel résonant présenté dans le chapitre 3, à travers le triple puits. Dans ce dernier cas de figure, on voit clairement qu'une rotation de Wick complète ne permet pas de trouver de trajectoires réelles dans le potentiel inversé qui pourraient contribuer au propagateur, à cause du puits central plus profond, comme on peut le voir sur la figure (4.1). Dans les deux sections suivantes, nous allons tenter de présenter une stratégie qui permet d'inclure le calcul des doublets excités, de l'effet tunnel dynamique et résonant en tirant profit de l'utilisation du temps complexe et non purement imaginaire.

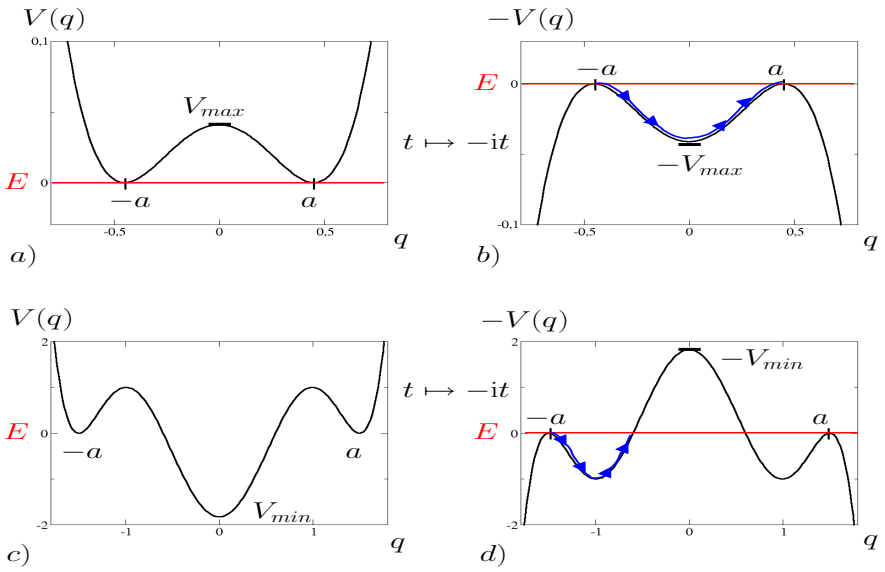


FIG. 4.1: On présente l'effet d'une rotation de WICK sur les potentiels quartique (en a) et b))(même paramètres que la figure (1.4)) et sextique (en c) et d)) (paramètres définis en (3.2)). Dans le cas du double puits, il existe une trajectoire (en bleu) qui permet d'aller de $-a$ à a dans le potentiel inversé. En revanche, pour le triple puits, la barrière central du potentiel $-V(q)$ ne permet pas à la particule d'atteindre a.

4.2 ... Et au-delà : Vers une formule de traces

Dans les chapitres précédents, nous avons largement utilisé le fait que les hamiltoniens qui nous intéressent sont bornés et respectent certaines symétries afin de séparer le spectre discret selon la parité des niveaux d'énergies. Cette condition va, dans notre cas, être cruciale. Supposons un hamiltonien borné indépendant du temps $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{q})$ qui commute avec un opérateur de symétrie $\hat{S}$ vérifiant $\hat{S}^2 = 1$. Dans notre cas, cet opérateur correspond à l'opérateur de parité et attribue au hamiltonien la symétrie

$$H(-p, -q) = H(p, q). \tag{4.9}$$

Comme nous l'avons déjà mentionné, le spectre de l'opérateur hamiltonien $\hat{H}$ va pouvoir être décomposé en niveaux d'énergie propres pairs et impairs $E_n^{\pm}$ sur la base des états propres $\{|\psi_n^{\pm}\rangle\}$

$$\hat{H}|\psi_n^{\pm}\rangle = E_n^{\pm}|\psi_n^{\pm}\rangle, \tag{4.10}$$
$$\hat{S}|\psi_n^{\pm}\rangle = \pm|\psi_n^{\pm}\rangle, \tag{4.11}$$

où n est un entier positif qui ordonne les états propres. L'approche alternative proposée dans cette thèse pour calculer les doublets $\Delta E_n = |E_n^- - E_n^+|$ nécessite le calcul de la trace de différents opérateurs dont l'opérateur d'évolution défini au chapitre 2. En appliquant la relation de fermeture de la base des états propres $|\psi_n^{\pm}\rangle$ sur l'opérateur d'évolution, on

obtient

$$\hat{U}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)\hat{H}T} |\psi_n^{\pm}\rangle\langle\psi_n^{\pm}|, \tag{4.12}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar}|\psi_n^{+}\rangle\langle\psi_n^{+}| + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar}|\psi_n^{-}\rangle\langle\psi_n^{-}|\Big), \tag{4.13}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{+}T/\hbar}|\psi_n^{+}\rangle\langle\psi_n^{+}| + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{-}T/\hbar}|\psi_n^{-}\rangle\langle\psi_n^{-}|\Big). \tag{4.14}$$

De la même manière, le produit d'opérateurs $\hat{S}\hat{U}(T)$ donne

$$\hat{S}\hat{U}(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \Big(\hat{S}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar}|\psi_n^{+}\rangle\langle\psi_n^{+}| + \hat{S}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar}|\psi_n^{-}\rangle\langle\psi_n^{-}|\Big), \tag{4.15}$$

$$\stackrel{(4.11)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{+}T/\hbar}|\psi_n^{+}\rangle\langle\psi_n^{+}| - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{-}T/\hbar}|\psi_n^{-}\rangle\langle\psi_n^{-}|\Big). \tag{4.16}$$

La trace de ces deux opérateurs,évaluée sur la base des états propres $\{|\psi_n^{\pm}\rangle\}$, est immédiate

$$\operatorname{tr}\hat{U}(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi_n^{\pm}|\hat{U}(T)|\psi_n^{\pm}\rangle \stackrel{(4.14)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{+}T/\hbar} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{-}T/\hbar}\Big), \tag{4.17}$$

$$\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\psi_n^{\pm}|\hat{S}\hat{U}(T)|\psi_n^{\pm}\rangle \stackrel{(4.16)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{+}T/\hbar} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{-}T/\hbar}\Big). \tag{4.18}$$

Si maintenant on prolonge analytiquement l'opérateur d'évolution en complexifiant le temps $T = \operatorname{Re}T + \mathrm{i}\operatorname{Im}T$ avec $\operatorname{Im}T < 0$, on rend les sommes (4.17) et (4.18) convergentes puisqu'elles contiennent des exponentielles décroissantes qui, à T fixé, sont d'autant plus petites que n augmente.

On peut être confronté principalement à deux situations lorsque l'on veut évaluer la largeur d'un doublet. La situation la plus simple est celle où l'on cherche à calculer la largeur d'un doublet composé des deux niveaux les plus bas $\Delta E_0 = E_0^{-} - E_0^{+}$. Lorsque l'on choisit la partie imaginaire du temps très négative, il est alors possible de ne retenir que les deux premiers termes avec $E_0^{\pm}$ des sommes (4.17) et (4.18), les autres termes devenant exponentiellement petits. Cette première condition s'écrit quantitativement en remarquant que l'écart moyen entre les niveaux qui composent le doublet fondamental $E_0^{\pm}$ et les premiers niveaux excités $E_1^{\pm}$ est de l'ordre de $\hbar\omega$ où ω est la courbure au fond des puits où sont localisés les états. Pour pouvoir sélectionner seulement les deux premiers niveaux, il faut que

$$\left|\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1^{\pm}T/\hbar}}{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0^{\pm}T/\hbar}}\right| = \mathrm{e}^{\operatorname{Im}T(E_1^{\pm}-E_0^{\pm})/\hbar} \simeq \mathrm{e}^{\omega\operatorname{Im}T} \ll 1 \tag{4.19}$$

et donc la première condition s'écrit

$$-\omega\operatorname{Im}T \gg 1. \tag{4.20}$$

Bien sûr, ceci n'est valable que dans l'hypothèse où $E_0^\pm$ sont isolés de tous les autres niveaux du spectre (contrairement au cas d'une résonance quantique où un troisième niveau vient perturber le doublet). Une fois cette condition réalisée, on calcule le rapport

$$\frac{\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T)}{\operatorname{tr}\hat{U}(T)} \simeq \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0^+T/\hbar}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0^-T/\hbar}}{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0^+T/\hbar}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0^-T/\hbar}} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}T\Delta E_0/(2\hbar)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\Delta E_0/(2\hbar)}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}T\Delta E_0/(2\hbar)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\Delta E_0/(2\hbar)}}, \tag{4.21}$$

$$\simeq \mathrm{i}\tan\left(\frac{T\Delta E_0}{2\hbar}\right). \tag{4.22}$$

Enfin, si la largeur du doublet est inférieure, de plusieurs ordres de grandeur, à la différence $E_1^\pm - E_0^\pm \simeq \hbar\omega$ alors on peut effectuer le développement limité au premier ordre du terme de droite dans l'équation (4.22) sous la condition

$$\frac{|T|\Delta E_0}{2\hbar} \ll 1. \tag{4.23}$$

Les conditions (4.20) et (4.23) restent compatibles pour une gamme de valeur de T suffisamment large. On pourra le vérifier numériquement pour l'exemple du double puits. Sous ces deux conditions, l'expression finale pour le doublet fondamental s'écrit

$$\Delta E_0 \simeq \Delta_0(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\hbar}{\mathrm{i}T}\frac{\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T)}{\operatorname{tr}\hat{U(T)}}. \tag{4.24}$$

Une telle approximation dispense d'une diagonalisation, ce qui constitue un premier avantage, numérique, non négligeable. L'expression (4.24) est déjà apparue dans [103], mais encore fois dans le cadre plus restrictif des solutions instantons, c'est-à-dire en temps purement imaginaire.

La situation plus délicate consiste à obtenir la largeur d'un doublet excité arbitraire $\Delta E_n = E_n^- - E_n^+$ et nécessite un peu plus de précaution. L'utilisation d'une partie imaginaire négative importante du temps ne suffit plus à sélectionner des niveaux excités. Nous allons alors utiliser un opérateur $\hat{\Pi}_n$ qui va imiter le comportement du projecteur $|\psi_n^+\rangle\langle\psi_n^+| + |\psi_n^-\rangle\langle\psi_n^-|$ où on rappelle que les $|\psi_n^\pm\rangle$ sont les états propres du système. On adapte les expressions (4.17) et (4.18) comme

$$\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) = \sum_{m=0}^{\infty}\langle\psi_m^\pm|\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)|\psi_m^\pm\rangle, \tag{4.25}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty}\Big(\langle\psi_m^+|\hat{\Pi}_n|\psi_m^+\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^+T/\hbar} + \langle\psi_m^-|\hat{\Pi}_n|\psi_m^-\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^-T/\hbar}\Big), \tag{4.26}$$

et

$$\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) = \sum_{m=0}^{\infty}\langle\psi_m^\pm|\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)|\psi_m^\pm\rangle, \tag{4.27}$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty}\Big(\langle\psi_m^+|\hat{\Pi}_n|\psi_m^+\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^+T/\hbar} - \langle\psi_m^-|\hat{\Pi}_n|\psi_m^-\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^-T/\hbar}\Big). \tag{4.28}$$

L'opérateur $\hat{\Pi}_n$ va être construit de façon à ce que ses éléments de matrices soient dominants dans les régions de l'espace des phases où les distributions de Husimi $\psi_n(p,q)$ des

états recherchés sont principalement localisées. Par construction, $\hat{\Pi}_n$ remplace la première condition (4.20) et sert à sélectionner le doublet choisi. La différence, ici, est la présence d'une compétition entre les éléments de matrice $\langle\psi_m^\pm|\hat{\Pi}_n|\psi_m^\pm\rangle$ et des exponentielles dépendantes du temps. En effet, pour savoir si les termes impliquant les niveaux n sont dominants dans la somme, on regarde le rapport

$$\frac{\langle\psi_m^\pm|\hat{\Pi}_n|\psi_m^\pm\rangle}{\langle\psi_n^\pm|\hat{\Pi}_n|\psi_n^\pm\rangle}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_m^\pm T/\hbar}}{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^\pm T/\hbar}} \sim \langle\psi_m^\pm|\hat{\Pi}_n|\psi_m^\pm\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_m^\pm - E_n^\pm)T/\hbar}. \tag{4.29}$$

Les éléments de matrice sont exponentiellement petits lorsque $n \neq m$ et proches de l'unité sinon. Dans les expressions (4.26) et (4.28), les exponentielles telles que $E_m^\pm < E_n^\pm$ tendent à dominer la somme lorsque $-\operatorname{Im} T$ augmente arbitrairement. Les niveaux les plus bas donnent alors les contributions les plus importantes aux sommes (4.26) et (4.28). Cependant, on peut s'attendre, une fois $\operatorname{Im} T < 0$ fixé, à retrouver une approximation correcte de la largeur du doublet n en augmentant considérablement la partie réelle du temps $\operatorname{Re} T$ afin de satisfaire $\operatorname{Re} T \gg |\operatorname{Im} T|$. On retrouve alors la limite d'un temps réel. Nous verrons plus tard que cette limite à une influence notable sur l'effet tunnel résonant et qu'elle est responsable de la destruction des pics de résonance présents, par exemple, sur la figure (3.6). En supposant cette dernière inégalité vérifiée, et en rappelant que, par construction $\langle\psi_n^\pm|\hat{\Pi}_n|\psi_n^\pm\rangle \sim 1$, on évalue le rapport des traces

$$\begin{aligned}
\frac{\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)}{\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)} &\simeq \frac{\langle\psi_n^+|\hat{\Pi}_n|\psi_n^+\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^+T/\hbar} - \langle\psi_n^-|\hat{\Pi}_n|\psi_n^-\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^-T/\hbar}}{\langle\psi_n^+|\hat{\Pi}_n|\psi_n^+\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^+T/\hbar} + \langle\psi_n^-|\hat{\Pi}_n|\psi_n^-\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^-T/\hbar}}, && (4.30)\\
&\simeq \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^+T/\hbar} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^-T/\hbar}}{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^+T/\hbar} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^-T/\hbar}}, && (4.31)\\
&= \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}T\Delta E_n/(2\hbar)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\Delta E_n/(2\hbar)}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}T\Delta E_n/(2\hbar)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}T\Delta E_n/(2\hbar)}}, && (4.32)\\
&= \mathrm{i}\tan\left(\frac{T\Delta E_n}{2\hbar}\right). && (4.33)
\end{aligned}$$

Comme précédemment, dans l'hypothèse où la largeur du doublet n est inférieure de plusieurs ordres de grandeurs à la différence d'énergie entre deux niveaux de même parité

$$\frac{|T|\Delta E_n}{2\hbar} \ll 1, \tag{4.34}$$

on effectue un développement de Taylor au premier ordre de la tangente pour finalement obtenir une approximation de la largeur d'un doublet arbitraire

$$\Delta E_n \simeq \Delta_n(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\hbar}{\mathrm{i}T}\frac{\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)}{\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)}. \tag{4.35}$$

L'étape suivante qui apparaît naturellement est le traitement semiclassique des formules (4.24) et (4.35). L'appendice A regroupe presque toutes les informations pour calculer les traces qui interviennent dans (4.24). En effet, nous avons évalué la contribution pour une orbite $\mathfrak{o}$ de longueur nulle (2.64) ou non nulle (2.65) dans l'intégrale (2.59) qui englobe les

deux cas $\mathrm{tr}\,\hat{S}\hat{U}(T)$ et $\mathrm{tr}\,U(T)$. Les traces mises en jeu dans l'approximation (4.35) s'écrivent dans la base des positions $\{|q\rangle\}$

$$\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) = \int \mathrm{d}q\langle q|\hat{A}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)|q\rangle, \tag{4.36}$$

$$= \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q'\Pi_n(q,q')G(\eta q',q,T), \tag{4.37}$$

où $\Pi_n(q,q') = \langle q|\hat{\Pi}_n|q'\rangle$ et $\hat{A}$ et η sont définis comme pour les traces (2.59). L'évaluation de ces expressions est décrite dans l'appendice B.

Jusqu'à maintenant, nous n'avons pas expliqué comment retenir, parmi toutes les trajectoires complexes qui satisfont les conditions de phase stationnaire, quelles sont celles qui apportent une contribution aux traces. La condition nécessaire de retenir des (demi-)orbites périodiques avec un temps de parcours $T = T_{\mathfrak{o}}$ n'est pas suffisante. Il est généralement très difficile d'extraire tous les points critiques complexes qui contribuent à la phase stationnaire même dans le cas d'une simple intégrale oscillante. La difficulté vient du fait que pour connaître tous ces points critiques dominants, il faut savoir comment déformer tout le contour d'intégration afin de passer par chacun de ces points de selle en suivant la pente maximale, ce qui n'est pas un problème trivial. Sans un traitement adapté du chemin du temps pour résoudre ce type d'intégrales, les trajectoires complexes forment des structures très délicates à traiter. Ceci est d'autant plus vrai lorsque l'on sort du cadre des systèmes intégrables comme Shudo et Ikeda l'ont montré dans des systèmes chaotiques où le temps était purement réel [87] [89]. Dans ce dernier cas de figure, on observe numériquement la prolifération d'orbites complexes qui contribuent au calcul semiclassique des propagateurs [88].

Ces raisons nous conduisent à faire un choix sur le chemin complexe du temps. Dans l'évaluation des expressions (2.64) et (2.65), le chemin du temps $[t]$ n'était pas choisi au départ. Alors que les méthodes du type instantons forcent le temps à évoluer uniquement sur l'axe imaginaire, la stratégie proposée ici consiste à garder les orbites $\mathfrak{o}$ périodiques pour lesquelles on peut choisir un chemin complexe du temps $[t]$ tel que l'orbite soit contrainte à maintenir une des variables canoniques dans l'espace des phases réelles, selon le problème étudié. Nous verrons dans le chapitre suivant qu'il sera, par exemple, plus avantageux pour nous de maintenir la position sur l'axe réel ($\mathrm{Im}\,q(s) = 0$) pour l'étude de l'effet tunnel en position dans le double puits tandis qu'il sera plus profitable de maintenir l'impulsion réelle ($\mathrm{Im}\,p(s) = 0$) pour décrire un effet tunnel dynamique pour un pendule simple. Ces orbites complexes $\mathfrak{o}$ doivent contribuer au calcul des traces puisqu'il n'est pas nécessaire de déformer dans le plan complexe la variable canonique que l'on choisit de maintenir réelle. Cependant, pour un chemin du temps $[t]$ donné, il n'existe généralement que quelques points de départ isolés (p_i, q_i) dans l'espace des phases, voire aucun, tels que la trajectoire associée se propage en maintenant la variable canonique choisie réelle. Ceci nous oblige alors à choisir, en général, deux chemins complexes du temps différents pour deux (demi-)trajectoires périodiques $\mathfrak{o}$ différentes. Par exemple, lorsque l'on varie le point de départ $q_i = q$ pour évaluer l'intégrale ($A.18$), il est indispensable de modifier le chemin du temps afin de maintenir la condition $\mathrm{Im}\,q(s) = 0$ sur la trajectoire. La déformation du contour du temps n'est pas problématique puisque les quantités géométriques comme $E_{\mathfrak{o}}$, $\kappa_{\mathfrak{o}}$ ou $S_{\mathfrak{o}}$ restent invariantes tant que le point de départ (point critique de la phase) de la trajectoire

ne croise pas de points de rebroussement.

Le choix de ne retenir uniquement les trajectoires $\mathfrak{o}$ périodiques avec une des variables canoniques réelles dans l'espace des phases n'est certainement pas un choix unique. Cependant, on le justifie par l'idée intuitive que l'effet tunnel doit être décrit à l'aide de trajectoires périodiques qui relient les deux régions concernées de l'espace des phases réel, c'est-à-dire les régions où les distributions de Husimi $\psi_n(p,q)$ sont principalement localisées. Ce principe est décrit pour un doublet arbitraire n par l'opérateur $\hat{\Pi}_n$ qui sélectionne approximativement un ensemble de valeurs de q dans l'intégrale qui correspond à la projection sur l'espace des positions du tore d'énergie E_n concerné par le doublet. Dans le cas du doublet fondamental, nous verrons que la condition (4.20) force les trajectoires sélectionnées à évoluer près d'une séparatrice. Néanmoins, la plupart du temps, nous ne serons pas capable de justifier analytiquement le fait que les autres trajectoires périodiques complexes, c'est-à-dire celles qui n'ont pas au moins une variable canonique qui reste réelle dans l'espace des phases, sont sous dominantes. On le justifiera malgré tout numériquement *a posteriori* en comparant nos résulats aux valeurs exactes obtenues par diagonalisation du hamiltonien [59]. Pour terminer, le critère de sélection que nous avons choisi nous permet de motiver les quatre règles développées par Robbins, Creagh et Littlejohn pour calculer les orbites périodiques complexes qui contribuent à l'évaluation de la trace de la fonction de Green [82]. On peut citer ces règles. La première consiste à inclure dans la somme semiclassique uniquement des orbites périodiques complexes dont le point de départ (qui est le même que le point d'arrivée) est situé sur un tore réel. La seconde règle stipule que la somme n'est effectuée que sur les différentes classes topologiques des orbites périodiques complexes. Nous définirons comme topologiquement différentes, deux trajectoires qui ne traversent pas successivement la même séquence de points de rebroussement dans l'espace des phases (cette définition deviendra plus claire en traitant les exemples du chapitre suivant). La troisième règle impose de choisir les orbites périodiques complexes dont l'action fournit une contribution exponentiellement faible à l'effet tunnel et donc éliminer les contributions non physiques. Enfin, la dernière règle demande à la trajectoire de suivre le sens de propagation défini par les équations d'Hamilton sur chacune des branches.

Chapitre 5

Quelques exemples

Ce chapitre va permettre d'illustrer la méthode de calcul des doublets tunnel que nous venons de mettre en place, à travers plusieurs exemples présentant chacun une facette de l'effet tunnel dans des cas simples.

5.1 Le double puits

Le double puits est l'exemple incontournable lorsque l'on s'intéresse à l'étude de l'effet tunnel et est généralement utilisé pour tester ou comparer une nouvelle description ou méthode de calcul de ce phénomène classiquement interdit. Nous ne dérogerons pas à cette règle et proposons de décrire avec ce modèle la procédure d'utilisation des formules (4.24) et (4.35) dans l'approximation semiclassique $\hbar \to 0$.

Supposons un hamiltonien du type

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2} + V(q), \tag{5.1}$$

où le potentiel $V(q)$ est pair et possède deux minima symétriques localisés en $q = \pm a$. Par souci de simplicité, on choisira $V(\pm a) = 0$.

5.1.1 Formule pour le doublet fondamental $\Delta_0(T)$

Commençons par étudier le cas du doublet fondamental $\Delta E_0 = E_0^- - E_0^+$ à l'aide de la formule (4.24). Afin de justifier les conditions de validité (4.20) et (4.23) de la formule, on trace la figure (5.1) qui représente, à $\hbar$ donné, la valeur absolue de la partie réelle de $\Delta_0(T)$ en fonction des parties réelles et imaginaires du temps T. On constate, au-delà d'une valeur de $-\operatorname{Im} T \sim 1.5$, un plateau indiquant la convergence de la formule vers une valeur limite qui concorde avec la valeur exacte ΔE_0, obtenue par diagonalisation. Le résultat est indépendant de la partie réelle du temps. Les énergies du doublet étant théoriquement réelles, on s'assure numériquement que la partie imaginaire de $\Delta_0(T)$ est négligeable, en module devant la partie réelle.

On a vu au chapitre précédent que pour évaluer semiclassiquement les traces qui interviennent dans (4.24), il fallait chercher un chemin du temps $[t]$ de sorte qu'il existe des

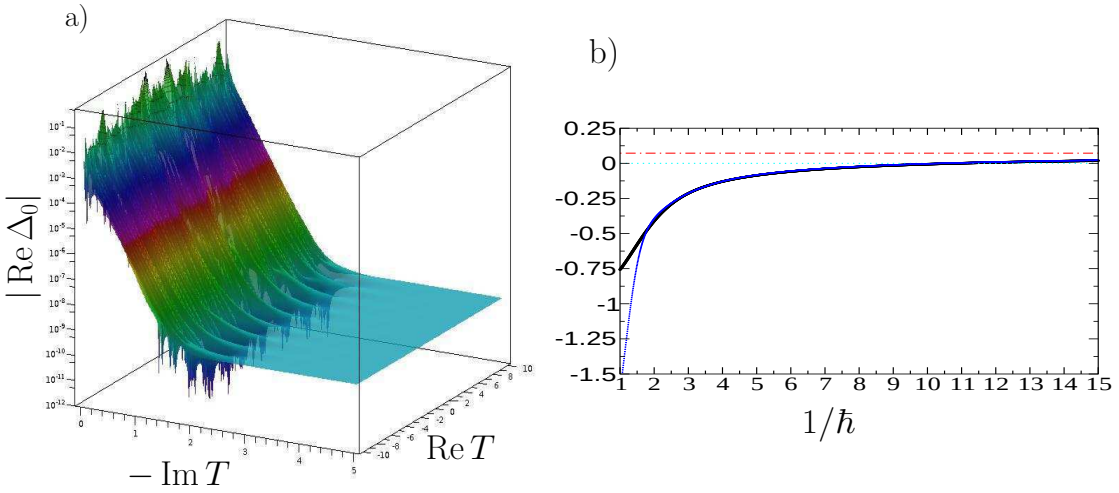


FIG. 5.1: On représente ici le résultat numérique du calcul de la largeur du doublet fondamental pour $V(q) = (q^2 - a^2)^2$ avec $a = 1$ et $\hbar \simeq 1/12$. La figure a) représente la partie réelle $|\operatorname{Re}\Delta_0|$ de la formule (4.24) en fonction de la partie réelle et imaginaire du temps $(\operatorname{Re}T, -\operatorname{Im}T)$. On vérifie ainsi la condition de validité (4.20) qui nous impose d'avoir $-\operatorname{Im}T \gg (1/\omega) = 1/(2\sqrt{2}a) \simeq 0.35$. En effet, on observe que la formule converge au-delà de $-\operatorname{Im}T \sim 1.5$ et ne dépend pas de la partie réelle $\operatorname{Re}T$. Une fois le plateau atteint, on vérifie que la partie imaginaire $\operatorname{Im}\Delta_0$ est négligeable devant la valeur de $\operatorname{Re}\Delta_0 \sim 4.4 \times 10^{-10}$ (qui coïncide avec la valeur « exacte ») et que la condition (4.23) est largement vérifiée. Sur la figure b), on compare le résultat exact ΔE_0 en fonction de $1/\hbar$, obtenu par diagonalisation, avec notre formule et les différentes approximations semiclassiques connues. Les résultats diffèrent uniquement par leur préfacteur et afin de souligner ces différences, on représente en ordonnées le logarithme de la largeur du doublet auquel on soustrait $\Lambda(\hbar) \stackrel{\text{def}}{=} -\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(\hbar\omega/2)/(2\hbar) + \ln(\hbar\omega/\pi)$ où $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ est l'action instanton. La courbe noire épaisse représente le calcul exact par diagonalisation $\ln \Delta E_0 - \Lambda(\hbar)$. La courbe épaisse bleue correspond à $\ln|\Delta_0| - \Lambda(\hbar)$ pour $T \simeq -4\mathrm{i}$ et on constate que les deux courbes coincident très bien au delà de $\hbar \simeq (1/3)$. La droite horizontale bleue en pointillé est égale 0 et représente notre formule semiclassique (5.53), que nous appliquons au doublet fondamental, et correspond à celle de LANDAU [61]. La formule de GARG (1.52) pour le doublet fondamental donne la ligne rouge discontinue égale $\ln\sqrt{\pi/\mathrm{e}} \simeq 0.07$. Enfin la formule semiclassique (5.42) que nous obtenons spécifiquement pour le doublet fondamental donne la constante $\ln\sqrt{\pi} \simeq 0.6$.

(demi-)trajectoires périodiques $\mathfrak{o}$ reliant deux tores de l'espace des phases réel qui gardent la variable canonique $q(s)$ réelle. Pour le doublet fondamental, ces tores sont localisés autour des points d'équilibre ($p = 0, q = \pm a$). Le hamiltonien étant quadratique en impulsion, il existe deux branches $p_\pm(q, E) = \pm\sqrt{2(E - V(q))}$ qui sont réelles dans les régions classiquement autorisées $E > V(q)$ et imaginaires quand $E < V(q)$. À l'aide des équations d'Hamilton, le caractère réel ou imaginaire de l'impulsion va fixer la forme générale que devra avoir le chemin du temps. En effet, d'après (2.34) on a

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} = \frac{1}{\partial_p H}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s} = \frac{1}{p}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s}, \tag{5.2}$$

on voit immédiatement que, comme $q(s)$ doit rester réel, la façon dont doit évoluer le temps dépend uniquement de l'impulsion. Dans une région autorisée, $p(s)$ est réel donc l'évolution du temps est réelle et dans une région classiquement interdite $p(s)$ étant purement imaginaire, le temps évoluera parallèlement l'axe imaginaire. On a dit vouloir rechercher des (demi-)trajectoires périodiques reliant deux tores de l'espace des phases réel avec $q(s)$ réel à chaque instant, alors pour réaliser cette condition le chemin complexe du temps doit nécessairement avoir la forme d'un escalier « descendant » (on rappelle qu'il est nécessaire d'avoir une partie imaginaire du temps qui ne croît pas avec le paramètre s pour garder l'indépendance du contour de l'intégrale de chemin) et le temps ne peut évoluer que par morceaux suivant l'axe réel ou imaginaire. Par conséquent, les (demi-)trajectoires périodiques complexes $\mathfrak{o}$ qui nous intéressent vont correspondre à un assemblage d'orbites qui évoluent en temps réel dans le potentiel $V(q)$ selon l'équation

$$E = \frac{(\operatorname{Re} p)^2}{2} + V(q), \tag{5.3}$$

et d'orbites qui évoluent en temps purement imaginaire dans le potentiel inversé, comme on l'a vu dans la section 4.1, suivant la ligne

$$\tilde{E} \stackrel{\text{def}}{=} -E = \frac{(\operatorname{Im} p)^2}{2} - V(q). \tag{5.4}$$

La dynamique de la variable $q_2(s) = \operatorname{Im} q(s) = 0$ étant triviale dans l'espace des phases, il est naturel de restreindre l'étudie des trajectoires $\mathfrak{o}$ dans un espace des phases à 3 dimensions $(\operatorname{Re} q, \operatorname{Re} p, \operatorname{Im} p)$. En invoquant la conservation de l'énergie le long de la trajectoire, les points de jonction de ces deux catégories d'orbites sont nécessairement sur l'axe $(\operatorname{Re} p = 0, \operatorname{Im} p = 0)$, où se situent les points de rebroussement.

Dans le cas du double puits, on peut distinguer trois types d'orbites primitives (issus des deux catégories d'orbites dont on vient de parler) qui vont permettre de construire n'importe quelles (demi-)trajectoires périodiques complexes qui respectent la condition $\operatorname{Im} q(s) = 0$. En notant les 4 points de rebroussement réels lorsque l'énergie est inférieure à la hauteur de la barrières $E < V_{max}$ dans l'ordre des q croissants $\{-q_r', -q_r, q_r, q_r'\}$, on définit

- les orbites périodiques primitives $\mathfrak{r}$ d'énergie E situées dans le puits de droite qui oscillent entre les points $q_r(E)$ et $q_r'(E)$ avec $(\operatorname{Im} p(s) = 0, \operatorname{Im} q(s) = 0)$.
- les orbites périodiques primitives $\mathfrak{c}$ d'énergie E qui oscillent entre les points $-q_r(E)$ et $q_r(E)$, correspondant à la région centrale du potentiel, avec les contraintes $\operatorname{Re} p(s) = 0$ et $\operatorname{Im} q(s) = 0$.

- les orbites périodiques primitives $\mathfrak{l}$, d'énergie E, associées au puits de gauche, évoluent dans l'intervalle $-q_r'(E) \leqslant q(s) \leqslant q_r(E)$ avec $\operatorname{Im} p(s) = 0$ et $\operatorname{Im} q(s) = 0$.

Les orbites $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ sont symétriques et les unes peuvent être obtenues à partir des autres, grâce à l'opérateur de parité $\hat{S}$. Finalement, chaque trajectoire $\mathfrak{o}$ périodique qui va contribuer aux traces est alors composée d'un enchaînement successif de répétitions de ces trois types d'orbites primitives. Cette construction d'orbite est présentée sur la figure (5.2). On compte, en tout, six branches possibles qu'une trajectoire peut potentiellement emprunter car chacune des trois orbites primitives est composée de deux branches. Le temps complexe $T = T_{\mathfrak{o}}$ d'une (demi-)trajectoire périodique $\mathfrak{o}$ peut être alors évalué en fonction de chacune des périodes des orbites primitives, soit

$$T_{\mathfrak{o}}(E) = w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E) - \mathrm{i}\left(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1-\eta}{4}\right) T_{\mathfrak{c}}(E), \tag{5.5}$$

où $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ sont des entiers positifs ou nuls. Le temps $T_{\mathfrak{c}}(E)$ est la période de l'orbite périodique primitive $\mathfrak{c}$ tandis que $T_{\mathfrak{r}}(E)$ celle de $\mathfrak{r}$. Ces périodes sont réelles et positives. Notons que la période de l'orbite périodique primitive du puits de gauche n'apparaît pas dans l'expression de $T_{\mathfrak{o}}(E)$ simplement parce qu'elle est la même que $T_{\mathfrak{r}}(E)$. L'entier $w_{\mathfrak{r}}$ englobe ainsi les deux contributions. Les entiers respectifs $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ comptent le nombre de tours complets d'orbites primitives que le temps $T_{\mathfrak{o}}(E)$ autorise à effectuer, respectivement, dans les deux puits de $V(q)$ et le puits du potentiel $-V(q)$. On traite encore simultanément le cas de $\operatorname{tr} \hat{U}(T)$ qui donne des trajectoires périodiques ($\eta = +1$) de période $T = T_{\mathfrak{o}}$ et le cas de demi-trajectoires périodiques ($\eta = -1$), qui sont des moitiés de trajectoires périodiques de période $2T$. Le terme $(1-\eta)/4$ est introduit pour des raisons de symétrie. Il explique qu'une trajectoire périodique ($\eta = +1$) doit effectuer un nombre entier de tours (ou aucun) dans le puits inversé $-V(q)$ si on veut qu'elle reboucle et que dans le cas d'une demi-orbite périodique, la trajectoire doit au minimum traverser une fois (aller simple) la région centrale associée à $\mathfrak{c}$.

À chaque fois que l'on pourra construire un chemin du temps $[t]$ de longueur T sous la forme d'un escalier de sorte qu'il existe une (demi-)trajectoire périodique $\mathfrak{o}$ dans l'espace des phases gardant la variable $q(s)$ réelle, cette trajectoire devra être retenue. Deux orbites qui partent d'un point de départ q_i légèrement différents n'auront pas exactement le même chemin du temps $[t]$ et les dimensions des marches de l'escalier devront être légerement ajustées pour maintenir la condition $\operatorname{Im} q(s) = 0$ (figure (5.3)). Cette situation apparaît lorsque l'on évalue les contributions des trajectoires de longueur non nulle à l'intégrale (2.60) où les points critiques sont dégénérés et correspondent au point de départ d'une orbite dominante. Il faut ajuster le chemin du temps pour chaque point critique et sommer leur contributions en calculant l'intégrale sur une branche β de la trajectoire. La sommation de tous ces points sur une branche donne un terme T_β dans la somme $\sum_\beta$ de l'expression (2.65).

Il faut rappeler que le calcul du propagateur semiclassique (2.56) implique une somme sur différentes trajectoires. Ces trajectoires se distinguent par le nombre et l'ordre des points de rebroussement rencontrés le long de l'orbite (différentes énergies sont alors possibles). On doit alors calculer l'intégrale (2.60) pour chacune de ces trajectoires (le calcul de l'intégrale impliquant des contributions du type (2.64) ou (2.65)) pour ensuite les sommer afin d'obtenir l'expression semiclassique de chaque trace dans (4.24). La contribution

totale aux traces des orbites de longueur non nulle correspond alors à la somme des différentes classes topologiques de trajectoires, chacune des classes étant caractérisée de manière unique par une séquence ordonnée des points de rebroussement $[\rho_1, \rho_2, \ldots]$ rencontrés le long des trajectoires de cette classe. Autrement dit, il faudra sommer toutes les combinaisons autorisées de $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ et de chaque branche β où se situe le point de départ de la trajectoire. Ce résulat n'est pas propre au double puits. Plus généralement, en sommant toutes les contributions (2.65), la somme totale des orbites $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle s'écrit

$$\sum_{\mathfrak{s}} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{T_\beta}{\sqrt{-2\mathrm{i}\eta\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\mathrm{d}E_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}T}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}}. \tag{5.6}$$

La double somme indique qu'il faut sommer toutes les combinaisons $[\rho_1, \rho_2, \ldots]$ possibles de chaque section $\mathfrak{s}$ des surfaces d'énergie (plusieurs énergies sont possibles) dans le plan complexe sur lesquelles, en choisissant correctement $[t]$ pour forcer une des variables canoniques à rester réelle, on aura des trajectoires $\mathfrak{o}$ périodiques ($\eta = +1$) de période $T = T_{\mathfrak{o}}$ ou demi-périodiques ($\eta = -1$) de temps de parcours $T = T_{\mathfrak{o}}$ (la trajectoire périodique complète possédant une période de $2T$). L'indice β indique la branche où démarre la trajectoire $\mathfrak{o}$ qui va rencontrer ensuite une succession de points de rebroussement ordonnée exactement comme $[\rho_1, \rho_2, \ldots]$.

Pour comprendre cette somme, revenons à l'exemple du double puits. Si l'énergie E est plus basse que la hauteur V_{max} de la barrière, la section $\mathfrak{s}$ de la surface d'énergie telle que $\operatorname{Im} q(s) = 0$ comporte 4 points de rebroussements réels $(0, \pm q_r(E))$ et $(0, \pm q_r'(E))$ dans l'espace des phases complexe, comme on l'a vu précédemment. Cependant, il n'est pas possible de contruire, pour une énergie donnée, des orbites périodiques avec tous les points de cette section $\mathfrak{s}$ et seules les valeurs de $\operatorname{Re} q$ telles que $-q_r'(E) < \operatorname{Re} q < q_r'(E)$ peuvent servir de points de départ à une orbite périodique $\mathfrak{o}$. Cet ensemble de points appartient nécessairement à un des trois types d'orbites primitives $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$ et $\mathfrak{l}$. Comme nous l'avons dit plus haut, ces trois types d'orbites, pour former une trajectoire périodique $\mathfrak{o}$, doivent se joindre dans l'espace des phases complexe (figure (5.2)). On ne pourra pas relier les orbites $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ ensemble mais les points de rebroussement $(0, \pm q_r(E))$ sont les points sur l'axe $(\operatorname{Re} p = 0, \operatorname{Im} p = 0, \operatorname{Im} q = 0)$ où se joignent les orbites $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{c}$ ainsi que $\mathfrak{c}$ et $\mathfrak{l}$. En fixant $T = T_{\mathfrak{o}}$, on sélectionne un ensemble fini d'énergies E qui vérifient toujours l'équation (5.5) mais les valeurs de $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ seront différentes pour chaque E (puisque les périodes primitives dépendent aussi de E). La somme (5.6) contient alors un nombre fini de termes. Comme le temps T est composé des périodes des orbites primites $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$ et $\mathfrak{l}$, on peut écrire l'action associée aux trajectoires $\mathfrak{o}$ à l'aide des actions $S_{\mathfrak{r}}$ et $S_{\mathfrak{c}}$ des orbites primitives. Pour une trajectoire $\mathfrak{o}$ on a

$$S_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{r}} S_{\mathfrak{r}} + \mathrm{i}\left(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1-\eta}{4}\right) S_{\mathfrak{c}}. \tag{5.7}$$

L'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$ est évalué de la même manière

$$\mu_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{r}} + w_{\mathfrak{c}} + \frac{1-\eta}{2}, \tag{5.8}$$

et est relié au nombre de points de rebroussement rencontrés et dans le cas d'orbites réelles, $2\mu_{\mathfrak{o}}$ correspond à l'indice de Maslov. On peut déjà noter que $S_{\mathfrak{o}}(E)$ et $\mu_{\mathfrak{o}}$ ne dépendent

pas de la branche β où se situe le point de départ de la trajectoire $\mathfrak{o}$, cependant, le point de départ à une influence sur T_β dans la somme (5.6). On rappelle que T_β est le temps mis pour rejoindre deux points de rebroussements successifs, c'est-à-dire le temps passé sur la branche β. Lorsque la trajectoire commence sur une des orbites primitives $\mathfrak{r}$ ou $\mathfrak{l}$, le temps passé sur n'importe laquelle des quatre branches correspond à la même valeur qui est la moitié d'une période de l'orbite primitive, soit $T_\beta = T_\mathfrak{r}/2$. Dans le cas où la trajectoire démarre sur l'orbite $\mathfrak{c}$, alors T_β correspond en, module, au temps d'une demi-période passé dans le potentiel inversé $-V(q)$. Cet intervalle de temps étant par construction, purement imaginaire, on arrive à $T_\beta = -\mathrm{i}T_\mathfrak{c}/2$.

La question est maintenant de savoir, parmi ces trajectoires, lesquelles dominent la somme (5.6). La réponse est simple : les orbites dominantes sont celles avec la plus petite action imaginaire $\operatorname{Im} S_\mathfrak{o}$, les autres étant exponentiellement dominées. Nous allons maintenant montrer que ces trajectoires dominantes sont celles qui ne font qu'un aller-retour dans le puits du potentiel inversé dans le cas des trajectoires périodiques ($\eta = +1$) et un simple aller pour les demi-orbites périodiques ($\eta = -1$). Considérons que, pour une énergie E donnée, la partie $-\operatorname{Im} T$ soit au minimum égale à la période d'oscillation dans le puits du potentiel inversé $-V(q)$. On voit alors d'après (5.5) que pour fabriquer une orbite périodique $\mathfrak{o}$, la trajectoire doit réaliser au moins un aller-retour dans la région centrale et donc que la plus petite valeur pour $w_\mathfrak{c}$ est nécessairement 1. Dans le cas d'une demi-trajectoire périodique $\mathfrak{o}$, un aller simple est au moins nécessaire, alors la plus petite valeur pour $w_\mathfrak{c}$ est $w_\mathfrak{c} = 0$. La condition de validité (4.20) nous impose d'avoir une partie imaginaire du temps suffisamment grande, alors l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ qui compose les trajectoires avec les plus petits $w_\mathfrak{c}$ sont très proches des séparatrices décrites par l'équation $\operatorname{Im} p = \pm\sqrt{2V(q)}$. Les orbites primitives $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ de ces trajectoires vivent alors nécessairement autour des points d'équilibre ($p = 0, q = \pm a$). Il faut montrer que, pour T donné, ces trajectoires possèdent la plus petite action imaginaire $\operatorname{Im} S_\mathfrak{o}$ comparées à celles impliquant des répétitions de l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ (d'énergie E plus grande). Pour cela, on commence par noter que, une fois le temps T fixé, la partie imaginaire de l'action d'une trajectoire $\mathfrak{o}$ s'écrit comme

$$\operatorname{Im} S_\mathfrak{o} = (w_\mathfrak{c} + \frac{1-\eta}{4})S_\mathfrak{c} \overset{(5.5)}{=} -\frac{S_\mathfrak{c}}{T_\mathfrak{c}} \operatorname{Im} T. \tag{5.9}$$

En rappelant que dans le potentiel inversé l'énergie $\tilde{E}$ est égale à $-E$ et que $-V_{max} < \tilde{E} < 0$, on peut écrire l'action d'une orbite primitive $\mathfrak{c}$ d'énergie $\tilde{E}$ comme

$$S_\mathfrak{c}(\tilde{E}) = 4\int_0^{q_r(-\tilde{E})} \sqrt{2(\tilde{E} + V(q))}\mathrm{d}q - \tilde{E}T_\mathfrak{c}(\tilde{E}). \tag{5.10}$$

On dérive maintenant l'expression

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{E}}\left(\frac{S_\mathfrak{c}(\tilde{E})}{T_\mathfrak{c}(\tilde{E})}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tilde{E}}\left(\frac{4}{T_\mathfrak{c}(\tilde{E})}\int_0^{q_r(-\tilde{E})} \sqrt{2(\tilde{E} + V(q))}\mathrm{d}q - \tilde{E}\right), \tag{5.11}$$

$$= -\frac{4}{T_\mathfrak{c}^2(\tilde{E})}\frac{\mathrm{d}T_\mathfrak{c}(\tilde{E})}{\mathrm{d}\tilde{E}}\int_0^{q_r(E)} |p(q,E)|\mathrm{d}q < 0. \tag{5.12}$$

On voit alors d'après (5.9) que, comme $S_\mathfrak{c}/T_\mathfrak{c}$ est une fonction décroissante de $\tilde{E}$, lorsque $\tilde{E}$ croît, $\operatorname{Im} S_\mathfrak{o}$ décroît et atteint sa valeur minimale lorsque $E \to 0^+$. On vient alors de

montrer que les trajectoires les plus proches des séparatrices (c'est-à-dire d'énergie E la plus basse) correspondant au trajet minimum à travers le puits du potentiel inversé ($w_{\mathfrak{c}} = 0$ pour $\eta = -1$ et $w_{\mathfrak{c}} = 1$ pour $\eta = +1$) sont les trajectoires $\mathfrak{o}$ dont la partie imaginaire de l'action est la plus petite. Ces trajectoires seront donc, parmi les contributions de longueur non nulle, exponentiellement dominantes dans le calcul des traces $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{U}(T)$ et $\operatorname{tr} \hat{U}(T)$.

On commence par traiter la trace $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{U}(T)$. Les contributions principales viendront donc des demi-trajectoires périodiques $\mathfrak{o}$ d'énergie E telles que

$$\operatorname{Im} T = -\frac{T_{\mathfrak{c}}(E)}{2}, \qquad (w_{\mathfrak{c}} = 0). \tag{5.13}$$

Il faut cependant être prudent car pour une énergie E donnée qui vérifie (5.13), la partie réelle du temps ne peut pas prendre n'importe quelle valeur. Il faut adapter $\operatorname{Re} T$ de telle façon à ce qu'elle soit égale à un nombre entier de période primitive $T_{\mathfrak{r}}(E)$. Les chemins du temps T des trajectoires $\mathfrak{o}$ qui contribuent à $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{U}(T)$ devront être choisis comme

$$T = T_{\mathfrak{o}}(E) = w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E) - \mathrm{i}\frac{T_{\mathfrak{c}}(E)}{2}, \tag{5.14}$$

avec la condition $\operatorname{Im} q(s) = 0$. Le chemin du temps $[t]$ ressemble dans ce cas à un « escalier ne possédant qu'une seule marche » comme présenté sur la figure (5.3). La condition (4.20) est ainsi d'autant plus vérifiée que l'énergie E est petite. Puisque l'on ne retient qu'une énergie E dans les contributions dominantes, il n'existe alors plus qu'un seul terme dans la somme $\sum_{\mathfrak{s}}$ dans (5.6). Il reste à expliciter la somme sur les combinaisons des points de rebroussement.

On présente maintenant les différentes classes topologiques des trajectoires $\mathfrak{o}$ qui apparaissent dans (5.6) :

- Une trajectoire qui part d'un point situé sur la branche supérieure $\operatorname{Im} p > 0$ de $\mathfrak{c}$ va atteindre le premier point de rebroussement ρ_1 $(p = 0, q = q_r(E))$ puis effectuer $w_{\mathfrak{r}}$ tours sur $\mathfrak{r}$ en croisant alternativement les points de rebroussement $(p = 0, q = q_r'(E))$ et $(p = 0, q = q_r(E))$ avant de retourner sur la branche inférieure $\operatorname{Im} p < 0$ de $\mathfrak{c}$ jusqu'au point symétrique du point de départ. Cette classe de trajectoire compte pour un terme $T_\beta = -\mathrm{i}T_{\mathfrak{c}}/2$ dans la somme (5.6).
- Une trajectoire qui part d'un point situé sur la branche inférieure $\operatorname{Im} p < 0$ de $\mathfrak{c}$ va suivre le parcours symétrique des orbites décrites dans le cas précédent. Elle va premièrement atteindre le point de rebroussement ρ_1 $(p = 0, q = -q_r(E))$ puis tourner $w_{\mathfrak{l}}$ fois dans le puits de gauche $\mathfrak{l}$ en traversant alternativement les points de rebroussement $(p = 0, q = -q_r'(E))$ et $(p = 0, q = -q_r(E))$ pour enfin retourner sur la branche $\operatorname{Im} p > 0$ de l'orbite primitive centrale $\mathfrak{c}$ jusqu'au point symétrique du point de départ. Cette classe de trajectoires compte le même terme $T_\beta = -\mathrm{i}T_{\mathfrak{c}}/2$ dans la somme que le cas précédent.
- Une trajectoire qui part de la branche supérieure $\operatorname{Re} p > 0$ du puits de droite $\mathfrak{r}$ traverse en premier le point de rebroussement $\rho_1 = (0, q_r'(E))$ puis le second $\rho_2 = (0, q_r(E))$. La trajectoire effectue ensuite k tours toujours dans le puits de droite puis traverse la branche inférieure de $\mathfrak{c}$ pour terminer par tourner $w_{\mathfrak{r}} - k - 1$ fois dans le puits de gauche $\mathfrak{l}$ et rejoindre le point symétrique du point de départ. On comprend bien que l'on peut choisir le nombre de tours dans chaque puits $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ en prenant $k = 0 \ldots w_{\mathfrak{r}} - 1$.

On peut ainsi former $w_{\mathfrak{r}}$ classes topologiques de trajectoires différentes. En partant de la branche inférieure de $\mathfrak{r}$, on peut reproduire un schéma similaire qui conduit au même résultat, à savoir que l'on peut compter encore $w_{\mathfrak{r}}$ autres classes topologiques. Chaque classe compte pour un terme $T_\beta = T_{\mathfrak{r}}/2$, donc la contribution totale pour les deux branches du puits de droite $\mathfrak{r}$ sont $(2w_{\mathfrak{r}})T_{\mathfrak{r}}/2 = w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}$.

- Par symétrie, on peut réaliser le même raisonnement que pour le puits de droite $\mathfrak{r}$ avec le puits de gauche $\mathfrak{l}$. On trouve encore $2w_{\mathfrak{r}}$ classes topologiques différentes qui donnent alors la contribution $w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}$ dans la somme.

La somme restante $\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]}$ dans (5.6) n'affecte que T_β puisque l'énergie et $w_{\mathfrak{r}}$ sont maintenant donnés, $S_{\mathfrak{o}}$ et $\mu_{\mathfrak{o}}$ sont donc fixés. Finalement, la somme totale des différentes classes topologiques mène à

$$\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} T_\beta = -\mathrm{i}\frac{T_{\mathfrak{c}}(E)}{2} - \mathrm{i}\frac{T_{\mathfrak{c}}(E)}{2} + w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E) + w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E) = 2T. \tag{5.15}$$

Avant de donner la somme finale sur les trajectoires de longueur non nulle dominantes qui contribuent à la trace $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T)$, on analyse la contribution des trajectoires de longueur nulle. Ce sont les points fixes de la dynamique et dans le cas de $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T)$, le seul point d'équilibre qui contribue est l'origine $(p = 0, q = 0)$ (il faut que $(-p_i, -q_i) = (p_f, q_f)$) avec l'énergie $H(0,0) = V_{max}$. D'après (5.12), $S_{\mathfrak{c}}/T_{\mathfrak{c}}$ est une fonction décroissante de $\tilde{E}$ et lorsque $\tilde{E} \to -V_{max}$, $\operatorname{Im} S_{\mathfrak{o}}$ tend vers sa valeur maximale. Ce point d'équilibre donne alors une contribution sous dominante en comparaison des trajectoires de longueur non nulle. La contribution totale à la trace $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T)$, composée alors uniquement de demi-trajectoires périodiques $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle telle que $w_{\mathfrak{c}} = 0$, devient

$$\operatorname{tr}\hat{S}\hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{2T(-1)^{w_{\mathfrak{r}}+1}}{\sqrt{2\mathrm{i}\hbar\pi}}\sqrt{\frac{\mathrm{d}E_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}T}}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}}, \tag{5.16}$$

où la demi-trajectoire périodique $\mathfrak{o}$ d'énergie $E_{\mathfrak{o}}$ est définie par le temps

$$T = w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E) - \frac{\mathrm{i}}{2}T_{\mathfrak{c}}(E) = w_{\mathfrak{r}}2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)} \frac{\mathrm{d}q}{\sqrt{2(E-V(q))}} - \frac{\mathrm{i}}{2}4\int_0^{q_r(E)} \frac{\mathrm{d}q}{\sqrt{2(V(q)-E)}} \tag{5.17}$$

et l'action

$$S_{\mathfrak{o}}(E) = w_{\mathfrak{r}}S_{\mathfrak{r}}(E) + \frac{\mathrm{i}}{2}S_{\mathfrak{c}}(E) \tag{5.18}$$

avec

$$S_{\mathfrak{r}}(E) + ET_{\mathfrak{r}}(E) = \tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E) \overset{\text{def}}{=} 2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)} \sqrt{2(E-V(q))}\mathrm{d}q, \tag{5.19}$$

$$S_{\mathfrak{c}}(E) - ET_{\mathfrak{c}}(E) = \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) \overset{\text{def}}{=} 4\int_0^{q_r(E)} \sqrt{2(V(q)-E)}\mathrm{d}q \tag{5.20}$$

où on définit $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}$ et $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ comme les actions réduites des orbites primitives $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{c}$.

Il reste à déterminer les contributions à la trace $\operatorname{tr}\hat{U}(T)$. En utilisant les relations (5.10) et (5.12), on montre de la même manière que les contributions dominantes proviennent des points fixes et non des orbites périodiques $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle qui doivent nécessairement effectuer un aller-retour dans le puits du potentiel inversé $-V(q)$. Il y a trois points

d'équilibre $\mathfrak{e} = \{(p = 0, q = 0), (p = 0, q = \pm a)\}$. Encore une fois, en utilisant (5.10) et (5.12), on montre que le point d'équilibre instable fournit une contribution sous dominante. L'exposant de LYAPUNOV des deux points stables $(0, \pm a)$ est $\lambda_{\mathfrak{e}} = \mathrm{i}\omega$ où ω correspond à la fréquence des oscillations au voisinage des points stables. La trace $\operatorname{tr}\hat{U}(T)$ est donc dominée par ces deux points stables et ils fournissent la même contribution du type (2.64)

$$\operatorname{tr}\hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)H(0,a)T}}{\mathrm{e}^{\lambda_a T/2} - \mathrm{e}^{-\lambda_a T/2}} + \frac{\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)H(0,-a)T}}{\mathrm{e}^{\lambda_{-a} T/2} - \mathrm{e}^{-\lambda_{-a} T/2}}, \tag{5.21}$$

$$\overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{1}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega T/2} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T/2}} + \frac{1}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega T/2} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T/2}}, \tag{5.22}$$

$$\overset{\hbar\to 0}{\sim} 2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T/2}. \tag{5.23}$$

Cette dernière expression aurait pu être dérivée directement d'après la somme (4.17) avec la condition (4.20) et en notant que $E_0^+ \sim E_0^- \sim \hbar\omega/2$. L'expression de la largeur du doublet fondamental est donnée en regroupant les expressions (4.24), (5.16) et (5.23)

$$\Delta_0(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \sqrt{\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\pi}} \left(\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}E}\right)^{-\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-[\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)+(E-\hbar\omega/2)T_{\mathfrak{c}}(E)]/(2\hbar)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}w_{\mathfrak{r}}[\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)+(E-\hbar\omega/2)T_{\mathfrak{r}}(E)-\pi\hbar]/\hbar}. \tag{5.24}$$

L'objectif est de retrouver les formules habituelles de la largeur du doublet fondamental (1.52) et (1.53). Pour cela, on choisit de faire un développement de TAYLOR autour de $E \to 0^+$ des grandeurs $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$ et $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$ qui deviennent

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) = \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(0) + \frac{4E}{\omega}\ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega}\right) - \frac{2(2A+1)}{\omega}E + \mathrm{o}(E), \tag{5.25}$$

$$\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E) = \frac{2\pi E}{\omega} + BE^2 + \mathrm{o}(E^2), \tag{5.26}$$

avec

$$A \overset{\text{def}}{=} \int_0^a \left(\frac{\omega}{\sqrt{2V(q)}} - \frac{1}{a-q}\right)\mathrm{d}q, \tag{5.27}$$

$$B \overset{\text{def}}{=} \frac{\pi}{24\omega^7}\left[5(V^{(3)}(a))^2 - 3\omega^2 V^{(4)}(a)\right]. \tag{5.28}$$

Les exposants entre parenthèses indiquent l'ordre de la dérivée sur $V(q)$. Le développement des expressions (5.25) et (5.26) n'étant pas complètement trivial, on reporte les démonstrations dans l'appendice C. On commence par évaluer la racine carré du préfacteur de (5.24). Pour cela, on dérive (5.25) et (5.26) par rapport à l'énergie, ce qui donne

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E} \simeq \frac{4}{\omega}\ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega}\right) - \frac{4A}{\omega}, \tag{5.29}$$

$$\overset{(5.20)}{=} -T_{\mathfrak{c}}(E) = 2\operatorname{Im}T \tag{5.30}$$

et

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}}{\mathrm{d}E} \simeq \frac{2\pi}{\omega} + 2BE, \tag{5.31}$$

$$\overset{(5.19)}{=} T_{\mathfrak{r}}(E) \tag{5.32}$$

En égalisant (5.29) et (5.30), on peut extraire E et observer un comportement exponentiel en fonction de $\operatorname{Im} T$

$$E \simeq 2a^2\omega^2 \mathrm{e}^{(2A+\omega \operatorname{Im} T)}. \tag{5.33}$$

On dérive ensuite les périodes des orbites primitives $\mathfrak{c}$ et $\mathfrak{r}$ par rapport à l'énergie

$$\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{c}}(E)}{\mathrm{d}E} \overset{(5.29)}{=} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\left[\frac{4A}{\omega} - \frac{2}{\omega}\ln\left(\frac{E}{2a^2\omega^2}\right)\right] = -\frac{2}{\omega E}, \tag{5.34}$$

$$\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{r}}(E)}{\mathrm{d}E} \overset{(5.31)}{=} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\left[\frac{2\pi}{\omega} + 2BE\right] = 2B. \tag{5.35}$$

Finalement, on peut calculer la dérivée du temps de parcours (5.14) de l'orbite $T_{\mathfrak{o}}$ par rapport à l'énergie

$$\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}E} = w_{\mathfrak{r}}\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{r}}}{\mathrm{d}E} - \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E} \simeq -\frac{\mathrm{i}}{2}\frac{\mathrm{d}T_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E} \overset{(5.34)}{\simeq} \frac{\mathrm{i}}{\omega E}. \tag{5.36}$$

On a retenu seulement la dérivée de la période $T_{\mathfrak{c}}$ dans (5.36) puisque lorsque l'énergie E est très petite, l'approximation harmonique nous dit que la période d'oscillation $T_{\mathfrak{r}}$ autour des points d'équilibre $(p, q) = (0, \pm a)$ ne dépend pas de l'énergie au premier ordre. Enfin, en injectant (5.25), (5.26), (5.33) et (5.36) dans (5.24), on obtient

$$\Delta_0 \overset{\hbar\to 0}{\sim} \sqrt{\frac{4\hbar a^2\omega^3}{\pi}}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{E/(\hbar\omega)}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(0)/(2\hbar)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}w_{\mathfrak{r}}BE(\hbar\omega-E)/\hbar}. \tag{5.37}$$

L'expression de la largeur du doublet obtenue peut être comparée formellement à son développement semiclassique

$$\Delta_0 \sim \exp\left(a_0(E)/\hbar + a_1(E)\ln(\hbar) + a_2(E)\hbar + \mathrm{o}(1)\right). \tag{5.38}$$

À l'aide de la condition (4.20), la forme de l'énergie (5.33) nous assure que E est exponentiellement faible et donc par association, on arrive à

$$a_0(0) = \frac{\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{2}, \qquad a_1(0) = \frac{1}{2}. \tag{5.39}$$

On remarque que l'expression de la largeur du doublet contient une exponentielle complexe. Afin d'obtenir $a_2(0)$, on impose à l'expression (5.37) d'être réelle à tous les ordres en $\hbar$. En particulier, à partir de l'équation (5.24) il vient naturellement la condition de quantification EBK (1.22) pour le niveau d'énergie fondamental dans les puits $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$

$$\tilde{S}_r(E) = \pi\hbar \Rightarrow E = \frac{\hbar\omega}{2} + \mathrm{o}(\hbar). \tag{5.40}$$

On obtient alors une condition plus précise sur la partie imaginaire du temps à imposer

$$\operatorname{Im} T = -\frac{1}{2}T_{\mathfrak{c}}(\hbar\omega/2) = \frac{2A}{\omega} - \frac{1}{\omega}\ln\left(\frac{\hbar}{4a^2\omega}\right). \tag{5.41}$$

Finalement, en remplaçant (5.40) dans la formule (5.24), on élimine la dépendance explicite en temps et on arrive à

$$\Delta_0 \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(\hbar\omega/2)/(2\hbar)} \overset{(5.25)}{=} 2a\omega\sqrt{\frac{\hbar e\omega}{\pi}}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(0)/(2\hbar)}. \tag{5.42}$$

Ces expressions sont proches des formules (1.52) et (1.53) obtenues par GARG en utilisant la formule d'HERRING [36] et par COLEMAN à l'aide des instantons [22]. En effet, elles diffèrent d'un facteur $\sqrt{\mathrm{e}}$ de la dernière expression de (5.42). Cet écart provient des différentes approximations et développements asymptotiques utilisés pour obtenir ces expressions et apparaît au troisième ordre dans le développement JWKB (5.38). Nous allons voir que la formule $\Delta_n(T)$ développée pour un doublet arbitraire va fournir un résultat plus précis pour le doublet fondamental.

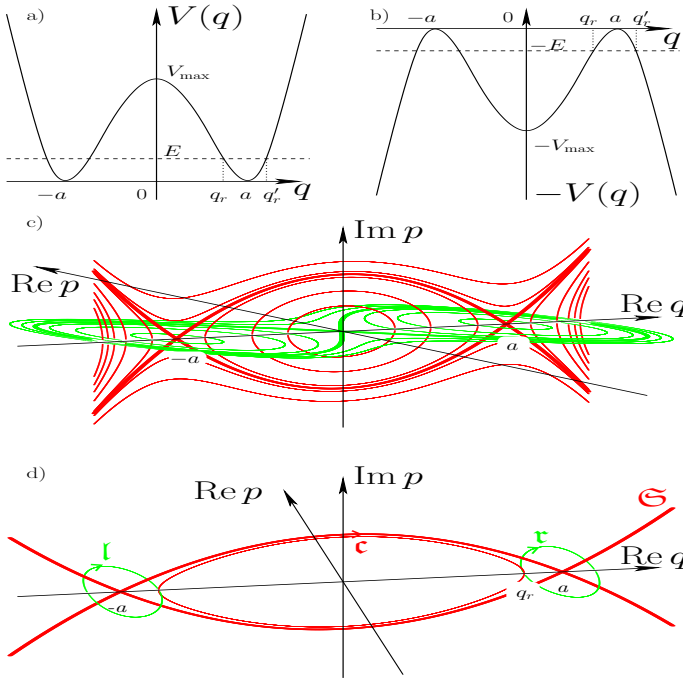


FIG. 5.2: On représente en a) (respectivement en b)) le potentiel (respectivement le potentiel inversé) correspondant au double puits défini dans la figure (5.1). La condition de maintenir $\operatorname{Im} q(s) = 0$ force les trajectoires qui contribuent à l'approximation semiclassique de la formule de traces sont confinées dans l'espace des phases $3D$ $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q, \operatorname{Im} p)$ (figure c)). Les trajectoires dans le potentiel $V(q)$ sont dans le plan $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q)$ tandis qu'on représente le portrait du potentiel inversé dans le plan $(\operatorname{Im} p, \operatorname{Re} q)$. Enfin la figure d) montre comment construire une trajectoire complexe périodique en concaténant des orbites primitives $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$ et $\mathfrak{l}$ qui se rejoignent aux points de rebroussement $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q) = (0, \pm q_r)$. Les séparactrices sont représentées par les lignes rouges épaisses dénotées $\mathfrak{S}$. On constate assez naturellement que l'approche proposée ici englobe la théorie des instantons. En effet, les instantons correspondent à la limite où la partie réelle du temps est exactment nulle et la partie imaginaire tend à l'infini. Dans ce cas, les orbites primitives $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ tend à se rapprocher des points d'équilibre stables $\pm a$. D'un autre coté, les orbites primitives $\mathfrak{c}$, associées au potentiel inversé, se rapprochent des séparatrices $\mathfrak{S}$ et mettent de plus en plus de temps pour passer d'un point stable à l'autre. De cette manière, seul le doublet fondamental est accessible.

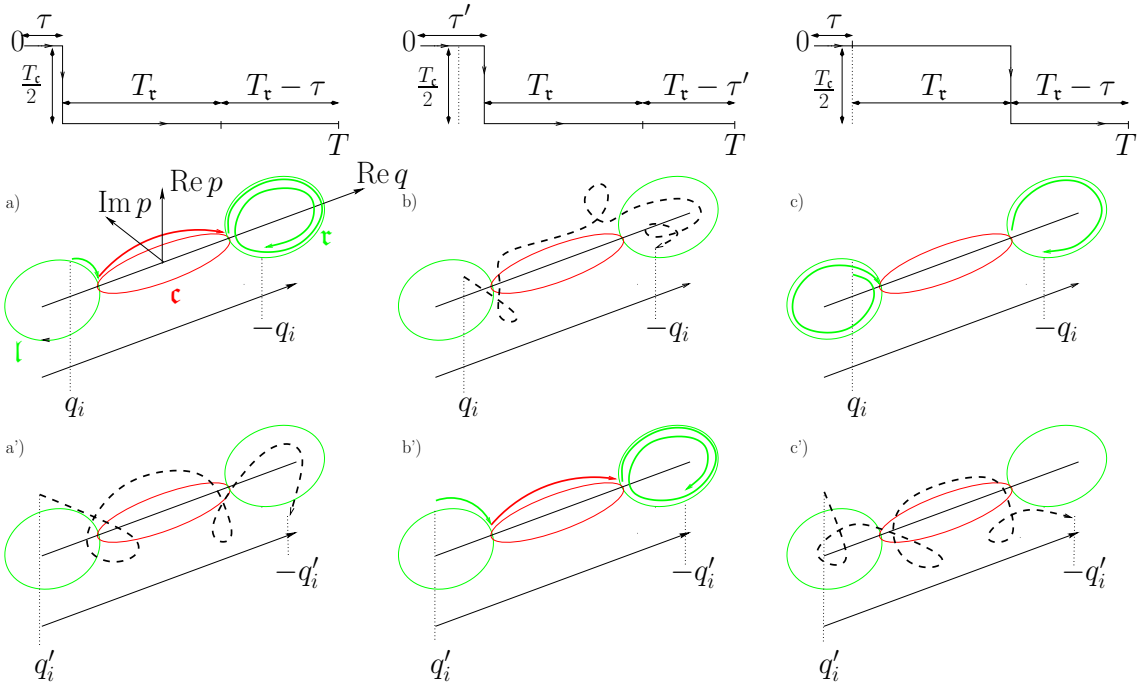


FIG. 5.3: On illustre ici le fait que le chemin du temps doit être adapté lorsque l'on modifie légèrement le point de départ d'une orbite $\mathfrak{o}$. On utilise le double puits présenté sur la figure (5.2) et on choisit un chemin du temps $[t]$ composé uniquement d'une seule marche tel que $w_\mathfrak{c} = 0$ et $w_\mathfrak{r} = 2$, c'est-à-dire que $T_\mathfrak{o}(E) = 2T_\mathfrak{r}(E) - \mathrm{i}T_\mathfrak{c}(E)/2$ avec $0 < E < V_{max}$. Dans ce cas, il n'existe qu'une seule demi-trajectoire périodique d'énergie E qui connecte un tore réel à son symétrique en gardant $\mathrm{Im}\, q = 0$, en particulier son point de départ est défini de manière unique. La figure a) représente la demi-trajectoire périodique qui part de (p_i, q_i) sur $\mathfrak{l}$, arrive au point de rebroussement $-q_r$ au bout d'un temps τ puis traverse une seule fois le potentiel retourné, suivant $\mathfrak{c}$, en un temps $T_\mathfrak{c}(E)/2$. Enfin, elle effectue, en un temps $2T_\mathfrak{r} - \tau$, un tour complet sur le tore de droite $\mathfrak{r}$ en plus du bout d'orbite primitive nécessaire pour atteindre le point symétrique $-q_i$. Si on choisit une condition initiale $q_i' < q_i$ légèrement différente, le chemin du temps n'est plus adapté pour maintenir $\mathrm{Im}\, q = 0$. La demi-trajectoire périodique n'est plus confinée dans l'espace des phases $3D$ $(\mathrm{Re}\, p, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, p)$ et connecte les points (p_i', q_i') et $(-p_i', -q_i')$ en un temps T pour un certain p_i'. On projette cette trajectoire (en pointillé) sur la figure a'). En modifiant légèrement τ en $\tau' > \tau$, on retrouve une demi-trajectoire périodique qui satisfait $\mathrm{Im}\, q = 0$ (figure b')). En revanche, la trajectoire qui avait pour point de départ q_i n'est maintenant plus confinée dans l'espace des phases $(\mathrm{Re}\, p, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, p)$. Enfin, on remarque qu'en ajoutant à τ exactement une période $T_\mathfrak{r}$, il existe encore une demi-trajectoire périodique partant de (p_i, q_i) et terminant à $(-p_i, -q_i)$ (figure c)) mais cette fois le tour complet n'est plus effectué sur $\mathfrak{r}$ mais $\mathfrak{l}$. Les deux trajectoires a) et c) sont cependant topologiquement distinctes et ce changement de topologie apparaît lorsque la modification du chemin du temps $[t]$ est suffisamment grande pour que le point de départ q_i traverse une bifuraction (points de rebroussement).

5.1.2 Formule pour un doublet arbitraire $\Delta_n(T)$

La généralisation (4.35) de la formule pour le doublet fondamental (4.24) nous permet de calculer semiclassiquement la largeur d'un doublet arbitraire d'ordre n à l'aide d'un opérateur $\hat{\Pi}_n$ qui sélectionne le niveau souhaité. Comme décrit dans l'appendice B, on choisit de représenter ces opérateurs à l'aide de quasimodes $|\Phi_n\rangle$ d'énergie E_n pour calculer les intégrales (4.37). On travaillera avec des systèmes unidimensionnels dont les surfaces d'énergie sont composées seulement de deux branches.

On distingue chacune des traces $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ et $\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$. Les contributions dominantes obtenues pour la trace $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ proviennent des trajectoires $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle qui relient un tore réel d'énergie E_n à son tore symétrique ($\eta = -1$). Comme nous l'avons décrit dans l'appendice B, ces trajectoires ne sont plus nécessairement symétriques et dépendent uniquement de la branche de départ β et d'arrivée β'. La somme sur toutes les classes topologiques de trajectoires $\mathfrak{o}$ possibles, définies par l'ordre des points de rebroussement rencontrés, donne

$$\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{1}{2}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} \mathrm{i}(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_\beta,E_n)}\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_nT} \tag{5.43}$$

où b_β et $b_{\beta'}$ sont les points de référence des branches β et β' qui définissent le quasimode $|\Phi_n\rangle$. Dans le cas de la trace $\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$, on utilisera la définition donnée par l'équation (4.26) pour écrire

$$\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\simeq} \langle\psi_n^+|\Pi_n|\psi_n^+\rangle\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_n^+T} + \langle\psi_n^-|\Pi_n|\psi_n^-\rangle\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_n^-T} \simeq 2\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}. \tag{5.44}$$

Finalement, avec (4.35), la forme semiclassique de la largeur du doublet n devient

$$\Delta_n(T) \sim \frac{\hbar}{2T}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]}(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_\beta,E_n)}. \tag{5.45}$$

Pour le double puits, on va choisir, par exemple, un quasimode localisé dans le puits de droite sur le tore $\mathfrak{r}$ d'énergie E_n. Comme nous l'avons déjà vu, un tel tore est composé de deux branches ($\beta = \pm$) définies comme $p_\pm = \pm\sqrt{2(E_n - V(q))}$. Ces branches se rejoignent aux points de rebroussement $q_r(E_n)$ et $q_r'(E_n)$. On peut alors choisir un point de base commun à ces deux branches correspondant à un de ces points de rebroussement, disons $b_\pm = q_r(E_n)$. Pour le tore symétrique $\mathfrak{l}$, correspondant au puits de gauche, nous choisirons $b_\pm = -q_r(E_n)$. Ces choix ont l'avantage de rendre les grandeurs géométriques $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}$ et $\mu_{\mathfrak{o}}$ maintenant indépendantes de la branche de départ β et d'arrivée β' de la trajectoire $\mathfrak{o}$. La condition de maintenir la variable $q(s)$ réelle impose de choisir le temps de parcours de la trajectoire du tore $\mathfrak{r}$ au tore $\mathfrak{l}$, en fonction des périodes $T_{\mathfrak{r}}$ et $T_{\mathfrak{c}}$ des orbites périodiques primitives $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{c}$, sous la forme

$$T = T_{\mathfrak{o}}(E_n) = \tau + w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E_n) - \mathrm{i}(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1}{2})T_{\mathfrak{c}}(E_n), \tag{5.46}$$

où $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ sont des entiers naturels. Les trajectoires $\mathfrak{o}$ qui contribuent n'étant plus nécessairement symétriques, l'intervalle de temps τ, inférieur au temps d'une période $T_{\mathfrak{r}}(E_n)$,

sert à « compléter le temps manquant » pour rejoindre le point de départ (p_i, q_i) et d'arrivée (p_f, q_f). L'action $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}$ et l'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$ des trajectoires $\mathfrak{o}$ sont alors

$$\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'}, b_\beta, E_n) = w_{\mathfrak{r}}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n) + \mathrm{i}(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1}{2})\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n), \tag{5.47}$$

$$\mu_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{r}} + w_{\mathfrak{c}} + 1 \tag{5.48}$$

où $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}$ et $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ sont les actions réelles associées aux orbites primites $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{c}$ définies en (5.19) et (5.20). De la même manière que dans le cas du doublet fondamental, les trajectoires dominantes seront celles avec l'action imaginaire la plus petite. On sélectionne alors les orbites $\mathfrak{o}$ ne traversant qu'une seule fois le puits du potentiel inversé $-V(q)$ en imposant $w_{\mathfrak{c}} = 0$. Le chemin du temps complexe $[t]$ ressemble alors à « une marche d'escalier ». L'équation (5.45) devient

$$\Delta_n(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{2T} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{w_{\mathfrak{r}}+2} \mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/(2\hbar)} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar) w_{\mathfrak{r}} \tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)}. \tag{5.49}$$

On remarque, ici encore, que l'expression (5.49) contient des exponentielles complexes et afin de s'assurer que la largeur du doublet reste réelle, on impose de nouveau une condition de quantification, comme en (5.40), sur l'action réelle de l'orbite primitive $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}$ d'énergie E_n

$$\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n) = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots. \tag{5.50}$$

On remarque ensuite que, pour E_n fixé, il est possible de s'approcher de la limite d'un temps purement réel en forçant $w_{\mathfrak{r}}$ à être très grand, impliquant ainsi $\mathrm{Re}\, T \gg |\,\mathrm{Im}\, T| = T_{\mathfrak{c}}/2$. De cette manière, on peut écrire en première approximation

$$T_{\mathfrak{o}}(E_n) = T = \tau + w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E_n) - \mathrm{i}\frac{T_{\mathfrak{c}}(E_n)}{2} \sim w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E_n). \tag{5.51}$$

L'expression semiclassique de la largeur du doublet devient

$$\Delta_n(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{2 w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E_n)} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} \mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/(2\hbar)}. \tag{5.52}$$

Il reste à effectuer la somme sur toutes les configurations topologiques différentes de trajectoires $\mathfrak{o}$ d'énergie E_n reliant le tore $\mathfrak{r}$ au tore $\mathfrak{l}$ en un temps $T_{\mathfrak{o}}(E_n)$ fixé. Dans l'appendice B, l'intégration de (4.37) nous indique que le point de départ d'une trajectoire $\mathfrak{o}$ qui contribue se situe sur une des branches $\beta = \pm$ de l'orbite primitive $\mathfrak{r}$. Les trajectoires recherchées n'étant pas nécessairement demi-périodiques, le point d'arrivée ne se situe pas nécessairement sur la branche opposée de celle du point de départ sur le tore symétrique (ce sera le cas pour n'importe quel point de départ uniquement si $\tau = 0$). Dans ce cas, il faut envisager les quatre possibilités suivantes :

- une trajectoire partant de la branche $\beta = +$ du tore $\mathfrak{r}$ arrive sur la branche $\beta = -$ du tore symétrique $\mathfrak{l}$,
- une trajectoire partant de la branche $\beta = +$ du tore $\mathfrak{r}$ arrive sur la branche $\beta = +$ du tore symétrique $\mathfrak{l}$,

- une trajectoire partant de la branche $\beta = -$ du tore $\mathfrak{r}$ arrive sur la branche $\beta = -$ du tore symétrique $\mathfrak{l}$,
- une trajectoire partant de la branche $\beta = +$ du tore $\mathfrak{r}$ arrive sur la branche $\beta = +$ du tore symétrique $\mathfrak{l}$.

Pour chacun de ces quatre cas, on peut encore effectuer $w_{\mathfrak{r}} + 1$ combinaisons différentes de trajectoires $\mathfrak{o}$ en échangeant les r tours d'orbites primitives $\mathfrak{r}$ et les $w_{\mathfrak{r}} - r$ tours sur $\mathfrak{l}$ que l'on peut faire en maintenant $w_{\mathfrak{r}}$ fixé. L'entier r peut donc prendre les valeurs $r = 0, \ldots, w_{\mathfrak{r}}$. On compte alors $4(w_{\mathfrak{r}} + 1)$ classes topologiques différentes. En notant que, dans la limite $\hbar \to 0$, les énergies E_n sont suffisamment proches de l'énergie associée aux points d'équilibre stable $(p, q) = (0, \pm a)$, on peut supposer que la période d'oscillation $T_{\mathfrak{r}}(E_n)$ est principalement d'ordre $2\pi/\omega$. La formule de la largeur du doublet n devient alors explicitement indépendante du temps T et s'écrit

$$\Delta_n(T) \overset{\hbar \to 0}{\sim} \frac{\hbar}{2w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E_n)} 4(w_{\mathfrak{r}} + 1) \mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)/(2\hbar)} \sim \frac{\hbar\omega}{\pi} \mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)/(2\hbar)}. \tag{5.53}$$

Contrairement à la formule (1.55) obtenue par Garg, le préfacteur de $\Delta_n(T)$ ne dépend pas du niveau du doublet. Ces deux expressions diffèrent par le terme g_n présent dans le préfacteur et défini par l'expression (1.56). Cependant on constate que dans la limite semiclassique $n \to \infty$, le facteur $g_n \to 1$

$$g_o \simeq 1.075, \qquad g_1 \simeq 1.028, \qquad \ldots, \quad g_{10} \simeq 1.00397, \quad \ldots. \tag{5.54}$$

Dans cette limite, le préfacteur de Garg tend donc vers la même valeur $\hbar\omega/\pi$. Comparons maintenant les différentes expressions dans le cas du doublet fondamental. Pour commencer, on note l'écart entre les 2 formules (5.42) et (5.53) obtenues

$$\frac{\Delta_{n=0}(T)}{\Delta_0(T)} = \sqrt{\pi} \simeq 1,7725 \tag{5.55}$$

qui est très proche du rapport $\sqrt{\mathrm{e}}$ entre la formule de Garg (1.53) et $\Delta_0(T)$. La formule $\Delta_n(T)$ fournit une meilleure approximation pour le fondamental que $\Delta_0(T)$. En effet, l'expression (5.53) redonne exactement, pour $n = 0$, la formule obtenue par Landau & Lifshitz [61] et diffère alors de l'approximation de Garg d'un facteur $\sqrt{\pi/\mathrm{e}}$. Ce facteur a déjà été remarqué et n'apparaît que pour la largeur du doublet fondamental en utilisant l'approximation JWKB [38] [23]. Cet écart semble venir de la mauvaise utilisation des formules de connexion de l'approximation semiclassique. Lorsque $\hbar \to 0$, l'énergie moyenne du doublet fondamental s'approche de l'énergie de fond de puits. Dans cette limite, le potentiel ressemble localement à un oscillateur harmonique et il est alors plus précis d'utiliser des formules de connexions quadratiques à la place des formules de connexion linéaires décrites dans le tableau (1.1) [18].

5.2 Effet tunnel dynamique : le pendule

Nous allons maintenant nous intéresser au cas d'un effet tunnel dynamique. Un exemple connu est celui du pendule simple dont le hamiltonien s'écrit comme

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2} - \gamma \cos q, \tag{5.56}$$

où $\gamma > 0$ et avec des conditions strictement périodiques qui identifient les points $q = -\pi$ et $q = \pi$. Au-delà de la simple étude de ce système, le pendule devient utile dans certains mécanisme de la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances. Lors de l'étude de l'effet tunnel dans les systèmes mixtes, les chaînes de résonances classiques qui favorisent le passage tunnel d'un état localisé dans un ilôt stable vers son symétrique sont localement approchées par des pendules simples dans le cadre d'une approximation intégrable du hamiltonien [16] [17].

Le paramètre γ représente l'énergie de la séparatrice dans l'espace des phases qui permet de distinguer deux types de mouvement pour un pendule simple. Lorsque l'énergie E du système est inférieure à γ, le pendule effectue des oscillations autour de sa position d'équilibre sans jamais pouvoir réaliser un tour complet (mouvement de libration). Au contraire, quand l'énergie E du système est plus grande que le paramètre γ, le pendule effectue des rotations complètes soit dans le sens où $p = \sqrt{2(E + \cos q)}$ soit dans le sens contraire $p = -\sqrt{2(E + \cos q)}$. Classiquement, il est impossible que le mouvement de rotation s'inverse pour passer d'un sens à l'autre. Quantiquement, le pendule est décrit par l'équation de Schrödinger stationnaire pour la fonction d'onde $\psi(q)$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} - \gamma\cos q\right)\psi(q) = E\psi(q). \tag{5.57}$$

Cette équation est équivalente à l'équation de Mathieu [1]

$$\frac{\mathrm{d}^2 y(x)}{\mathrm{d}x^2} + (a - 2g\cos(2x))y(x) = 0. \tag{5.58}$$

Par correspondance, on obtient les relations

$$x = \frac{q}{2}, \qquad y(x) = \psi(2x), \qquad a = \frac{8E}{\hbar^2}, \qquad g = -\frac{4\gamma}{\hbar^2}. \tag{5.59}$$

Si on impose aux fonctions $\psi(q)$ d'être 2π-périodiques, il vient directement que $y(x)$ est π-périodique. Encore une fois, le système est invariant lorsque l'on applique l'opérateur de parité $\hat{S}$. Dans ce cas, il est possible de classer les valeurs propres a de l'équation de Mathieu selon la parité des fonctions propres $y(x)$. Les fonctions $y(x)$ paires sont caractérisées par leur valeurs propres $a = \{a_{2n}\}$ où $n = 0, 1, \ldots$, tandis que les fonctions impaires existent pour un ensemble de valeurs discrètes $a = \{b_{2n}\}$ avec $n = 1, 2, \ldots$. Le spectre associé au système peut donc être obtenu à l'aide des relations (5.59) et séparé en énergies discrètes d'états pairs E_n^+ et impairs E_n^-

$$E_n^+ = \frac{\hbar^2 a_{2n}}{8}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{5.60}$$

$$E_n^- = \frac{\hbar^2 b_{2n}}{8}, \qquad n = 1, 2, \ldots. \tag{5.61}$$

Les énergies propres $E_n^\pm$ supérieures à la valeur d'énergie γ de la séparatrice sont associées à des états propres $|\psi_n^\pm\rangle$ dont les distributions de Husimi sont localisées symétriquement sur les lignes d'isoénergie déconnectées dans l'espace des phases $p_\pm(q, E_n) = \pm\sqrt{2(E_n - V(q))}$ où $E_n^\pm \simeq E_n$. Si on prépare maintenant un paquet d'ondes localisé seulement sur une de

ces lignes, on assiste alors à un effet tunnel dynamique. Cet état n'est plus stationnaire et l'impulsion moyenne de cet état va osciller alternativement entre ses deux valeurs opposées $p_\pm$ à la fréquence tunnel $|E_n^- - E_n^+|/\hbar$. On définit alors la largeur d'un doublet tunnel comme

$$\Delta E_n = E_n^- - E_n^+ = \frac{\hbar^2}{8}(b_{2n} - a_{2n}). \tag{5.62}$$

Afin de décrire semiclassiquement la largeur d'un tel doublet, on utilise la formule (4.35) où l'opérateur $\hat{\Pi}_n$ va imiter le projecteur $|\psi_n^+\rangle\langle\psi_n^+| + |\psi_n^-\rangle\langle\psi_n^-|$. Les expressions semiclassiques obtenues pour les traces $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ et $\operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ sont décrites uniquement à l'aide de quantités géométriques et ne dépendent pas du choix de la base sur laquelle on les a calculées. La base continue des impulsions $\{|p\rangle\}$ semble ici appropriée et le développement semiclassique des traces présentées dans l'appendice B peut alors être adapté dans cette base en échangeant le rôle des variables p et q. L'opérateur $\hat{\Pi}_n$ va être construit à l'aide du quasimode dans l'espace des impulsions d'énergie E_n localisé sur le tore d'impulsion positive $p_+(q, E_n)$. Les éléments de matrice $\langle p'|\hat{\Pi}_n|p\rangle$ deviendront alors rapidement très petits lorsque p et p' s'éloigneront des tores $p_\pm(q, E_n)$.

De manière analogue au double puits traité précédemment, les trajectoires dominantes $\mathfrak{o}$ à la trace $\operatorname{tr}\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ sont celles qui connectent les deux tores réels symétriques $p_\pm(q, E_n)$ en adaptant le chemin $[t]$ du temps complexe afin de garder, dans ce cas, l'impulsion $p(s)$ réelle le long de $\mathfrak{o}$. La dynamique classique réelle nous permet de définir, d'après le hamiltonien (5.56), les points de rebroussement en impulsion le long d'un tore réel p_+ d'énergie $E > \gamma$ comme

$$p_r(E) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2(E-\gamma)}, \tag{5.63}$$

$$p_r'(E) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2(E+\gamma)}. \tag{5.64}$$

On peut alors écrire la position $q(s)$ sur ce même tore en fonction de l'impulsion et d'un point de rebroussement, disons $p_r(E)$

$$\cos q = \frac{1}{2\gamma}(p^2 - p_r^2) - 1. \tag{5.65}$$

Les points de rebroussement du tore symétrique p_- sont simplement $-p_r(E)$ et $-p_r'(E)$. À partir des équations d'Hamilton complexes (2.34) et (2.35), on va pouvoir choisir la forme du chemin complexe du temps que doit suivre une trajectoire dominante $\mathfrak{o}$ d'énergie E qui connecte les deux tores réels $p_\pm(q, E)$ en gardant $p(s)$ réel. En effet, l'équation (2.35) nous donne

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} = -\frac{1}{\partial_q H}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}s} = -\frac{1}{\gamma\sin q}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}s}. \tag{5.66}$$

Pour une énergie E donnée, en utilisant (5.65), on remarque que lorsque $p_r'(E) < p(s) < p_r(E)$, q (et donc $\sin q$) est réel et comme $\operatorname{Im} p(s) = 0$, la variation du temps $\mathrm{d}t/\mathrm{d}s$ est réelle. En revanche, lorsque $-p_r(E) < p(s) < p_r(E)$, $q(s)$ (et donc $\sin q(s)$) devient purement imaginaire et le temps $t(s)$ évolue parallèlement à l'axe imaginaire. Le chemin du temps $[t]$ prend alors encore la forme d'un escalier « descendant ». Dans le cas de figure où

$-p_r(E) < p(s) < p_r(E)$, en définissant

$$t(s) = \operatorname{Re} t(s) + \mathrm{i} \operatorname{Im} t(s) \stackrel{\text{def}}{=} t_1(s) + \mathrm{i} t_2(s), \tag{5.67}$$

$$q(s) = \operatorname{Re} q(s) + \mathrm{i} \operatorname{Im} q(s) \stackrel{\text{def}}{=} q_1(s) - \mathrm{i} q_2(s), \tag{5.68}$$

$$p(s) = \operatorname{Re} p(s) + \mathrm{i} \operatorname{Im} p(s) \stackrel{\text{def}}{=} p_1(s) + \mathrm{i} p_2(s), \tag{5.69}$$

les équations (2.40) et (2.43) mènent à

$$\frac{\mathrm{d}q_1}{\mathrm{d}s} = 0, \tag{5.70}$$

$$\frac{\mathrm{d}p_2}{\mathrm{d}s} = -\frac{\mathrm{d}t_2}{\mathrm{d}s} \gamma \sin(q_1) \cosh(q_2) = 0. \tag{5.71}$$

Les solutions de ce système sont telles que $\sin(q_1) = 0$. On obtient alors deux familles de solutions :

- (i) : $q_1(s) = 0$,
- (ii) : $q_1(s) = \pm\pi$.

La dynamique, lorsque $-p_r(E) < p(s) < p_r(E)$, $q(s)$ est alors décrite en utilisant les deux équations du mouvement restantes (2.41) et (2.42)

$$\frac{\mathrm{d}p_1}{\mathrm{d}s} = \pm \mathrm{i} \gamma \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} \sinh q_2, \tag{5.72}$$

$$\frac{\mathrm{d}q_2}{\mathrm{d}s} = \mathrm{i} p_1 \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} \tag{5.73}$$

et correspond à une particule évoluant avec un temps réel dont le hamiltonien s'écrit

$$\tilde{H}(p_1, q_2) = E = \frac{p_1^2}{2} \mp \gamma \cosh q_2. \tag{5.74}$$

Le signe $-$ dans le hamiltonien correspond à la première famille de solutions $q_1 = 0$ tandis que le signe $+$ est associé à la seconde famille $q_1 = \pm\pi$. En choisissant un chemin du temps $[t]$ complexe tel que les trajectoires $\mathfrak{o}$ qui joignent les deux tores réels symétriques gardent $p(s)$ réel, la trajectoire « instanton » n'est alors pas celle qui évolue dans le potentiel inversé $-V(q) = \gamma \cos q$ mais dans un potentiel modifié $\tilde{V}(q) = \mp\gamma \cosh q$. La condition $\operatorname{Im} p(s) = 0$ nous permet de nous restreindre à l'espace des phases complexe tridimensionnel $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q, \operatorname{Im} q)$. L'énergie étant conservée, les trajectoires dans les potentiels $V(q)$ et $\tilde{V}(q)$ se rejoigne uniquement via les points $(\operatorname{Re} p = \pm p_r'(E), \operatorname{Re} q = 0, \operatorname{Im} q = 0)$ et $(\operatorname{Re} p = \pm p_r(E), \operatorname{Re} q = \pm\pi, \operatorname{Im} q = 0)$. Cependant, la première famille de trajectoires $(q_1 = 0)$ ne peut pas produire d'orbites périodiques puisque le potentiel associé ne possède pas de minimum (même localement), donc la trajectoire partant d'un point sur l'axe $(\operatorname{Re} q = 0, \operatorname{Im} q = 0)$ ne pourra jamais revenir sur cet axe. La seconde famille de solutions $(q_1 = \pm\pi)$ est la seule à fournir des orbites périodiques et donc nous ne retiendrons, dans la contruction des trajectoires dominantes $\mathfrak{o}$, que celle-ci. Il est maintenant possible de distinguer, comme dans le cas du double puits, trois types d'orbites primitives dans cet espace des phases qui vont permettre de construire ces trajectoires $\mathfrak{o}$:

- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{r}$ d'énergie E_n correspond au tore défini par l'impulsion positive $p_+(q, E_n) = \sqrt{2(E_n - V(q))}$ comprise entre les points de rebroussement $p_r(E_n) < p(s) < p_r'(E_n)$ dans le plan $(\operatorname{Im} p = 0, \operatorname{Im} q = 0)$

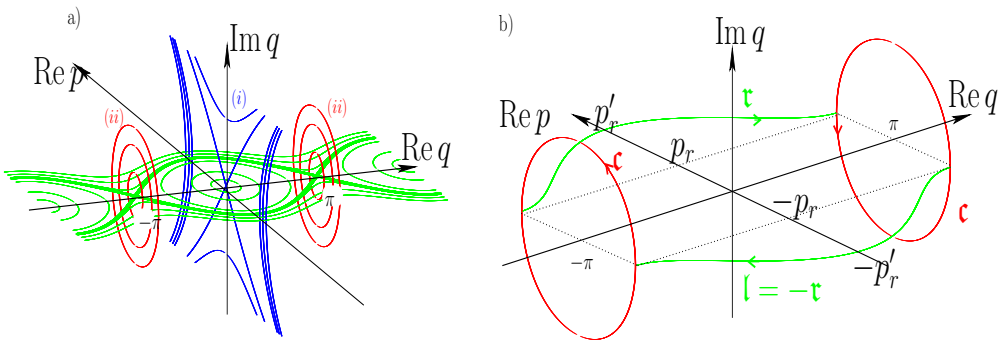


FIG. 5.4: La figure a) représente, cette fois, l'espace des phases complexe $3D$ $(\mathrm{Re}\, p, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, q)$ dans lequel évoluent les trajectoires de longueur non nulle $\mathfrak{o}$ qui contribuent au calcul de $\mathrm{tr}\, \hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ dans le cas du pendule simple avec $\gamma = 1$. En bleu, la famille (i) de trajectoires qui ne peut pas être utilisée puisqu'elle ne possède pas d'orbites périodiques contrairement la famille (ii) (en bleu). La figure b) décrit les trajectoires périodiques d'énergie $E > \gamma$ composées des orbites primitives (répétées) $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$ et $\mathfrak{l}$ qui conservent la condition $\mathrm{Im}\, p = 0$.

- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{c}$ d'énergie E_n oscille entre les points de rebroussement $p_r(E_n)$ et $-p_r(E_n)$ dans le potentiel modifié $\tilde{V}(q) = +\gamma \cosh(q)$. L'orbite reste dans un des plans $(\mathrm{Re}\, q = \pm\pi, \mathrm{Im}\, p = 0)$,
- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{l}$ d'énergie E_n est l'orbite symétrique de $\mathfrak{r}$. Elle correspond au tore défini par l'impulsion négative $p_-(q, E_n) = \sqrt{2(E_n - V(q))}$ comprise entre les points de rebroussement $-p_r(E_n) < p(s) < -p'_r(E_n)$ dans le plan $(\mathrm{Im}\, p = 0, \mathrm{Im}\, q = 0)$.

Toutes les trajectoires $\mathfrak{o}$ qui vont contribuer aux traces sont composées d'une succession de répétitions de ces trois types d'orbite $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$, $\mathfrak{l}$. On représente les différents portraits de phase et la concaténation des orbites primitives sur la figure (5.4).

Les expressions des traces se présentent sous la même forme que pour le double puits, en particulier on retrouve

$$\mathrm{tr}\, \hat{\Pi}_n\hat{U}(T) \simeq 2\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}, \tag{5.75}$$

$$\mathrm{tr}\, \hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{1}{2}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} \mathrm{i}(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_\beta,E_n)}\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_nT} \tag{5.76}$$

où b_β et $b_{\beta'}$ sont les points de référence des branches de départ et d'arrivée de la trajectoire β et β' qui définissent le quasimode localisé sur le tore $\mathfrak{r}$. On distingue ici encore deux branches sur ce tore. La première branche $\beta = +$ correspond à la moitié de l'orbite primitive $\mathfrak{r}$ partant du point de rebroussement $(p_r(E), -\pi)$ et allant jusqu'à $(p'_r(E), 0)$. La seconde branche $\beta = -$ coïncide avec la seconde moitié de $\mathfrak{r}$ partant de $(p'_r(E), 0)$ et allant jusqu'à $(p_r(E), \pi)$. Ces branches ne sont pas jointes par les deux extrémités mais uniquement par le point de rebroussement $p'_r(E)$. On pourra donc choisir le même point de référence pour les deux branches $b_\pm = p'_r(E)$. La même démarche est effectuée pour le tore $\mathfrak{l}$ d'impulsion négative avec comme point de référence $-p'_r(E)$. De cette manière, l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}$ et l'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$ sont encore indépendants de la branche de départ et d'arrivée de la trajectoire $\mathfrak{o}$. La

forme du temps $T_{\mathfrak{o}}$ est imposée par la condition $\operatorname{Im} p(s) = 0$ et prend la forme

$$T = T_{\mathfrak{o}}(E_n) = \tau + w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E_n) - \mathrm{i}(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1}{2}) T_{\mathfrak{c}}(E_n), \tag{5.77}$$

où $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ sont des entiers naturels. Les temps $T_{\mathfrak{r}}(E_n)$ et $T_{\mathfrak{c}}(E_n)$ correspondent respectivement à la période de l'orbite primitive $\mathfrak{r}$ (associée au potentiel $V(q)$) et à celle de l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ (associée au potentiel modifié $\tilde{V}(q)$). Encore une fois, les trajectoires $\mathfrak{o}$ qui contribuent ne sont plus nécessairement symétriques et l'intervalle de temps τ, inférieur au temps d'une période $T_{\mathfrak{r}}(E_n)$, dépend du point de départ (p_i, q_i) et d'arrivée (p_f, q_f). L'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$ d'une trajectoire $\mathfrak{o}$ s'écrit encore

$$\mu_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{r}} + w_{\mathfrak{c}} + 1. \tag{5.78}$$

On ne travaille pas avec le simple potentiel retourné et l'action devient en utilisant la définition (2.55)

$$\begin{aligned} S_{\mathfrak{o}} &= \int_{s_i}^{s_f} p_1(s) \frac{\mathrm{d}q_1}{\mathrm{d}s}(s)\mathrm{d}s - E \operatorname{Re} T + \mathrm{i}\left(\int_{s_i}^{s_f} p_1(s) \frac{\mathrm{d}q_2}{\mathrm{d}s}(s)\mathrm{d}s - E \operatorname{Im} T \right), & (5.79) \\ &= \tilde{S}_{\mathfrak{o}} - E T_{\mathfrak{o}}. & (5.80) \end{aligned}$$

On a retenu ici seulement la forme de l'action qui, lorsque l'on effectue la phase stationnaire sur l'intégrale de chemin, fournit une contribution physique acceptable (la partie imaginaire de l'action doit être positive pour assurer une exponentielle décroissante dans l'expression de $\Delta_n(T)$). L'action réduite $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}$ présente dans l'expression de $\Delta_n(T)$ s'écrit alors, en suivant la forme du temps $T_{\mathfrak{o}}$

$$\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'}, b_{\beta}, E_n) = w_{\mathfrak{r}} \tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n) + \mathrm{i}\left(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1}{2} \right) \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n), \tag{5.81}$$

avec les actions réduites des orbites primitives $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{c}$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E) &\stackrel{\text{def}}{=} 2 \int_0^{\pi} \sqrt{2(E + \gamma \cos q)} \mathrm{d}q, & (5.82) \\ \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) &\stackrel{\text{def}}{=} 4 \int_0^{\operatorname{arcosh}(E/\gamma)} \sqrt{2(E - \gamma \cosh q)} \mathrm{d}q. & (5.83) \end{aligned}$$

Les actions $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}$ et $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ s'expriment en fonction des intégrales elliptiques complètes (avec $|u| < 1$) [1]

$$\mathcal{K}(u) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\pi/2} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1 - u^2 \sin^2 x}}, \qquad \mathcal{E}(u) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\pi/2} \mathrm{d}x \sqrt{1 - u^2 \sin^2 x} \tag{5.84}$$

et deviennent

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E) &= 4\sqrt{2(E+\gamma)} \mathcal{E}\left(\sqrt{\frac{2\gamma}{E+\gamma}} \right), & (5.85) \\ \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) &= 8\sqrt{2(E+\gamma)} \left[\mathcal{K}\left(\frac{E-\gamma}{E+\gamma} \right) - \mathcal{E}\left(\frac{E-\gamma}{E+\gamma} \right) \right]. & (5.86) \end{aligned}$$

Pour les mêmes raisons que celles évoquées dans l'étude du double puits, nous choisirons de fixer la partie imaginaire du temps comme la moitié de la période de l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ ($[t]$ ne contient qu'une seule marche) afin de sélectionner les trajectoires $\mathfrak{o}$ qui n'effectuent qu'un aller simple dans le potentiel modifié $\tilde{V}(q)$, c'est-à-dire telles que $w_{\mathfrak{c}} = 0$ (la partie imaginaire de l'action est alors minimum). Ces trajectoires fournissent les contributions exponentiellement dominantes à la trace $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$. En injectant les formes (5.77), (5.78) et (5.81), avec $w_{\mathfrak{c}} = 0$, dans l'expression semiclassique (5.75), la formule du doublet est la même que pour le double puits, soit

$$\Delta_n(T) = \frac{2\hbar}{\mathrm{i}T}\frac{\operatorname{tr} \hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)}{\operatorname{tr} \hat{\Pi}_n\hat{U}(T)} \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{2T}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]}(-1)^{w_{\mathfrak{r}}+2}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/(2\hbar)}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)w_{\mathfrak{r}}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)}. \tag{5.87}$$

Ici encore, afin de s'assurer que l'expression du doublet reste bien réelle, on utilise la condition de quantification des tores $\mathfrak{r}$ définie par (5.50) qui permet de supprimer les exponentielles complexes dans la formule de $\Delta_n(T)$. De plus, en imposant $\operatorname{Re} T \gg |\operatorname{Im} T|$ afin d'imiter un temps réel T, on peut simplifier l'expression précédente pour retrouver

$$\Delta_n(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{2w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E_n)}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/(2\hbar)}. \tag{5.88}$$

Il reste à calculer la somme sur les différentes classes topologiques de trajectoires. Celle-ci se présente exactement de la même manière que pour le double puits. Les trajectoires $\mathfrak{o}$ partent uniquement d'une des branches $\beta = \pm$ d'un tore $\mathfrak{r}$ d'énergie E_n, ne traversent qu'une seule fois le potentiel modifié $\tilde{V}(q)$ et terminent sur une des branches $\beta' = \pm$ d'un tore $\mathfrak{l}$, symétrique de $\mathfrak{r}$. L'entier $w_{\mathfrak{r}}$ (fixé) nous permet de répartir le nombre de tours effectués sur chacun des tores $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ de $w_{\mathfrak{r}} + 1$ façons différentes et comme ces différentes trajectoires ne possèdent pas la même séquence $[\rho_1, \rho_2, \ldots]$ de points de rebroussement, elles sont topologiquemnt distinctes. Pour chacune de ces classes topologiques, il existe encore 4 autres possibilités correspondant à la branche $\beta = \pm$ du point de départ et celle $\beta' = \pm$ du point d'arrivée de la trajectoire $\mathfrak{o}$. L'action $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}$ reste la même, peu importe la topologie de la trajectoire $\mathfrak{o}$. Elle est donc indépendante de la somme qui fournit alors simplement un facteur $4(w_{\mathfrak{r}} + 1)$. Ces informations nous permettent de rendre indépendant du temps la formule (5.88) et donne

$$\Delta_n \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{2\hbar}{T_{\mathfrak{r}}(E_n)}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/(2\hbar)}. \tag{5.89}$$

où la période $T_{\mathfrak{r}}$ de l'orbite primitive $\mathfrak{r}$ peut être calculée exactement

$$T_{\mathfrak{r}}(E) \overset{(5.82)}{=} \frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}}{\mathrm{d}E} \overset{(5.85)}{=} \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{E+\gamma}}\mathcal{K}\left(\sqrt{\frac{2\gamma}{E+\gamma}}\right). \tag{5.90}$$

Dans la limite des hautes énergies ($E \gg \gamma$), les énergies propres du pendule peuvent être approchées par celles d'un rotateur libre [5]

$$E_n \simeq \frac{n^2\hbar^2}{2}. \tag{5.91}$$

En utilisant les limites asymptotiques des intégrales elliptiques complètes [1]

$$\lim_{u\to 0} \quad \mathcal{K}(u) = \frac{\pi}{2}, \tag{5.92}$$

$$\lim_{u\to 1} \quad \mathcal{E}(u) = 1, \tag{5.93}$$

$$\lim_{u\to 1} \quad \left(\mathcal{K}(\sqrt{u}) - \frac{1}{2}\ln\left(\frac{16}{1-u}\right)\right) = 0, \tag{5.94}$$

on obtient les expressions approchées de la période $T_{\mathfrak{r}}$

$$T_{\mathfrak{r}}(E_n) \quad = \quad \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{E_n+\gamma}}\mathcal{K}\left(\sqrt{\frac{2\gamma}{E_n+\gamma}}\right), \tag{5.95}$$

$$\overset{E_n \gg \gamma}{\simeq} \quad \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{n^2\hbar^2/2}}\frac{\pi}{2} = \frac{2\pi}{n\hbar} \tag{5.96}$$

et de l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}$

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n) \quad = \quad 8\sqrt{2(E+\gamma)}\left[\mathcal{K}\left(\frac{E_n-\gamma}{E_n+\gamma}\right) - \mathcal{E}\left(\frac{E_n-\gamma}{E_n+\gamma}\right)\right], \tag{5.97}$$

$$\overset{E_n \gg \gamma}{\simeq} \quad 8\sqrt{2E_n}\left[\frac{3}{2}\ln 2 + \frac{1}{2}\ln\left(\frac{E_n}{\gamma}\right) - 1\right], \tag{5.98}$$

$$\simeq \quad 4\hbar n\left[\ln\left(\frac{n^2\hbar^2}{2\gamma}\right) + 3\ln 2 - 2\right]. \tag{5.99}$$

En remplaçant ces deux formes asymptotiques dans l'expression (5.89), on obtient

$$\Delta_n \quad \overset{\hbar\to 0}{\sim} \quad \frac{\hbar^2 n^2}{\pi}\mathrm{e}^{-4\hbar n[\ln(n^2\hbar^2/(2\gamma)+3\ln 2-2]/(2\hbar)}, \tag{5.100}$$

$$\overset{\hbar\to 0}{\sim} \quad \frac{\hbar^2}{\pi n^{4n-1}}\left(\frac{\mathrm{e}}{2}\right)^{4n}\left(\frac{\gamma}{\hbar^2}\right)^{2n}, \tag{5.101}$$

qui est en très bon accord avec le calcul exact, même dans un régime qui n'est pas très semiclassique (figure (5.5)). On retrouve cette dernière expression dans [23], développée dans le cadre d'une théorie semiclassique uniforme appliquée au potentiels périodiques. L'approche par la théorie des perturbations mène à un résultat équivalent comme il a été montré dans [17] dans le cas d'un effet tunnel mais, cette fois, entre deux états non symétriques.

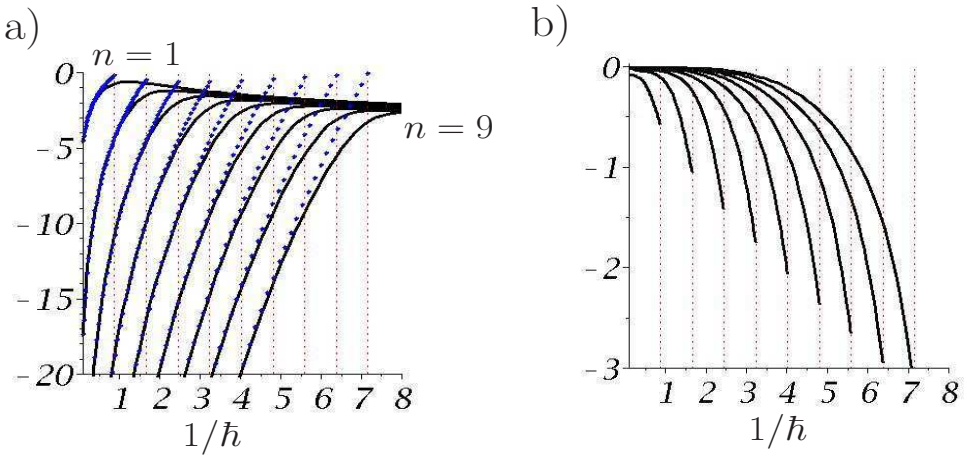


FIG. 5.5: On compare l'expression semiclassique (5.101) de $\Delta_n(T)$ obtenue pour le pendule (avec $\gamma = 1$) avec le calcul exact (5.62). Sur la figure a), on trace le logarithme de la largeur des doublets ΔE_n pour $n = 1, \ldots, 9$ en fonction de $1/\hbar$. Les traits noirs représentent le calcul exact et les points bleus correspondent à $\ln \Delta_n$ jusqu'à la valeur maximale de $1/\hbar$ (lignes pointillées verticales) pour laquelle l'énergie propre la plus basse du doublet n (soit E_n^+) est encore plus grande que γ (on rappelle que l'on étudie l'effet tunnel en impulsion entre deux quasimodes localisés sur des tores symétriques, en dehors des îlots où $E > \gamma$). La figure b) représente le logarithme du rapport en la largeur du doublet exact et celle obtenue semiclassiquement, soit $\ln(\Delta E_n/\Delta_n)$, en fonction de $1/\hbar$. On constate que l'accord devient bon dans le régime semiclassique. En effet, les quasimodes sont de plus en plus localisés sur les tores classiques associés lorsque l'on atteint un régime de plus en plus semiclassique. Pour des états de rotations, on peut y arriver de deux manières. Lorsque l'énergie E est fixée, il faut regarder les états très excités, c'est-à-dire augmenter $n \sim \sqrt{2E}/\hbar$ ou encore si l'énergie moyenne $E_n \sim n^2\hbar^2/2$ du doublet est fixée, il faut augmenter $\hbar$.

5.3 Taux de décroissance

Jusqu'à présent, nous nous sommes intéressés aux systèmes fermés et à la façon d'évaluer l'effet tunnel en calculant semiclassiquement l'écart ΔE_n entre des énergies propres quasidégénérées. Nous montrons ici que l'approche développée dans cette thèse englobe également le calcul du taux de décroissance d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'états et permet de retrouver certaines expressions obtenues très récemment dans le cadre de l'étude semiclassique de la transition tunnel directe d'un état localisé dans un îlot régulier vers la mer chaotique dans des systèmes mixtes [3], à l'aide d'une approximation intégrable du hamiltonien. Supposons que l'on travaille avec un hamiltonien du type

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2} + V(q) \tag{5.102}$$

où le potentiel $V(q)$, représenté sur la figure (5.6), possède un minimum local en $(p,q) = (0,0)$ tel que $H(0,0) = V_{min} = 0$. La barrière d'énergie, située dans l'intervalle $0 < q < q_{max}$, atteint sa valeur maximale pour $V(q_{max}) = V_{max}$. Classiquement, si l'énergie d'une particule confinée dans le minimum local est comprise entre 0 et V_{max}, elle oscillera dans ce puits sans jamais en sortir. Du point de vue de la théorie quantique, supposons maintenant cette particule représentée par un quasimode $|\psi_n\rangle$ d'énergie $0 < E_n < V_{max}$ dont la distribution de Husimi est localisée principalement sur l'îlot stable de l'espace des phases réel représenté par le minimum local du potentiel $V(q)$. Cet état finira par sortir de l'îlot vers le continuum d'état. Formellement, on peut définir le taux de décroissance Γ_n de cet état de l'îlot stable vers l'extérieur au bout d'un temps T en utilisant le produit scalaire de l'état à l'instant initial par l'état évolué à l'instant T

$$\langle\psi_n|\hat{U}(T)|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar}|\psi_n\rangle = \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}\mathrm{e}^{-\Gamma_nT/(2\hbar)}. \tag{5.103}$$

Dans le même esprit que la démonstration de la formule $\Delta_n(T)$, commençons par calculer la trace

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) &= \sum_{m=0} \langle\psi_m|\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)|\psi_m\rangle, & (5.104)\\ &= \sum_{m=0} \langle\psi_m|\hat{\Pi}_n|\psi_m\rangle\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_mT}\mathrm{e}^{-\Gamma_mT/(2\hbar)} & (5.105) \end{aligned}$$

où les $|\psi_m\rangle$ correspondent aux états propres associés à l'îlot stable et l'opérateur $\hat{\Pi}_n$ imite le projecteur $|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$. *A priori*, Le temps T est ici encore complexe. Sous l'hypothèse que le temps T vérifie

$$\frac{\Gamma_n|T|}{\hbar} \ll 1, \tag{5.106}$$

et en rappelant que l'élement de matrice $\langle\psi_n|\hat{\Pi}_n|\psi_n\rangle \sim 1$ et que les autres élements $(m \neq n)$ sont négligeables, on peut simplifier la trace

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) &\sim \langle\psi_n|\hat{\Pi}_n|\psi_n\rangle\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}\left(1-\frac{\Gamma_nT}{2\hbar}\right), & (5.107)\\ &\sim \left(1-\frac{\Gamma_nT}{2\hbar}\right)\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}. & (5.108) \end{aligned}$$

Si on définit le temps complexe comme $T = \mathrm{Re}\,T + \mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,T$, l'approximation (5.108) devient

$$\mathrm{Re}\left[\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}\,\mathrm{tr}\,\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)\right] + \mathrm{i}\,\mathrm{Im}\left[\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}\,\mathrm{tr}\,\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)\right] \sim 1 - \frac{\Gamma_n}{2\hbar}\left(\mathrm{Re}\,T + \mathrm{i}\,\mathrm{Im}\,T\right). \quad (5.109)$$

En ne retenant que les parties imaginaires, on peut écrire

$$\Gamma_n \simeq -\frac{2\hbar}{\mathrm{Im}\,T}\,\mathrm{Im}\left[\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)E_nT}\,\mathrm{tr}\,\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)\right]. \quad (5.110)$$

À partir du calcul semiclassique des traces du type (4.37), on sait que les trajectoires qui vont contribuer à la trace $\mathrm{tr}\,\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ vont être des trajectoires $\mathfrak{o}$ partant du tore réel $\mathfrak{l}$ d'énergie E_n où est localisé le quasimode $|\psi_n\rangle$ et revenant sur ce tore, au bout d'un temps T, après avoir exploré l'espace des phases complexe. Encore une fois, les trajectoires que nous allons retenir doivent vérifier $\mathrm{Im}\,q(s) = 0$. Le temps $T = T_{\mathfrak{o}}(E_n)$ s'écrit à l'aide des périodes primitives $T_{\mathfrak{l}}$ dans l'îlot créé par le potentiel $V(q)$ et également des périodes primitives $T_{\mathfrak{c}'}$ et $T_{\mathfrak{c}}$ dans le puits respectivement de gauche et droite du potentiel inversé $-V(q)$ (figure (5.6)(b)). On choisit cependant ces deux puits asymétriques de telle sorte que le puits de gauche possède une action beaucoup plus grande que celui de droite. Ainsi on pourra négliger les trajectoires explorant ce puits puisque leur contribution sera exponentiellement dominée dans la somme de $\mathrm{tr}\,\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$. Si les puits sont symétriques, les parties imaginaires de l'action dans les deux puits vont être les mêmes et il faudrait noter un facteur 2 global afin de compter les possibles explorations de la trajectoire complexes à droite et à gauche. Finalement, le temps T est donné par

$$T = T_{\mathfrak{o}}(E_n) = \tau + w_{\mathfrak{l}}T_{\mathfrak{l}}(E_n) - \mathrm{i}w_{\mathfrak{c}}T_{\mathfrak{c}}(E_n), \quad (5.111)$$

où τ est une portion de temps réel inférieure au temps d'une période primitive $T_{\mathfrak{l}}$. À l'aide des expressions semiclassiques des traces (4.37) évaluées dans l'appendice B, on trouve les actions complexes $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_\beta, b_{\beta'}, E_n)$ et les indices $\mu_{\mathfrak{o}}$ comme

$$\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_\beta, b_{\beta'}, E_n) = w_{\mathfrak{l}}\tilde{S}_{\mathfrak{l}}(E_n) + \mathrm{i}w_{\mathfrak{c}}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n), \quad (5.112)$$

$$\mu_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{l}} + w_{\mathfrak{c}}, \quad (5.113)$$

en choisissant $b_\beta = b_{\beta'} = \rho = q_r(E_n)$. Les trajectoires dominantes sont celles qui possèdent l'action imaginaire la plus petite, c'est à dire $w_{\mathfrak{c}} = 1$. On s'attend alors à obtenir une expression semiclassique pour le taux de décroissance de la forme

$$\Gamma_n \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar f_n}{T_{\mathfrak{c}}}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar}, \quad (5.114)$$

où f_n est un facteur d'ordre 1, indépendant de $\hbar$, qui compte, entre autres, le nombre de classes topologiques de trajectoires $\mathfrak{o}$ différentes ($2w_{\mathfrak{l}}$). La partie imaginaire de l'action s'écrit

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n) \overset{\mathrm{def}}{=} 2\int_{q_r(E_n)}^{q_r'(E_n)} \sqrt{2(V(q) - E_n)}\mathrm{d}q. \quad (5.115)$$

On évalue $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ en supposant les frontières suffisamment abruptes en q_{max} pour que l'action sur le tore $\mathfrak{c}$ soit principalement évaluée à l'aide de l'approximation harmonique du potentiel. Alors on a $V(q) \sim \omega^2 q^2/2$ et on peut calculer les bornes $q_r(E)$ et $q_r'(E)$ de l'intégrale

d'action avec cette approximation, ce qui donne

$$E = V(q_r) \sim \frac{\omega^2}{2} q_r^2 \Rightarrow q_r(E) \sim \frac{\sqrt{2E}}{\omega}. \tag{5.116}$$

Dans le cas de $q_r'(E)$, on commence par rappeler que l'aire de l'îlot est évaluée par l'action réelle $\tilde{S}_{\mathfrak{l}}(E)$, et on obtient une relation entre l'aire A et l'énergie E

$$A = \tilde{S}_{\mathfrak{l}}(E) \overset{(C.17)}{\simeq} \frac{2\pi E}{\omega} + \mathrm{o}(E) \Rightarrow E \simeq \frac{A\omega}{2\pi}. \tag{5.117}$$

Enfin, on arrive à la borne supérieure de l'intégrale avec

$$V(q_r') \sim \frac{\omega^2}{2} q_r'^2 = E \Rightarrow q_r'(E) \sim \frac{\sqrt{2E}}{\omega} \overset{(5.117)}{\sim} \sqrt{\frac{A}{\pi\omega}}. \tag{5.118}$$

L'intégrale (5.115), sous l'approximation harmonique, avec (5.116) et (5.118), se résout alors simplement et il vient

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n) \simeq \frac{2E_n}{\omega}\Big[\sqrt{a}\sqrt{a-1} - \ln(\sqrt{a} + \sqrt{a-1})\Big], \tag{5.119}$$

où $a \overset{\text{def}}{=} A\omega/(2\pi E_n)$. En utilisant les notations α_n et β_n de l'article [3] ainsi que la quantification de l'énergie $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, on peut établir les relations suivantes

$$\alpha_n \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{a} = \frac{2\pi\hbar}{A}\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{5.120}$$

$$\beta_n \overset{\text{def}}{=} \sqrt{1 - \frac{1}{a}} = \sqrt{1 - \frac{2\pi\hbar}{A}\left(n + \frac{1}{2}\right)}. \tag{5.121}$$

En remplaçant dans l'action (5.119), on arrive à

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n) \simeq \frac{A}{\pi}\left\{\sqrt{1 - \frac{1}{a}} - \frac{1}{a}\ln\left[\sqrt{a}\left(1 + \sqrt{1 - \frac{1}{a}}\right)\right]\right\}, \tag{5.122}$$

$$\simeq \frac{A}{\pi}\left\{\beta_n - \alpha_n \ln\left[\frac{1 + \beta_n}{\sqrt{\alpha_n}}\right]\right\}. \tag{5.123}$$

Cette dernière expression est exactement l'action obtenue récemment dans le cadre du calcul du taux de transition tunnel direct entre un état localisé dans un ilôt régulier vers la mer chaotique pour un système mixte [3] [4]. En remplaçant l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ obtenue dans l'équation (5.114), on obtient une expression, au préfacteur près, du taux de décroissance tunnel d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'état en termes de trajectoires complexes. On vérifie ici l'idée proposée dans ces articles de décrire les principales caractéristiques de l'effet tunnel direct d'un îlot régulier vers la mer chaotique, à l'aide d'un potentiel intégrable et d'une approximation harmonique. La transition classique brutale entre la région régulière et la région chaotique des sytèmes mixtes est imitée par la pente abrupte de la barrière du potentiel que nous avons utilisée.

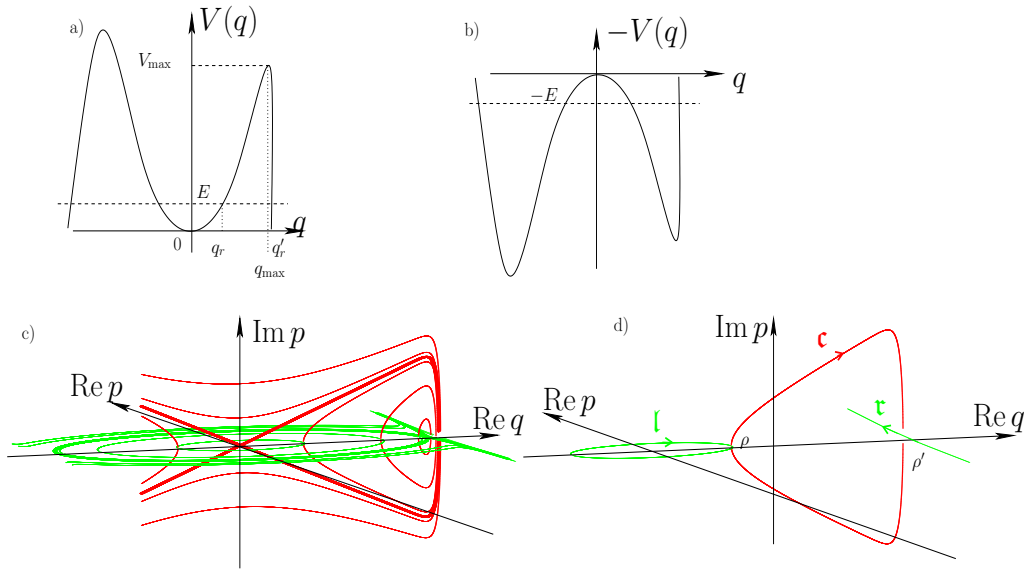


FIG. 5.6: On présente la forme d'un potentiel (figure a)) qui permet d'étudier le taux de décroissance d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'états. Une fois encore, la condition $\operatorname{Im} q = 0$ nous permet d'étudier la dynamique des trajectoires complexes uniquement dans l'espace $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q, \operatorname{Im} p)$. La figure c) représente le portrait de phase du potentiel $V(q)$ dans le plan horizontal $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q)$ qui évoluent ainsi que celui du potentiel retourné dans le plan vertical $(\operatorname{Im} p, \operatorname{Re} q)$. La figure d) correspond à la façon de coller les différents types d'orbites primitives afin de construire une trajectoire complexe qui vérifie $\operatorname{Im} q = 0$.

5.4 Interprétation semiclassique d'une résonance : le triple puits

L'objectif de cette section est d'interpréter à l'aide d'orbites périodiques complexes et de leurs répétitions, les résonances qui apparaissent dans le cas intégrable unidimensionnel du triple puits présenté au chapitre 3. Classiquement, le triple puits (figure (5.7)) se présente comme deux puits symétriques dont les minima sont localisés en $q = \pm a$ tels que $V(\pm a) = 0$. Ces puits sont séparés par un troisième puits plus profond qui constitue le minimum global situé en $q = 0$ avec $V(0) = V_{min} < 0$. Les distributions de Husimi des doublets tunnel sont principalement localisés sur les puits extérieurs et les niveaux d'énergie mis en jeu sont compris dans l'intervalle $0 < E < V_{max}$. Pour de telles énergies, on compte trois solutions réelles positives $q_r(E) < q'_r(E) < q''_r(E)$ de l'équation $V(q) = E$. Par symétrie, il y a trois autres solutions réelles (négatives) $-q_r(E) > -q'_r(E) > -q''_r(E)$.

Dans le cas du triple puits tel que nous venons de le présenter, il n'existe pas de doublets tunnel isolés composés des deux niveaux fondamentaux E_0^+ et E_0^-. Il est alors indispensable d'utiliser ici la formule développée dans le cas d'un doublet arbitraire n. On commence par rappeler, une nouvelle fois, les expressions semiclassiques des traces utiles au calcul de la largeur $\Delta_n(T)$ du doublet tunnel n

$$\operatorname{tr} \hat{\Pi}_n \hat{U}(T) \simeq 2\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)E_n T}, \tag{5.124}$$

$$\operatorname{tr} \hat{S}\hat{\Pi}_n \hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{1}{2} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} \mathrm{i}(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_\beta,E_n)} \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_n T}. \tag{5.125}$$

La trace $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{\Pi}_n \hat{U}(T)$ est calculée en choisissant un quasimode $|\Phi_n\rangle$ d'énergie E_n localisé dans le puits de droite sur le tore réel d'énergie E_n. Les trajectoires $\mathfrak{o}$ complexes mis en jeu relient donc le tore réel $\mathfrak{r}$ d'énergie E_n du puits de droite vers son tore symétrique $\mathfrak{l}$, dans le puits de gauche, telles que la variable canonique $q(s)$ reste réelle. Comme dans le cas du double puits, pour connaître les chemins du temps complexes $[t]$ qui satisfont ces conditions, il faut étudier l'équation (5.2). Dans les régions classiquement autorisées ($E > V(q)$), l'impulsion $p(s)$ est réelle donc le temps évolue parallèlement à l'axe réel et dans les régions classiquement interdites ($E < V(q)$), l'impulsion étant purement imaginaire, l'évolution du temps est purement imaginaire. Dans ce dernier cas, la dynamique est équivalente à une particule évoluant en temps réel dans le potentiel inversé $-V(q)$ et d'énergie

$$\tilde{E} = -E = \frac{(\operatorname{Im} p)^2}{2} - V(q). \tag{5.126}$$

On peut, encore une fois, se restreindre à l'étude d'un espace des phases à trois dimensions $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q, \operatorname{Im} p)$ puisque la dynamique suivant l'axe $\operatorname{Im} q$ est triviale.

Finalement pour construire une trajectoire $\mathfrak{o}$ d'énergie E reliant les deux tores $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ en maintenant $q(s)$ réel, on a besoin de 5 types d'orbites primitives concaténées (incluant de possibles répétitions) :

- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{r}$, située dans le puits de droite dont le tore réel, délimité par les points de rebroussement $\rho' = (p = 0, q = q'_r(E))$ et $\rho'' = (p = 0, q = q''_r(E))$, est dans le plan $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q, \operatorname{Im} p = 0)$,

- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{c}$ oscillant dans le potentiel inversé $-V(q)$ entre les points de rebroussement $\rho(E) = (p = 0, q = q_r(E))$ et $\rho'(E) = (p = 0, q = q'_r(E))$, dans le plan $(\mathrm{Re}\, p = 0, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, p)$,
- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{m}$ est associée au puits central de $V(q)$ et décrite par un tore réel dans le plan $(\mathrm{Re}\, p, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, p = 0)$. Le tore est délimité par les points de rebroussement $-\rho(E) = (p = 0, q = -q_r(E))$ et $\rho(E) = (p = 0, q = q_r(E))$,
- l'orbite périodique primitive $-\mathfrak{c}$ est l'orbite symétrique de $\mathfrak{c}$ et elle oscille entre les points de rebroussement $-\rho(E)$ et $-\rho'(E)$ dans le potentiel inversé $-V(q)$,
- l'orbite périodique primitive $\mathfrak{l}$, symétrique de $\mathfrak{r}$ dont le tore réel est délimité par les points $-\rho'(E)$ et $-\rho''(E)$.

En invoquant la conservation de l'énergie, ces différentes orbites primitives se joignent uniquement par les points de rebroussement $\pm\rho(E)$ et $\pm\rho'(E)$. Ce modèle diffère du double puits par la présence d'un puits central, plus profond que les puits extérieurs, qui oblige une trajectoire $\mathfrak{o}$ qui relie les tores $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ à traverser au moins deux régions classiquement interdites (au lieu d'une seule pour le double puits) séparées par une région autorisée. Cette particularité oblige le chemin du temps complexe $[t]$ à être sous la forme d'un escalier composé d'au moins deux marches (figure (5.7)). Pour qu'une trajectoire $\mathfrak{o}$ puisse connecter $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$, la hauteur de chaque marche doit nécessairement être égale à un nombre demi-entier de fois la période de l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ dans le puits inversé $-V(q)$. Pour les mêmes raisons de symétrie, le temps passé dans le puits central $\mathfrak{m}$ doit aussi être égal à un nombre demi-entier de fois la période de l'orbite primitive $\mathfrak{m}$. Finalement, l'écriture la plus générale du temps T est

$$T = T_{\mathfrak{o}}(E_n) = \tau + w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}}(E_n) + \left(w_{\mathfrak{m}} + \frac{1}{2}\right) T_{\mathfrak{m}}(E_n) - \mathrm{i}(w_{\mathfrak{c}} + 1) T_{\mathfrak{c}}(E_n) \tag{5.127}$$

où $w_{\mathfrak{r}}$, $w_{\mathfrak{m}}$ et $w_{\mathfrak{c}}$ sont des entiers naturels et $T_{\mathfrak{r}}$, $T_{\mathfrak{m}}$ et $T_{\mathfrak{c}}$ sont respectivement les périodes des orbites primitives $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{m}$ et $\mathfrak{c}$. Le temps $\tau < T_{\mathfrak{r}}$ permet d'atteindre le point d'arrivée (p_f, q_f) en partant du point de départ (p_i, q_i) d'une trajectoire $\mathfrak{o}$ (qui n'est pas nécessairement symétrique). Le temps T va maintenant être choisi afin de retenir les trajectoires $\mathfrak{o}$ exponentiellement dominantes. Pour cela, on choisit T pour qu'une trajectoire passe le moins de temps dans le potentiel retourné, ou autrement dit. Le critère qui s'impose naturellement pour de telles trajectoires est de choisir $w_{\mathfrak{c}} = 0$. On ne traverse qu'une seule fois chacune des deux barrières d'énergie (le chemin du temps complexe $[t]$ est alors composé exactement de deux marches).

Comme dans le cas du double puits, chaque tore est composé de deux branches. En particulier le tore $\mathfrak{r}$ d'énergie E_n est composé de deux branches $p_\pm(q, E_n) = \pm\sqrt{2(E_n - V(q))}$ qui se rejoignent aux points de rebroussements $\rho'(E_n)$ et $\rho''(E_n)$. Afin de s'assurer que l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'}, b_\beta, E_n)$ et l'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$ ne dépendent pas de la branche de départ β et d'arrivée β' de la trajectoire $\mathfrak{o}$, on peut alors choisir le même point de référence pour chaque branche $p_\pm$. On prendra $b_\pm = q'_r(E_n)$. Dans ce cas, on a

$$\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'}, b_\beta, E_n) = w_{\mathfrak{r}} \tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n) + \left(w_{\mathfrak{m}} + \frac{1}{2}\right) \tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E_n) + \mathrm{i}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n), \tag{5.128}$$

$$\mu_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{r}} + w_{\mathfrak{m}} + 3. \tag{5.129}$$

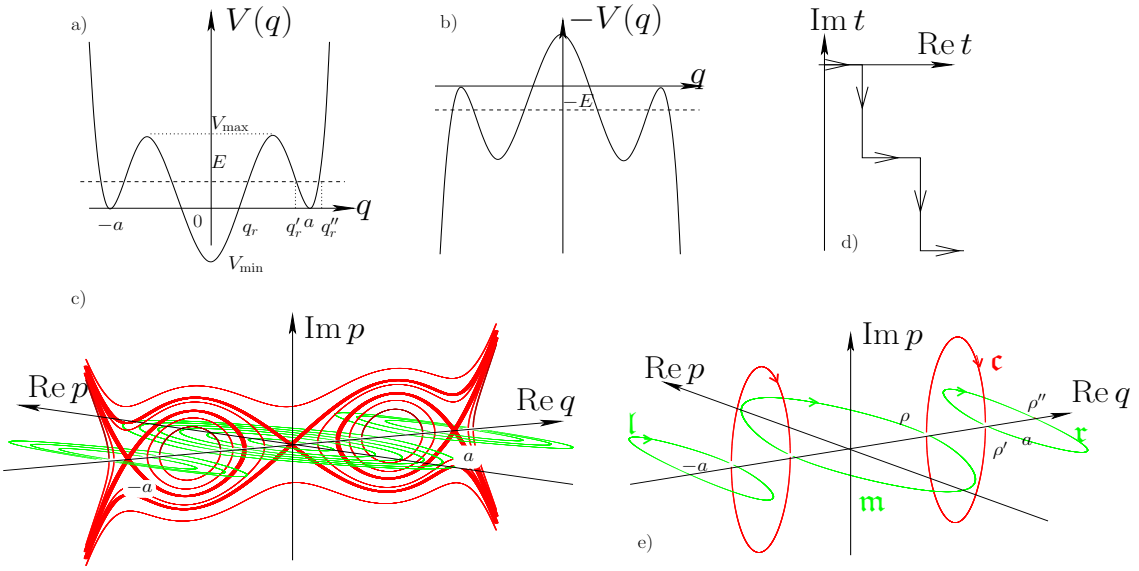


FIG. 5.7: On présente ici comment construire les trajectoires complexes périodiques qui contribuent au calcul de la trace $\operatorname{tr} \hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ dans le cas du triple puits. On choisit les valeurs de paramètres $a = 7/4$ et $b = 1/2$ pour le hamiltonien défini en (3.1). il est maintenant nécessaire d'utiliser un chemin du temps $[t]$ avec deux marches (figure d)) car un unique renversement du potentiel (figure b) ne suffit pas à joindre les deux tores réels $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ si l'on désire garder la condition $\operatorname{Im} q = 0$. La figure c) représente l'espace des phases $3D$ $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q, \operatorname{Im} p)$. l'espace des phases pour le potentiel $V(q)$ est représenté dans le plan $(\operatorname{Re} p, \operatorname{Re} q)$ (en vert) alors que le plan $(\operatorname{Im} p, \operatorname{Re} q)$ contient l'espace des phases du potentiel inversé (en rouge). La figure e) montre la construction des trajectoires périodiques complexes telles que $\operatorname{Im} q = 0$, à l'aide des 5 types d'orbites primitives identifiés $\mathfrak{r}$,$\mathfrak{l}$,$\mathfrak{m}$ et $\pm\mathfrak{c}$.

Les périodes et les actions des orbites primitives sont reliées comme

$$T_{\mathfrak{r}}(E) = \frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}}{\mathrm{d}E}(E) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\left(2\int_{q_r'(E)}^{q_r''(E)} \sqrt{2(E-V(q))}\mathrm{d}q\right), \tag{5.130}$$

$$T_{\mathfrak{m}}(E) = \frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{m}}}{\mathrm{d}E}(E) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\left(4\int_{0}^{q_r(E)} \sqrt{2(E-V(q))}\mathrm{d}q\right), \tag{5.131}$$

$$T_{\mathfrak{c}}(E) = -\frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E}(E) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\left(2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)} \sqrt{2(V(q)-E)}\mathrm{d}q\right). \tag{5.132}$$

On peut maintenant calculer la largeur du doublet n en utilisant la formule (4.35) avec les traces (5.124) et (5.125)

$$\Delta_n(T) \sim \frac{\hbar}{2T}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\tilde{S}_{\mathfrak{o}}}, \tag{5.133}$$

$$\sim \frac{\hbar}{2T}\sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{w_{\mathfrak{r}}+w_{\mathfrak{m}}+4}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)[w_{\mathfrak{r}}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}+(w_{\mathfrak{m}}+1/2)\tilde{S}_{\mathfrak{m}}+\mathrm{i}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}]} \tag{5.134}$$

où la somme s'effectue sur toutes les classes topologiques qui conservent (5.127). On souhaite encore une fois imiter un temps réel en choisissant $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{m}}$ suffisamment grand de façon à vérifier $\mathrm{Re}\,T \gg |\,\mathrm{Im}\,T|$. Les entiers $w_{\mathfrak{r}}$ et $w_{\mathfrak{m}}$ doivent être d'autant plus grands que la période $T_{\mathfrak{c}}$ est beaucoup plus longue que $T_{\mathfrak{r}}$ et $T_{\mathfrak{m}}$ dans la limite semiclassique $E_n \gtrsim 0$. Cette condition, comme on l'a déjà vu, donne une meilleure approximation de ΔE_n et rend négligeable l'influence de τ dans la formule $\Delta_n(T)$. On doit enfin déterminer le nombre de classes topologiques de trajectoires possibles. Les différentes classes que nous allons trouver ne modifient pas la partie imaginaire du temps $T_{\mathfrak{o}}$ et de l'action $\mathfrak{o}$ dans la somme (5.134). On commence par relever les différentes classes déjà évoquées dans le double puits ou le pendule. Premièrement, on distingue les 4 classes de trajectoires dont le point de départ peut être situé sur une des deux branches $\beta = \pm$ du tore $\mathfrak{r}$ d'énergie E_n et le point d'arrivé sur une des deux branches $\beta' = \pm$ du tore $\mathfrak{l}$ symétrique de $\mathfrak{r}$. Ensuite, il est possible d'échanger le nombre de tours effectués sur les tores $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$: si on fait r tours sur $\mathfrak{r}$, il reste $w_{\mathfrak{r}} - r$ tours à faire sur $\mathfrak{l}$ et r peut prendre les valeurs $r = 0, \ldots, w_{\mathfrak{r}}$. On compte donc déjà $4(w_{\mathfrak{r}}+1)$ classes topologiques différentes. Cependant, nous n'avons pas encore recenser toutes les classes. En effet, il faut également retenir les échanges possibles entre les $w_{\mathfrak{m}}$ tours dans le puits central et les $w_{\mathfrak{r}}$ tours distribués dans les puits de droite et gauche tels que

$$\mathrm{Re}\,T \simeq w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E_n) + \left(w_{\mathfrak{m}} + \frac{1}{2}\right)T_{\mathfrak{m}}(E_n). \tag{5.135}$$

La formule (5.134) se réécrit alors

$$\Delta_n(T) \sim \frac{\mathrm{i}\hbar}{2T}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar}\sum_{\{w_{\mathfrak{r}},w_{\mathfrak{m}}\}} 4(w_{\mathfrak{r}}+1)\mathrm{e}^{[\mathrm{i}w_{\mathfrak{r}}(\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)/\hbar-\pi)+\mathrm{i}(w_{\mathfrak{m}}+1/2)(\tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E_n)/\hbar-\pi)]}, \tag{5.136}$$

où la somme est effectué sur tous les couples $\{w_{\mathfrak{r}}, w_{\mathfrak{m}}\}$ qui vérifient (5.135). On choisit, ici encore, d'utiliser la condition de quantification des états localisés sur les tores $\mathfrak{r}$ et $\mathfrak{l}$ des puits latéraux

$$\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n) = 2\pi\hbar\left(\nu_{\mathfrak{r}} + \frac{1}{2}\right), \qquad \nu_{\mathfrak{r}} \in \mathbb{N}. \tag{5.137}$$

Si on écrit l'action du tore $\mathfrak{m}$ d'énergie E_n comme

$$\tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E_n) = 2\pi\hbar\left(\nu_{\mathfrak{m}} + \frac{1}{2}\right), \tag{5.138}$$

alors ce tore réalise la condition de quantification quand $\nu_{\mathfrak{m}}$ est aussi un entier naturel. Dans ce cas, la somme dans (5.136) atteint un maximum (résonance) et fournit des interférences constructives à la Fabry-Pérot [14]. Ces interférences sont dues aux répétitions des orbites $\mathfrak{m}$ qui apparaîssent dans la somme. On est en présence d'une résonance quantique telle que nous l'avons définie au le chapitre 3. On retrouve d'ailleurs les mêmes conditions de quantification (3.10) et (3.15). Cela signifie qu'au voisinage d'une résonance un niveau localisé dans le puits central est quasidégénéré avec le doublet tunnel dont les états sont localisés dans les puits latéraux.

On peut tenter d'évaluer la somme de l'expression (5.136) en supposant que le rapport entre les périodes des orbites primitives du puits central et des puits latéraux est approché par un rationnel

$$\frac{T_{\mathfrak{r}}}{T_{\mathfrak{m}}} \simeq \frac{r}{m}. \tag{5.139}$$

où r et m sont des entiers premiers entre eux. Dans ce cas, on peut réécrire la partie réelle du temps comme

$$\operatorname{Re} T \simeq w_{\mathfrak{r}} T_{\mathfrak{r}} + \left(w_{\mathfrak{m}} + \frac{1}{2}\right) T_{\mathfrak{m}} \simeq \left(w_{\mathfrak{r}}\frac{r}{m} + w_{\mathfrak{m}} + \frac{1}{2}\right) T_{\mathfrak{m}} \simeq \left(K + \frac{1}{2}\right) T_{\mathfrak{m}}, \tag{5.140}$$

avec $K \stackrel{\text{def}}{=} \lceil w_{\mathfrak{m}} + w_{\mathfrak{r}}(r/m)\rceil$ où $\lceil\cdot\rceil$ indique que l'on prend la partie entière. Sous ces conditions, l'expression (5.134) devient

$$\Delta_n(T) \sim \frac{2\hbar\mathrm{i}}{T}\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\nu_{\mathfrak{m}}} \sum_{w_{\mathfrak{m}}=0}^{K} [m(K - w_{\mathfrak{m}}) + 1]\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}[m(K-w_{\mathfrak{m}})\nu_{\mathfrak{r}} + w_{\mathfrak{m}}\nu_{\mathfrak{m}}]}. \tag{5.141}$$

Cette série géométrique peut être évaluée approximativement dans la limite $K \to \infty$, c'est-à-dire lorsque l'on souhaite retrouver la limite d'un temps T réel, et le développement de la somme mène à

$$|\Delta_n| \stackrel{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{T_{\mathfrak{r}}} \frac{\mathrm{e}^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar}}{|\sin[\pi(m\nu_{\mathfrak{r}} - r\nu_{\mathfrak{m}})]|}. \tag{5.142}$$

Dans le cas d'un potentiel polynomial d'ordre 6 comme celui défini au chapitre 3 par (3.1), il est possible de montrer que l'hypothèse (5.139) est exacte, avec les valeurs $r = 2$ et $m = 1$, en étendant l'argument d'analyse complexe proposé dans [57]. Sans surprise, la formule (5.142) présente des singularités, causées par le dénominateur, lorsqu'un niveau associé au puits central est quasidégénéré avec le doublet. Cette expression est en très bon accord avec la valeur « exacte » ΔE_n obtenue par diagonalisation et on observe que l'approximation reste même valable au voisinage des résonances où les conditions de validité de $\Delta_n(T)$ (à savoir que le doublet doit être isolé des autres niveaux) ne sont plus justifiées (5.8). On peut comprendre l'influence d'une rotation de Wick incomplète sur les résonances en gardant K fini. En écrivant que

$$T = \left(K + \frac{1}{2}\right) T_{\mathfrak{m}} - \mathrm{i}T_{\mathfrak{c}} = |T|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}, \tag{5.143}$$

avec $\theta \in [0, \pi/2]$, on voit que $\theta \to 0$ lorsque $K \to \infty$. En revanche, lorsque K est fini, la somme (5.141) contient un nombre de termes finis et il n'y a plus de singularités mais des pics de hauteur finie. Ces pics de résonance tendent à s'aplanir lorsque K diminue, ou autrement dit lorsque θ augmente. Ils sont complètement détruits au delà d'un angle θ faible, bien avant d'avoir achevé la rotation de Wick complète. La condition de retrouver la limite d'un temps réel en choisissant $\operatorname{Re} T \gg |\operatorname{Im} T|$ n'est pas une option dans l'approche proposée ici, si l'on souhaite décrire les pics de résonance observés. Le mécanisme présenté ici explique la remarque faite au chapitre 3 concernant la disparition totale des pics de résonances lors de l'application d'une rotation de Wick complète sur la formule (3.14). La rotation de Wick détruit les fluctuations de plusieurs ordres de grandeur présentes dans l'effet tunnel résonant intégrable et ce phénomène a été également observé dans le cas de systèmes chaotiques [75] où on constate que les fluctuations les plus faibles sont très rapidement détruites pour ne garder que les plus fortes. Les plus persistentes sont néanmoins également détruites bien avant d'achever une rotation de Wick complète.

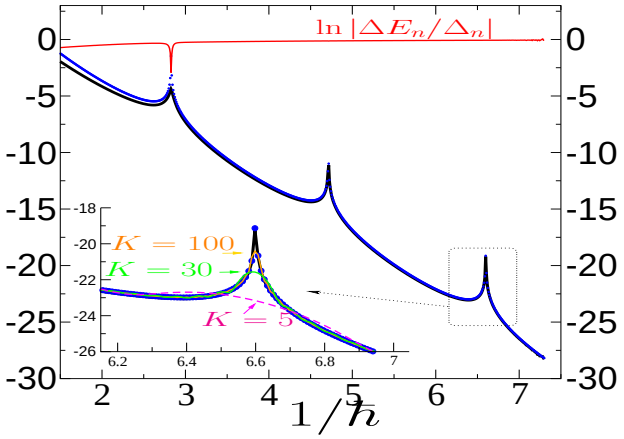


FIG. 5.8: On trace le logarithme de la largeur du doublet le plus bas, dans les puits latéraux, $\ln|\Delta E_n|$ en fonction de $1/\hbar$ pour le triple puits défini par le potentiel (3.1) avec les valeurs de paramètres $a = 7/4$ et $b = 1/2$. L'énergie moyenne de ce doublet s'écrit $E_n \simeq E_n^{\pm} \simeq \hbar\omega/2$ avec la fréquence des petites oscillations dans les puits latéraux $\omega = 2a\sqrt{2(a^2 - b^2)} \simeq 6.30$. La courbe noire correspond au calcul exact par diagonalisation tandis que les pointillés bleus sont le résultat de l'approximation (5.142), lorsque l'on reproduit un temps réel ($K \to \infty$). La formule s'accorde très bien avec le calcul exact, en particulier dans le régime le plus semiclassique comme le montre la courbe rouge qui évalue le logarithme $\ln|\Delta E_n/\Delta_n|$, et reproduit les pics de résonances avec une justesse étonnante, comme on l'observe sur l'agrandissment du troisième pic ($1/\hbar \simeq 6.6$), puisque les conditions de validité ne devrait pas permettre de décrire ces régions correctement. On peut évaluer numériquement les périodes au voisinage de la résonance et on obtient $2T_{\mathfrak{r}} = T_{\mathfrak{m}} \simeq 1.58$ et $T_{\mathfrak{c}} \simeq 1.50$. Les courbes respectives rose, verte et orange correspondent à l'évaluation numérique de la somme (5.141) pour K fini (respectivement $K = 5$,$K = 30$ et $K = 100$). Avec (5.143), on interprète le nombre de termes dans la somme comme une rotation du temps dans le plan complexe. On obtient respectivement $\theta \simeq 0.17$, $\theta \simeq 0.03$ et $\theta \simeq 0.01$ et constate que les pics de résonance disparaissent déjà alors que l'angle de rotation θ dans le plan complexe est pourtant encore très loin de $\pi/2$ (rotation de WICK).

Troisième partie

Une voie vers les chaînes de résonances ?

« C'est véritablement utile puisque c'est joli. »

Antoine de Saint-Exupéry, **Le Petit Prince**

Chapitre 6

Enrichir l'espace des phases

Au chapitre (3) et à la section (5.4), nous avons défini les résonances quantiques comme de larges fluctuations de la largeur de doublets d'énergie quasidégénérés (E_n^+, E_n^-) présent dans le spectre du hamiltonien. La largeur de ces doublets est une signature spectrale de l'effet tunnel dans les systèmes fermés et les résonances observées indiquent que le transport d'un état quantique est facilité entre deux régions distinctes de l'espace des phases. Nous avons, jusqu'à présent, étudié des systèmes bornés, unidimensionnels et indépendants du temps décrits par des hamiltoniens de la forme

$$H(p,q) = \frac{p^2}{2} + V(q). \tag{6.1}$$

La façon la plus simple d'obtenir des résonances quantiques sous de telles conditions est d'étudier l'effet tunnel entre deux puits symétriques séparés par un troisième puits plus profond que les deux autres. Du point de vue de l'espace des phases, cela revient à étudier l'effet tunnel entre deux tores symétriques distincts séparés par un troisième tore. Nous avons vu comment les résonances sont interprétées semiclassiquement en termes de répétitions d'orbites périodiques classiques complexes sur ce troisième tore. Cependant la topologie de l'espace des phases pour un tel système est suffisamment simple pour trouver de manière assez naturelle les trajectoires complexes qui contribuent à la description semiclassique de l'effet tunnel.

Nous allons maintenant tenter de construire des hamiltoniens toujours unidimensionnels et indépendants du temps mais avec un espace des phases plus riche. En particulier, nous allons chercher à construire deux îlots symétriques principaux séparés par des chaînes de tores (figure (6.1)). L'étude de l'effet tunnel entre ces deux tores principaux par le calcul de la largeur des doublets doit révéler une structure des pics de résonances plus compliquée que pour le triple puits et apparaît comme un élément de preuve de la contribution d'orbites complexes moins évidentes que pour les cas traités précédemment. Cette idée est clairement motivée par le fait que dans les systèmes mixtes, c'est une cascade de chaînes de résonance imbriquées dans une structure de type fractale qui provoque l'apparition du chaos en bord d'îlots. Dans ces dernières, la structure des pics de résonances observés dans le calcul de la largeur des doublets tunnel est hautement non triviale [13]. La théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances, développée ces dernières années [16], montre que ces fluctuations de la transmission tunnel peuvent être interprétées, dans le cadre de la théorie quantique

des perturbations, à l'aide de certains couplages entre le quasimode concerné par le doublet localisé dans l'îlot régulier et des états excités localisés sur des tores au-delà de la chaîne de résonance classique. Nous reviendrons par la suite sur ce traitement. Bien entendu, le caractère intégrable des hamiltoniens qui nous intéressent permet le prolongement analytique de trajectoires classiques dans le plan complexe reliant deux tores appartenant à des régions distinctes dans l'espace des phases réel contrairement aux systèmes mixtes ou ce prolongement est compromis par la présence de frontières naturelles [39]. Dans ce sens, une étude systématique de ce type de hamiltoniens intégrables peut être vue comme une étape intermédiaire à la compréhension, partielle, par les trajectoires complexes, de l'effet tunnel dans les systèmes quasi-intégrables. L'objectif sera de construire une théorie semiclassique à la Maslov et d'extraire les trajectoires classiques complexes qui contribuent à l'effet tunnel pour de tels systèmes. L'effet tunnel assisté par les résonances est la théorie qui décrit le mieux à l'heure actuelle les fluctuations géantes de l'effet tunnel dans les systèmes mixtes. Il semble donc utile de vérifier avant de s'attaquer à une étude semiclassique proprement dite, cette théorie et de tenter de l'adapter aux modèles intégrables unidimensionnels que nous allons choisir par la suite. Nous présenterons ici quelques développements de la première étape de ce projet en cours.

6.1 Une forme normale, un modèle

Nous allons maintenant présenter comment construire la classe de hamiltoniens qui va nous intéresser par la suite. Pour cela, nous allons avoir besoin d'utiliser les formes normales présentées au chapitre 2. En effet, dans le cas unidimensionnel, il n'est pas possible de créer des chaînes de résonance en utilisant un hamiltonien purement quadratique en impulsion comme défini en (6.1). L'idée générale est alors de construire des hamiltoniens unidimensionnels indépendants du temps sous la forme d'un polynôme en (p, q) dont le portrait de phase présente un îlot central dominant entouré par une (ou plusieurs) chaîne(s) de tores résonants. Nous allons nous concentrer principalement sur le cas d'une seule chaîne de résonance. Par souci de clarté, nous choisirons d'adapter l'expression d'un hamiltonien sous forme normale définie en (2.29) et de construire le modèle suivant

$$\begin{aligned} h(p,q) &= \frac{a_0}{2}(p^2+q^2) + a_1(p^2+q^2)^2 + b\Re[(p+\mathrm{i}q)^4], && (6.2)\\ &= \frac{a_0}{2}(p^2+q^2) + a_1(p^2+q^2)^2 + b(p^4 - 6p^2q^2 + q^4). && (6.3) \end{aligned}$$

Les coefficients $\{a_0, a_1, b\}$ seront choisis réels afin de conserver un hamiltonien réel au départ. Avec des valeurs adaptées de ces coefficients, le hamiltonien choisi ici possède une chaîne de résonance d'ordre 4 comme nous le verrons par la suite. Bien sûr, il est possible d'augmenter l'ordre de la résonance en augmentant l'ordre du polynôme. Cependant, nous n'avons créé qu'un seul îlot dominant et afin d'étudier l'effet tunnel entre deux tores symétriques, on décide de rendre périodique le hamiltonien (6.3) en transformant les variables (p, q) comme

$$H(p,q) \stackrel{\text{def}}{=} h\Big(\sin\left(\frac{p}{2}\right), \sin\left(\frac{q}{2}\right)\Big). \tag{6.4}$$

De cette manière, l'espace des phases forme un réseau de cellules élémentaires, $2\pi-$périodique en p et q. Il est possible d'étudier l'effet tunnel entre deux ou plusieurs cellules, aussi bien

en position qu'en impulsion en fonction des conditions aux bords choisies. La périodicité du système nous autorise à utiliser la théorie de FLOQUET. Supposons alors un système périodique en p et q de périodes respectives M_p et M_q. On peut alors définir deux opérateurs de translations (en position et en impulsion) unitaires comme

$$\hat{T}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}M_q/\hbar}, \tag{6.5}$$

$$\hat{T}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{q}M_p/\hbar}, \tag{6.6}$$

tels que

$$\hat{T}_1|q\rangle = |q+M_q\rangle, \tag{6.7}$$

$$\hat{T}_2|p\rangle = |p+M_p\rangle. \tag{6.8}$$

Le hamiltonien périodique $\hat{H}(p,q)$ vérifie l'équation aux valeurs propres $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ et indépendamment, chacun des opérateurs $\hat{T}_1$ et $\hat{T}_2$ commute avec le hamiltonien $\hat{H}$ et vérifient donc, pour l'état $|\psi\rangle$, les équations aux valeurs propres

$$\hat{T}_1|\psi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_q}|\psi\rangle, \tag{6.9}$$

$$\hat{T}_2|\psi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_p}|\psi\rangle, \tag{6.10}$$

définissant la phase de BLOCH $\vec{\theta} = (\theta_p, \theta_q)$. Cependant ces opérateurs $\hat{T}_1$ et $\hat{T}_2$ ne commutent *a priori* pas entre eux. Cependant, en utilisant la relation d'opérateurs

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{[\hat{A},\hat{B}]}, \tag{6.11}$$

si on calcule

$$\hat{T}_1\hat{T}_2|\psi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}M_q/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{q}M_p/\hbar}|\psi\rangle, \tag{6.12}$$

$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{q}M_p/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{p}M_q/\hbar}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)M_pM_q}|\psi\rangle, \tag{6.13}$$

$$= \hat{T}_2\hat{T}_1\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)M_pM_q}|\psi\rangle, \tag{6.14}$$

on obtient la condition de quantification sur $\hbar$

$$\hbar = \frac{M_pM_q}{2\pi N}, \qquad N \in \mathbb{N}. \tag{6.15}$$

Sous cette condition, les deux opérateurs de translation commutent et il existe alors une base commune où $\hat{H}$, $\hat{T}_1$ et $\hat{T}_2$ sont diagonaux. Cette condition permet de travailler avec des valeurs de $\hbar$ discrètes et des matrices de taille N finie pour le hamiltonien (le spectre est donc discret et fini). Dans notre cas, $M_p = M_q = 2\pi$ et par la suite, nous nous restreindrons à l'étude de l'effet tunnel en position entre chaque puits des deux cellules élémentaires centrées en $(p=0, q=0)$ et $(p=0, q=2\pi)$ et nous travaillerons avec les fonctions d'onde symétriques et antisymétriques en position en définissant les phases de BLOCH respectivement comme $\vec{\theta} = (0,0)$ et $\vec{\theta} = (0,\pi)$.

Afin d'appliquer la théorie des perturbations séculaire, les coefficients seront choisis de sorte à faire apparaître les résonances comme de petites perturbations d'un hamiltonien H_0 non perturbé. On voit clairement que le terme perturbatif est joué par le dernier terme de la somme (6.3) où le coefficient b joue le rôle du paramètre de la perturbation. Lorsque $b = 0$, une cellule élémentaire est formée seulement d'un puits tandis que même pour de petites valeurs de b, on voit se dessiner une chaîne de tores résonants. On peut observer l'influence de b sur l'espace des phases sur la figure (6.1).

6.2 Effet tunnel assisté par les résonances

6.2.1 Systèmes quasi-intégrables

Dans cette section, nous allons commencer par décrire très brièvement la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances [16] ainsi que ses récentes améliorations [67] afin de comprendre comment adapter la théorie dans le cas de la classe de hamiltoniens décrite précédemment et de voir quelles étapes de la théorie pourront être simplifiées.

Supposons un système unidimensionnel dépendant périodiquement du temps tel que le hamiltonien vérifie $H(p,q,t) = H(p,q,t+\tau)$ et que pour un choix raisonnable des paramètres du hamiltonien, la section de Poincaré de l'espace des phases classique décrive deux îlots principaux réguliers symétriques, à l'intérieur desquels on distingue principalement une chaîne de résonances non linéaires d'ordre $r:s$, entourés par une mer chaotique. L'espace des phases révèle alors r îlots de taille plus petites entourant chaque îlot principal. Dans le cas d'un régime quasi-intégrable, c'est-à-dire où la perturbation qui rend le système non intégrable est suffisamment faible, on peut décrire le hamiltonien $H(p,q,t)$ à l'aide d'une approximation intégrable (en utilisant, par exemple, une méthode basée sur les transformations de Lie [66]) que l'on peut réécrire dans les coordonnées action-angles sous la forme

$$H(I,\theta,t) = H_0(I) + V(I,\theta,t), \tag{6.16}$$

où $V(I,\theta,t)$ correspond à une faible perturbation de l'approximation intégrable $H_0(I)$ du hamiltonien initial. La condition de résonance est donnée par

$$\frac{\sigma_{r:s}}{\omega} = \frac{s}{r} \tag{6.17}$$

avec les pulsations $\omega = 2\pi/\tau$ et $\sigma_{r:s} = \mathrm{d}H_0(I_{r:s})/\mathrm{d}I$. Ici, $I_{r:s}$ correspond à la valeur de l'action des points fixes de la chaîne de résonances.

La première étape consiste à éliminer la dépendance explicite en temps à l'aide du changement de variables canonique

$$\theta \mapsto \Theta = \theta - \sigma_{r:s} t \tag{6.18}$$

qui tourne avec la résonance, transformant alors H_0 et V comme

$$H_0(I) \mapsto H_0(I) - \sigma_{r:s} I, \tag{6.19}$$

$$V(I,\theta,t) \mapsto \bar{V}(I,\Theta,t) = V(I,\Theta+\sigma_{r:s}t,t). \tag{6.20}$$

En remarquant que la perturbation $\bar{V}(I,\Theta,t)$ est $r\tau-$périodique et que l'angle Θ varie lentement avec le temps au voisinage d'une résonance ($I \sim I_{r:s}$), on peut la remplacer par sa moyenne $\bar{V}(I,\Theta)$ sur une période $r\tau$.

L'étape suivante consiste à développer la perturbation en série de Fourier en t et θ pour finalement obtenir l'expression générale

$$\bar{V}(I,\Theta) = \sum_{k=1}^{\infty} 2V_k \cos(kr\Theta + \phi_k) \tag{6.21}$$

où on choisit, pour le moment, de négliger la dépendance en action des coefficients de FOURIER $V_k \stackrel{\text{def}}{=} V_k(I_{r:s})$. En utilisant (6.16), (6.19) et (6.21), on peut donc écrire la forme du hamiltonien au voisinage d'une résonance

$$\mathbf{H}(I,\Theta) = H_0(I) - \sigma_{r:s} I + \sum_{k=1}^{\infty} 2V_k \cos(kr\Theta + \phi_k). \tag{6.22}$$

On peut montrer que les coefficients V_k décroissent suivant une loi exponentielle lorsque que k est suffisamment grand [17]. Cette propriété asymptotique nous autorise à retenir uniquement le premier terme (proportionnel à V_1) dans le développement en série de FOURIER (6.21). En remplaçant $H_0(I)$ par son approximation harmonique autour de l'action $I_{r:s}$

$$\begin{aligned} H_0(I) &\simeq H_0(I_{r:s}) + (I - I_{r:s}) \left.\frac{\mathrm{d}H_0}{\mathrm{d}I}\right|_{I=I_{r:s}} + \frac{(I-I_{r:s})^2}{2} \left.\frac{\mathrm{d}^2 H_0}{\mathrm{d}I^2}\right|_{I=I_{r:s}}, \\ &\simeq H_0(I_{r:s}) + (I - I_{r:s})\sigma_{r:s} + \frac{1}{2M_{r:s}}(I - I_{r:s})^2, \end{aligned} \tag{6.23}$$

cela revient finalement à traiter le hamiltonien (6.22) au voisinage de la résonance $(r:s)$ comme un pendule simple

$$\mathbf{H}(I,\Theta) \simeq H_0(I_{r:s}) - \sigma_{r:s} I_{r:s} + \frac{(I - I_{r:s})^2}{2M_{r:s}} + 2V_1 \cos(r\Theta + \phi_1). \tag{6.24}$$

L'effet de la résonance étant supposé faible, on peut maintenant traiter quantiquement le hamiltonien précédent, défini par l'opérateur $\hat{\mathbf{H}}(I,\Theta)$, avec la théorie quantique des perturbations stationnaires en choisissant la partie dépendant uniquement de l'action comme la partie non perturbée et le terme dépendant de $\hat{\Theta}$, la perturbation. En notant $\{|n\rangle\}$ la base propre de l'opérateur $\hat{I} = -\mathrm{i}\hbar\partial/\partial\hat{\Theta}$, et donc du hamiltonien non perturbé, tel que

$$\hat{I}|n\rangle = I_n|n\rangle = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \tag{6.25}$$

$$\hat{H}_0(I)|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle, \tag{6.26}$$

on remarque que la perturbation crée des couplages uniquement entre les états non perturbés qui vérifient, d'après (6.24), la règle $|n - n'| = r$. Ces couplages s'écrivent

$$\langle n + r|\hat{\mathbf{H}}|n\rangle = V_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}. \tag{6.27}$$

Cette règle de sélection permet d'obtenir, de manière approchée, les états propres $|\psi_n\rangle$ du hamiltonien $\hat{\mathbf{H}}(I,\Theta)$ à partir de la théorie quantique des perturbations

$$|\psi_n\rangle \simeq |n\rangle + \sum_{k>0} A_{n,kr}^{r:s} |n + kr\rangle \tag{6.28}$$

avec

$$A_{n,kr}^{r:s} = \prod_{l=1}^{k} \frac{V_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}}{E_n^{(0)} - E_{n+lr}^{(0)} + ls\omega\hbar}. \tag{6.29}$$

En utilisant l'approximation harmonique (6.23), il est possible de comprendre plus facilement le comportement des termes de la somme (6.28). En effet, les dénominateurs des coefficients de la somme peuvent se réécrire en fonction des actions I_n et $I_{r:s}$

$$E_n^{(0)} - E_{n+lr}^{(0)} + ks\omega\hbar \simeq (I_n - I_{n+lr})(I_n + I_{n+lr} - 2I_{r:s}). \tag{6.30}$$

On remarque alors qu'une divergence apparaît dans la somme (6.28) lorsque deux quasimodes non perturbés $|n\rangle$ et $|n+lr\rangle$ sont localisés sur des tores disposés symétriquement de part et d'autre de la résonance et qui vérifient donc $(I_n + I_{n+lr})/2 \simeq I_{r:s}$. La présence d'une résonance non linéaire permet donc de coupler le quasimode non perturbé d'énergie $E_n^{(0)}$ localisé dans l'îlot régulier sur le tore I_n, avec des états plus excités situés au delà de la chaîne de résonance sur les tores I_{n+lr}.

Précédemment, nous avons considéré les coefficients V_k de la série de Fourier (6.21) constant. Cette approximation est justifiée dans la limite semiclassique car la taille des cellules quantiques élémentaires $\Delta p \Delta q \sim \hbar$ est suffisamment petite pour pouvoir résoudre dans l'espace des phases un grand nombre d'autres résonances que celle considérée auparavant. Dans ce cas, le mécanisme de couplage s'applique à plusieurs de ces résonances et on peut s'attendre à ce que les transitions à travers chacune d'elles s'effectuent avec une action constante au premier ordre autour de l'action $I_{r:s}$ associée à celles-ci. En revanche, pour une valeur finie de $\hbar$ qui ne laisse intervenir qu'une seule chaîne de résonances dominante dans la dynamique quantique, le couplage entre deux états localisés sur des tores situés (suffisamment loins) de chaque coté de la chaîne de résonance ne peut pas, en général, être évalué avec une action constante au voisinage de la résonance. Afin de remédier au problème, il a récemment été proposé [67] d'approcher la dépendance en I des coefficients V_k en utilisant les formes normales de Birkhoff-Gustavson. Classiquement, si on suppose que le hamiltonien $H(p,q,t)$ est analytique en (p,q) près des îlots réguliers, on peut définir une transformation canonique locale $(p,q) \mapsto (P,Q)$ telle que

$$P = -\sqrt{2I}\sin\theta, \qquad Q = \sqrt{2I}\cos\theta. \tag{6.31}$$

En appliquant encore une transformation du type (6.18), on peut réécrire la perturbation (6.21) comme

$$\bar{V}(I,\Theta) = \sum_{k=1}^{\infty} V_k(I)\Big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr\Theta+\phi_k)} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr\Theta+\phi_k)}\Big), \tag{6.32}$$

$$\overset{6.31}{=} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{V_k(I)}{(2I)^{kr/2}}\Big[(Q-\mathrm{i}P)^{kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_k} + (Q+\mathrm{i}P)^{kr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_k}\Big]. \tag{6.33}$$

La perturbation étant analytique en (P,Q), on suppose que la dépendance en action des coefficients doit être au moins d'ordre $V_k(I) = v_k(I)^{kr/2}$ où v_k est, en première approximation, une constante. Quantiquement, on propose de réécrire les combinaisons linéaires d'opérateurs $(\hat{Q} \pm \mathrm{i}\hat{P})$ avec les opérateurs de création et d'annihilation

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{Q} + \mathrm{i}\hat{P}), \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{Q} - \mathrm{i}\hat{P}). \tag{6.34}$$

Le hamiltonien quantique $\hat{\mathbf{H}}(I,\Theta)$ défini en (6.22) devient donc

$$\hat{\mathbf{H}}(I,\Theta) = \hat{H}_0(\hat{I}) - \sigma_{r:s}\hat{I} + \sum_{k=1}^{\infty} v_k \hbar^{kr/2}\Big[(\hat{a}^\dagger)^{kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_k} + (\hat{a})^{kr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_k}\Big]. \tag{6.35}$$

On peut finalement évaluer les couplages (6.27) qui apparaîssent dans l'expression (6.28)

$$\langle n+kr|\hat{\mathbf{H}}|n\rangle = v_k\hbar^{kr/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_k}\sqrt{\frac{(n+kr)!}{n!}}, \qquad k>0. \tag{6.36}$$

Nous nous restreindrons par la suite, comme nous l'avons fait en (6.27), aux couplages n'impliquant que le coefficient de Fourier $V_1(I)$. Pour terminer, on peut écrire la largeur du doublet ΔE_n en utilisant l'état $|\psi_n\rangle$ (6.28) obtenu grâce à la théorie quantique des perturbations dont les éléments de matrice sont donnés par la formule (6.36). On s'intéressera principalement au fondamental pour lequel on obtient l'expression

$$\Delta E_0 = \Delta E_0^{(0)} + \sum_{k=1} |A_{0,kr}^{r:s}|^2 \Delta E_{kr}^{(0)}, \tag{6.37}$$

avec

$$A_{0,kr}^{r:s} = \prod_{l=1}^{k} \frac{\langle lr|\hat{\mathbf{H}}(I,\Theta)|(l-1)r\rangle}{E_0^{(0)} - E_{lr}^{(0)} + ls\omega\hbar}. \tag{6.38}$$

Les $\Delta E_{kr}^{(0)}$ sont les largeurs des doublets pour le hamiltonien non perturbé $H_0(I)$ et peuvent être évaluées de manière générale, en suivant par exemple [24]. On obtient

$$\Delta E_n^{(0)} \simeq \frac{\hbar|\omega_n|}{\pi}\mathrm{e}^{-S_n/\hbar}, \tag{6.39}$$

à un facteur d'ordre 1 près. L'action S_n est la partie imaginaire de l'action complexe associée à la trajectoire complexe qui relie les deux tores réels symétriques mis en jeu dans le doublet et ω_n correspond à la fréquence d'oscillation sur le tore I_n tel que $\omega_n = \mathrm{d}H_0(I_n)/\mathrm{d}I$. On remarque que le terme qui va généralement dominer la somme (6.37) est celui qui contient l'état non perturbé $|kr\rangle$, d'énergie $E_{kr}^{(0)}$, qui couple l'état fondamental non perturbé $|0\rangle$, d'énergie $E_0^{(0)}$, et dont les tores associés I_0 et I_{kr} sont localisés symétriquement de part et d'autre de la chaîne de résonance. Ce couplage induit donc une augmentation considérable de la largeur du doublet perturbé ΔE_0 et est responsable des pics de résonances observés lorsque l'on fait varier un paramètre, disons $\hbar$.

Il est important de noter que l'approximation adiabatique qui autorise à remplacer la perturbation (6.20) par sa moyenne n'est valable qu'au voisinage de $I_{r:s}$. D'un autre côté, l'utilisation des formes normales en (6.20) est justifiée au voisinage de l'origine $(P,Q) = (0,0)$. Par conséquent, l'action $I_{r:s}$ est nécessairement petite et la chaîne de résonance $(r:s)$ doit être suffisamment proche du centre des îlots réguliers de l'espace des phases.

6.2.2 Systèmes intégrables

Dans cette section, nous proposons d'adapter la théorie décrite précédemment au cas des hamiltoniens unidimensionnels intégrables construits à l'aide des formes normales, en particulier celui défini en (6.4)

$$H(p,q) = H_0(p,q) + V(p,q), \tag{6.40}$$

avec

$$H_0(p,q) = \frac{a_0}{2}\Big[\sin^2\left(\frac{p}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q}{2}\right)\Big] + a_1\Big[\sin^2\left(\frac{p}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{q}{2}\right)\Big]^2, \tag{6.41}$$

$$V(p,q) = b\Big[\sin^4\left(\frac{p}{2}\right) + \sin^4\left(\frac{q}{2}\right) - 6\sin^2\left(\frac{p}{2}\right)\sin^2\left(\frac{q}{2}\right)\Big]. \tag{6.42}$$

On peut calculer exactement les points fixes du système perturbé $H(p,q)$ et non perturbé $H_0(p,q)$. On résout donc

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \cos\left(\frac{p}{2}\right)\sin\left(\frac{p}{2}\right)\Big[\frac{a_0}{2} + 2(a_1+b)\sin^2\left(\frac{p}{2}\right) + 2(a_1-3b)\sin^2\left(\frac{q}{2}\right)\Big] = 0, \tag{6.43}$$

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \cos\left(\frac{q}{2}\right)\sin\left(\frac{q}{2}\right)\Big[\frac{a_0}{2} + 2(a_1+b)\sin^2\left(\frac{q}{2}\right) + 2(a_1-3b)\sin^2\left(\frac{p}{2}\right)\Big] = 0. \tag{6.44}$$

En examinant Les points fixes du hamiltonien non perturbé ($b=0$) dans la cellule élémentaire centrée en $(p,q)=(0,0)$, on obtient alors

$$\rho_0^{(0)} = \begin{pmatrix} p=0 \\ q=0 \end{pmatrix}, \quad \rho_{\pi,\pi}^{(0)} = \begin{pmatrix} p=\pi \\ q=\pi \end{pmatrix}, \quad \rho_{0,\pi}^{(0)} = \begin{pmatrix} p=0 \\ q=\pi \end{pmatrix}, \quad \rho_{\pi,0}^{(0)} = \begin{pmatrix} p=\pi \\ q=0 \end{pmatrix}, \tag{6.45}$$

$$\rho_{*,\pm}^{(0)} = (p_*^{\pm}, q_*) \quad \text{tels que} \quad p_*^{\pm} = \pm\arcsin\Big[\sqrt{\frac{a_0}{4a_1} - \sin^2\left(\frac{q_*}{2}\right)}\Big]. \tag{6.46}$$

Les points $(p_*^{\pm}, q_*)$ forment une ligne fermée dans l'espace des phases où l'énergie est maximale et sera notée $H_0(p_*^{\pm}q_*) = E_{max}$ (voir figure (6.2)). Dans le cas perturbé, on retrouve les mêmes points fixes, exceptés $(p_{*,\pm}, q_*)$, et de nouveaux points d'équilibre apparaîssent

$$\rho_{\pm} = \begin{pmatrix} p=0 \\ q=\pm 2\arcsin[\sqrt{-a_0/4(a_1+b)}] \end{pmatrix}, \tag{6.47}$$

$$\rho_{\pm}^{\pm} = \begin{pmatrix} p=\pm 2\arcsin[\sqrt{-a_0/8(a_1-b)}] \\ q=\pm 2\arcsin[\sqrt{-a_0/8(a_1-b)}] \end{pmatrix}, \tag{6.48}$$

$$\rho^{\pm} = \begin{pmatrix} p=\pm 2\arcsin[\sqrt{-a_0/4(a_1+b)}] \\ q=0 \end{pmatrix}. \tag{6.49}$$

La chaîne de tores résonants se dessine autour de ces points d'équilibre comme le montre la figure (6.2).

Cependant pour pouvoir travailler confortablement avec la théorie décrite précédemment, nous allons simplifier localement le problème. Au voisinage du point d'équilibre

$(p,q)=(0,0)$ où $H(0,0)=H_0(0,0)=0$ (quelles que soient les valeurs de $\{a_0,a_1,b\}$), il est possible de faire un développement de TAYLOR du hamiltonien (6.40) qui s'écrit alors

$$H(p,q)\simeq\tilde{H}(p,q)=\frac{a_0}{8}(p^2+q^2)+\frac{a_1}{16}(p^2+q^2)^2+\frac{b}{16}(p^4+q^4-6p^2q^2)+O_{p,q}(4). \quad (6.50)$$

Ce nouveau hamiltonien $\tilde{H}(p,q)$ n'est plus équivalent à $H(p,q)$ puisque ce dernier est défini globalement dans l'espace des phases tandis que $\tilde{H}(p,q)$ correspond à une approximation locale qui ne décrit la dynamique du système que dans une cellule élémentaire, au voisinage du centre de l'îlot stable. On s'intéresse alors à la cellule élémentaire qui contient un îlot régulier centré sur l'origine de l'espace des phases. On peut réécrire cette dernière forme en coordonnées action-angle en appliquant le changement de variable (local) canonique

$$p=-\sqrt{2I}\sin\theta,\qquad q=\sqrt{2I}\cos\theta, \quad (6.51)$$

utilisé pour passer de (2.29) à (2.30). Ainsi on obtient le hamiltonien (6.40) écrit dans les nouvelles coordonnées (I,θ)

$$\begin{aligned}\tilde{H}(I,\theta) &= \frac{a_0}{8}(2I)+\frac{a_1}{16}(2I)^2+\frac{b}{16}(2I)^2[\sin^4\theta+\cos^4\theta-6\sin^2\theta\cos^2\theta], && (6.52)\\ &= \frac{a_0}{4}I+\frac{a_1}{4}I^2+\frac{b}{4}I^2\cos(4\theta), && (6.53)\\ &= \tilde{H}_0(I)+\tilde{V}(I,\theta) && (6.54)\end{aligned}$$

où $\tilde{H}_0(I)=(a_0I+a_1I^2)/4$ est le hamiltonien non perturbé (au sens où il ne contient pas de résonances classiques) décrivant une cuve d'énergie centrée en $(p,q)=(0,0)$. Le terme $\tilde{V}(I,\theta)=(I^2b/4)\cos(4\theta)$ correspond à la perturbation qui va créer une chaîne de tores résonants autour de l'îlot central. Le hamiltonien $\tilde{H}(I,\theta)$ tel que nous venons de l'écrire va servir de point de départ pour adapter la théorie à notre cas.

Les points d'équilibre de ce nouveau hamiltonien $\tilde{H}$ s'écrivent

$$\begin{aligned}\theta_* &= \frac{m\pi}{4}, && (6.55)\\ I_* &= -\frac{a_0}{2[a_1+b(-1)^m]}, && (6.56)\end{aligned}$$

où $m=0,\ldots,7$. En coordonnées (p,q), les points fixes deviennent

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_\pm &= \begin{pmatrix} p=0\\ q=\pm\sqrt{-a_0/(a_1+b)}\end{pmatrix}, && (6.57)\\ \tilde{\rho}_\pm^\pm &= \begin{pmatrix} p=\pm\sqrt{-a_0/2(a_1-b)}\\ q=\pm\sqrt{-a_0/2(a_1-b)}\end{pmatrix}, && (6.58)\\ \tilde{\rho}^\pm &= \begin{pmatrix} p=\pm\sqrt{-a_0/(a_1+b)}\\ q=0\end{pmatrix}. && (6.59)\end{aligned}$$

On constate que ces points fixes correspondent à ceux du hamiltonien exact (6.47) – (6.49) dans la limite où la chaîne de résonance est suffisamment proche de l'origine. Les points

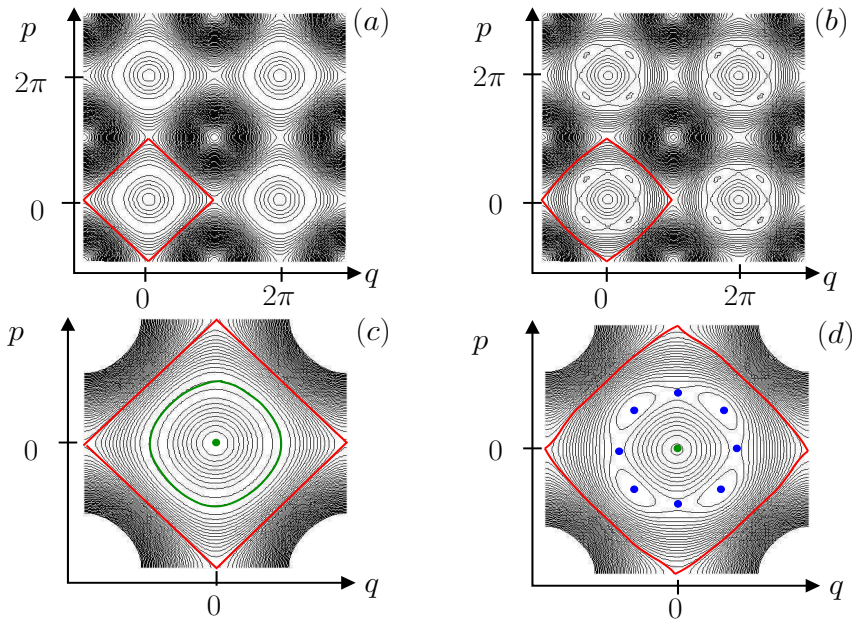


FIG. 6.1: On représente le portrait de phases des hamiltoniens exacts non perturbé $H_0(p,q)$ ((a) et (c)) et perturbé $H(p,q)$ ((b) et (d)) définis en (6.40) pour les valeurs de paramètres respectives $\{a_0 = 1, a_1 = -0.55, b = 0\}$ et $\{a_0 = 1, a_1 = -0.55, b = -0.05\}$. Lorsque $b \neq 0$, on voit se dessiner autour de chaque îlot une chaîne de résonance. Les lignes rouges représentent les séparatrices qui délimitent chaque îlot. Il sera utile, par la suite, d'évaluer l'aire de ces îlots. La ligne verte de la figure (c) est la hauteur maximale de la barrière d'énergie de l'îlot et est définie par les conditions (6.46). Cette limite définit ce que nous appelerons l'oeil de l'îlot qui correspond à une cuve d'énergie dont le fond est un minimum local $H_0(0,0) = 0$ (point vert). Les points bleus de la figure (d), définis par les expressions (6.47)−(6.49), décrivent les nouveaux points d'équilibre de la dynamique perturbée $H(p,q)$ tandis que le point d'équilibre stable $(p,q) = (0,0)$ correspond toujours à un minimum local d'énergie $H(0,0) = 0$.

d'équilibre stables sont $\rho_{\pm}^{\pm}$ ou bien encore en coordonnées action-angle les couples (I_*, θ_*) avec m impair.

Nous allons maintenant suivre la démarche développée dans la section précédente. L'application de la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances devrait être considérablement facilitée par le choix du type de hamiltoniens que nous avons construit à l'aide des formes normales. En effet, contrairement aux systèmes quasi-intégrables $1D$ utilisés précédemment, l'indépendance en temps et la forme polynômiale des modèles que nous avons construits nous dispensent déjà de plusieurs approximations. La première d'entre elles concerne la transformation qui permet d'éliminer la dépendance temporelle du hamiltonien $H(I, \theta, t)$ en utilisant un changement de coordonnées qui tourne avec la dynamique au voisinage des résonances. Le hamiltonien (6.54) est directement utilisable puisqu'il est indépendant du temps ($\omega = 0$). Dans le cadre de la théorie pour les systèmes quasi-intégrables, le terme perturbatif du hamiltonien (6.16) est traité en le développant en série de Fourier en θ et t. La dépendance en action des coefficients de Fourier $V_k(I)$ est évaluée en supposant qu'il est possible de définir un changement de coordonnées analytique local qui permet de réécrire la perturbation $\bar{V}(I, \Theta)$ sous forme normale. Dans notre cas, la dépendance en l'action de la perturbation est donnée immédiatement, par construction du hamiltonien. Enfin, la décomposition en série de Fourier de la perturbation est exacte puisque celui-ci ne contient qu'un seul terme. Localement, on retrouve l'approximation (6.24) du pendule simple au voisinage de la chaîne de résonance en réécrivant la partie non perturbée $\tilde{H}_0(I)$ du hamiltonien sous la forme d'un carré, on obtient

$$\tilde{H}(I, \theta) = -\frac{a_0^2}{16a_1} + \frac{a_1}{4}\left(I + \frac{a_0}{2a_1}\right)^2 + \frac{b}{4}I^2\cos(4\theta). \tag{6.60}$$

Par analogie avec le cas quasi-intégrable, on peut identifier les coefficients de l'équation (6.60) avec (6.24)

$$r = 4, \qquad s = 1, \qquad \phi_1 = 0, \qquad \sigma_{r:s} = 0, \tag{6.61}$$

$$I_{r:s} = -a_0/(2a_1), \qquad M_{r:s} = 2/a_1, \qquad V_1 = I^2 b/4. \tag{6.62}$$

On peut ici faire plusieurs remarques. Le modèle utilisé présente localement un îlot stable entouré d'une chaîne de résonance d'ordre $(r:s) = (4:1)$. Le développement de Taylor (6.50), au voisinage de l'origine, reste valable pour un jeu de paramètres $\{a_0, a_1, b\}$ qui impose aux résonances d'être suffisamment proches du centre de l'îlot (condition nécessaire également dans le cas non intégrable). Ensuite, l'écriture sous forme d'un carré de la partie non perturbée du hamiltonien peut être vue, cette fois, comme une approximation harmonique (exacte) autour des points d'équilibre de la dynamique non perturbée ($b = 0$)

$$I_*^{(0)} = I_{r:s} = -\frac{a_0}{2a_1}, \qquad \theta_*^{(0)} \in [0, 2\pi], \tag{6.63}$$

et non autour des points fixes de la chaîne de résonance du système perturbé ($b \neq 0$), comme dans le cas quasi-intégrable. Enfin, les coefficients de Fourier apparaîssent déjà comme dépendants de l'action et coïncident, sans surprise, avec l'hypothèse $V_k(I) = v_k(I)^{kr/2}$ où $k = 1$, et $v_1 = b/8$.

À l'aide des éléments précédents, on écrit la largeur du doublet fondamental ΔE_0 du système perturbé en utilisant (6.37). On obtient ainsi

$$\Delta E_0 = \Delta E_0^{(0)} + \sum_{k=1}^{k_c} |A_{0,rk}^{r:s}|^2 \Delta E_{rk}^{(0)} \tag{6.64}$$

avec

$$A_{0,rk}^{r:s} = \prod_{l=1}^{k} \frac{\langle rl|\hat{\hat{H}}|r(l-1)\rangle}{E_0^{(0)} - E_{rl}^{(0)}}, \tag{6.65}$$

$$\langle rl|\hat{\hat{H}}|r(l-1)\rangle \overset{(6.36)}{=} \frac{b\hbar^2}{8}\sqrt{\frac{(rl)!}{[r(l-1)]!}}, \tag{6.66}$$

où $\hat{\hat{H}}$ est la version quantique du hamiltonien (6.60). Nous avions noté précédemment que le modèle exact perturbé (6.40) et non perturbé (6.41) sont $2\pi-$périodiques en (p, q). On souhaite ici évaluer l'effet tunnel en q entre deux cellules élémentaires voisines dans l'espace des phases. De manière générale, les états $|n+kr\rangle$ qui interviennent dans le calcul de ΔE_n, doivent être localisés sur un tore classique I_{n+kr} situé nécessairement dans l'îlot stable centré en $(p, q) = (0, 0)$. En effet, l'îlot possède une taille finie dans l'espace des phases et donc une aire A finie. Il existe donc un nombre fini d'états quantiques qui peuvent vivre à l'intérieur de celui-ci. La quantification de Bohr-Sommerfeld nous permet d'écrire

$$A = \oint p(q, E_{\mathcal{S}})\mathrm{d}q \geqslant \oint p(q, E_{n+rk_c}^{(0)})\mathrm{d}q = 2\pi\hbar\left(n + rk_c + \frac{1}{2}\right), \tag{6.67}$$

où l'énergie $E_{n+rk_c}^{(0)}$ est associée, à $\hbar$ fixé, à l'état quantique non perturbé le plus excité $|n + rk_c\rangle$ qui existe dans l'îlot et qui participe au mécanisme de couplage des états décrit précédemment. L'énergie $E_{\mathcal{S}}$ correspond à l'énergie de la séparatrice qui délimite l'aire A d'un îlot stable. Cette séparatrice est définie exactement par les branches définies implicitement par $p(q, E_{\mathcal{S}})$ avec l'énergie $E_{\mathcal{S}} \overset{\text{def}}{=} H(0, \pi) = (a_0/2) + a_1 + b$ (figure (6.1)). L'entier positif k_c définit donc le nombre de termes de la somme (6.64), c'est-à-dire le nombre d'états couplés qui vivent dans l'îlot, et s'écrit, en utilisant (6.67),

$$k_c = \left\lfloor \frac{1}{r}\left(\frac{A}{2\pi\hbar} - \frac{1}{2}\right)\right\rfloor, \tag{6.68}$$

où $\lfloor\cdot\rfloor$ signifie que l'on garde la partie entière. On voit alors que plus $\hbar$ diminue, plus k_c augmente et donc le nombre d'états à prendre en compte dans le mécanisme de couplage augmente. Dans l'expression des amplitudes (6.65), la condition de résonance (6.30) est légèrement modifiée puisqu'elle ne contient plus le terme $ls\omega\hbar$, associé à la dépendance temporelle de la perturbation du système quasi-intégrable. On peut alors comprendre cette condition comme le fait qu'une résonance se manifeste lorsque les énergies $E_0^{(0)}$ et $E_{kr}^{(0)}$ des quasimodes $|0\rangle$ et $|kr\rangle$ du système non perturbé sont dégénérées.

Afin d'accéder complètement au calcul du doublet fondamental ΔE_0, il nous reste à évaluer la largeur des doublets $\Delta E_n^{(0)}$ du système non perturbé. Pour cela, on utilise la formule (6.39)

$$\Delta E_n^{(0)} = \frac{2\hbar|\omega_n|}{\pi}\mathrm{e}^{-S(E_n^{(0)})/\hbar}, \tag{6.69}$$

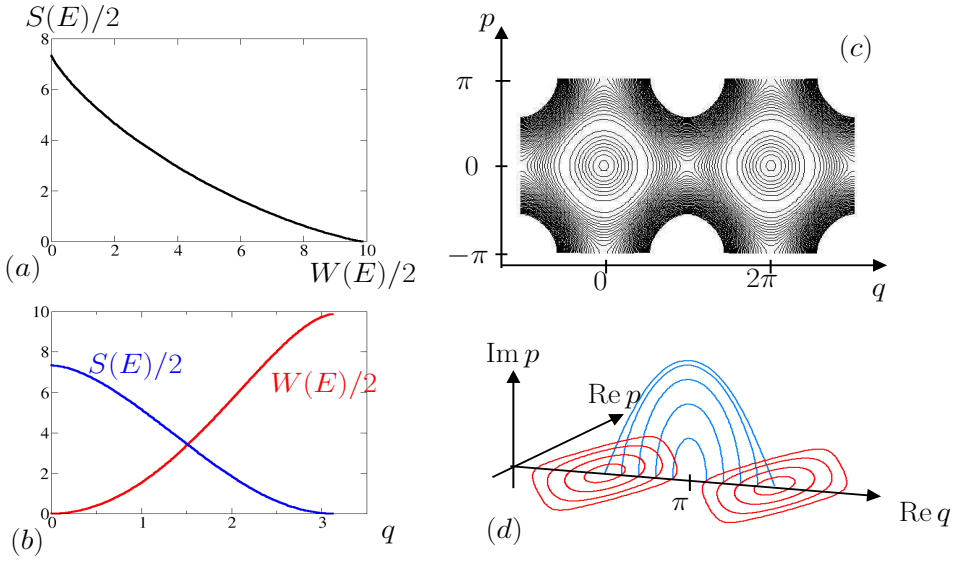


FIG. 6.2: Les quatres figures sont représentées pour les valeurs de paramètre $\{a_0 = 1, a_1 = -0.55, b = 0\}$ du hamiltonien $H_0(p, q)$ défini en (6.41). La figure (c) représente l'espace des phases réel compactifié sur les deux cellules élémentaires impliquées dans l'effet tunnel. On échantillonne un grand nombre de points de départ $(p_i, q_i) = (0, q)$ sur l'axe $(\mathrm{Re}\, q)$ qui permettent d'obtenir des trajectoires périodiques (figure (d)), d'énergie $E = H_0(0, q)$, réelles (en rouge) et instantons (en bleu) et ainsi de calculer numériquement les actions associées (respectivement $W(E)$ et $S(E)$). À partir de cet échantillonnage, on peut tracer l'action imaginaire en fonction de l'action réelle (figure (a)). Cette figure permet d'évaluer l'action imaginaire $S(E)$ connaissant l'action réelle $W(E)$. Toujours grâce à l'échantillonnage, il est possible de représenter la valeur de l'action (réelle ou imaginaire) en fonction du point de départ $(0, q)$ (figure (b)). Encore par interpolation, on obtient la valeur de l'énergie E d'après la valeur de l'action réelle ou imaginaire associée à un point de départ réel.

où le facteur 2 apparaît pour les systèmes périodiques. La dynamique définie localement par le hamiltonien approché non perturbé $\tilde{H}_0(I)$ obtenu en (6.54) n'est pas suffisante pour traiter l'effet tunnel dans le cas non perturbé puisque le hamiltonien approché ne reproduit qu'une seule cellule. Il est alors indispensable d'utiliser ici le hamiltonien non perturbé exact (6.41) afin d'évaluer semiclassiquement les énergies $E_n^{(0)}$ et les actions $S(E_n^{(0)})$ qui interviennent dans (6.64). Chaque action imaginaire $S(E_n^{(0)})$, dont la trajectoire associée relie un tore d'énergie $E_n^{(0)}$ à son symétrique, est évaluée par interpolation linéaire en échantillonnant, le long de l'axe $(p = 0, \mathrm{Im}\, q = 0)$, des points de départ de trajectoires périodiques réelles, d'action $W(E)$, et de trajectoires instantons (dans le potentiel inversé), d'action $S(E)$, comme présenté sur la figure (6.2). Ainsi, en imposant la condition de quantification semiclassique des orbites périodiques réelles

$$W(E_n^{(0)}) = \oint_{\mathcal{C}} p(q, E_n^{(0)}) \mathrm{d}q = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \tag{6.70}$$

dans le système non perturbé, on peut alors extraire l'énergie semiclassique $E_n^{(0)} = H_0(0,q)$ du quasimode $|n\rangle$ en utilisant la figure (6.2)(b). On trouve également, par interpolation linéaire, $S(E_n^{(0)})$ grâce à la figure (6.2)(a). On peut résumer schématiquement les procédures numériques utilisées par

$$W(E_n^{(0)}) \xrightarrow{\text{Fig.(6.2)}(a)} S(E_n^{(0)}), \tag{6.71}$$

$$W(E_n^{(0)}) \xrightarrow{\text{Fig.(6.2)}(b)} q \xrightarrow{E=H_0(0,q)} E_n^{(0)}. \tag{6.72}$$

Enfin, la fréquence d'oscillation ω_n est également évaluée numériquement à l'aide de la seconde procédure (6.72) en calculant la variation de l'énergie par rapport à l'action $W(E)$. On justifie ce calcul avec la définition de la fréquence d'oscillation ω_n donnée par

$$\omega_n = \left.\frac{\mathrm{d}H_0(I)}{\mathrm{d}I}\right|_{I=I_n}. \tag{6.73}$$

Cependant, comme nous utilisons, pour ce calcul, le hamiltonien exact (6.40), la variable I doit venir d'un changement de coordonnées canonique global (que nous ne connaissons pas) des variables de départ (p,q). En se servant du hamiltonien (6.50) obtenu après avoir eu recours au développement de Taylor, le changement de variable $(p,q) \mapsto (I,\theta)$ est local et mène au hamiltonien (6.54) approché, valable uniquement au voisinage du centre de l'îlot régulier. Il n'est alors pas suffisamment précis d'évaluer ω_n avec $\tilde{H}_0(I,\theta)$, en particulier pour les niveaux excités localisés sur des tores loin du centre de l'îlot. La figure (6.3) représente le spectre énergétique du système exact non perturbé $\hat{H}_0(p,q)$ défini en (6.40) sur lequel on a superposé les niveaux semiclassiques $E_{kr}^{(0)}$ (évalués par la procédure (6.72)) intervenant dans le calcul de la largeur du doublet fondamental perturbé ΔE_0 afin de pouvoir « suivre » clairement les niveaux mis en jeu dans la somme (6.64), lorsque $\hbar$ varie. La largeur des doublets $\Delta E_n^{(0)}$ est évaluée numériquement pour le hamiltonien exact non perturbé (6.41) et permet de contrôler la validité des différentes procédures numériques utilisées. Les résultats sont regroupés sur la figure (6.4) et comparés avec le calcul exact, obtenu par diagonalisation.

Nous avons maintenant mis en place tous les éléments formels et numériques pour vérifier, sous les différentes approximations réalisées, la validité de la formule (6.64) de la largeur du doublet fondamental dans le cadre de la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances, adapté pour une classe de systèmes intégrables construits à l'aide des formes normales. La figure (6.5) présente les résultats obtenus et compare en particulier les énergies semiclassiques, décrites à la figure (6.3) avec les fluctuations de la largeur du doublet qui, d'après les amplitudes (6.65), devraient correspondre aux valeurs de $\hbar$ pour lesquelles ces énergies $E_0^{(0)}$ et $E_{kr}^{(0)}$ sont très proches. Malgré la simplicité (apparente) du modèle étudié, les résultats numériques obtenus ne sont pas concluant, dans un premier temps. En effet, les différentes modifications de la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances proposées ici, afin de l'adapter à des systèmes intégrables unidimensionnels construits à l'aide de formes normales (reproduisant des chaînes de résonances classiques), semblent suffisamment directes pour s'attendre à un meilleur accord de la théorie avec le calcul exact par diagonalisation. Cependant, la théorie implique plusieurs approximations successives qui peuvent mettre en péril la validité de la formule. Nous pouvons ici esquisser

quelques pistes susceptibles de résoudre le problème. La première d'entre elles est le développement de TAYLOR (6.50) du hamiltonien exact (6.40) au voisinage du centre de l'îlot. L'approximation décrit bien la dynamique au voisinage de l'îlot mais l'erreur augmente lorsque l'on considère des tores plus proches de la séparatrice. Les états excités $|n + kr\rangle$ d'énergie $E^{(0)}_{n+kr}$ qui participent aux couplages, sont particulièrement concernés (via les éléments de matrices des amplitudes $A^{r:s}_{n,kr}$ dans la somme (6.64)) et sont donc sensibles à cette erreur. Une solution consisterait peut-être à modifier les valeurs des paramètres $\{a_0, a_1, b\}$ afin de rapprocher la chaîne de résonance du centre de l'îlot pour minimiser l'écart entre l'approximation et le système exact. Un fait surprenant est la mauvaise position des pics de résonance. En effet, d'après le mécanisme de couplage des états, les pics surviennent quand le dénominateur d'une des amplitudes de la somme (6.64) s'annule, c'est-à-dire lorsque l'énergie $E^{(0)}_{n+kr}$ du quasimode $|n + kr\rangle$ du système exact non perturbé est dégénérée avec celle de l'état semiclassique $|n\rangle$, impliqué dans le doublet. Ces états sont choisis uniquement par l'ordre r de la résonance et la figure (6.3) montre un bon accord entre le calcul numérique des $E^{(0)}_{n+kr}$ et le spectre exact, par conséquent il est ici difficile de comprendre le désaccord présenté sur la figure (6.5). Enfin, une dernière remarque concerne le résultat du calcul par diagonalisation du spectre (et donc du doublet) du système perturbé exact (6.40), présenté sur la figure (6.6). Dans le cas du système non perturbé, les énergies qui constituent le doublet $\Delta E^{(0)}_0$ tendent, comme on peut s'y attendre, vers l'énergie du fond du puits de l'îlot $H_0(0, 0) = 0$ dans le régime semiclassique. La perturbation ne modifie pas, par construction, le minimum local et donc $H(0, 0) = 0$. Jusqu'à présent, toutes les diagonalisations ont été réalisées suivant la procédure numérique proposée dans [59]. Cependant, la diagonalisation du hamiltonien perturbé montre que les niveaux d'énergie (ronds rouges sur la figure (6.6)) qui constituent le doublet ΔE_0, et qui sont localisés dans l'oeil de l'îlot, possèdent une énergie négative lorsque $\hbar \to 0$. Ce phénomène reste un point important encore à éclaircir. Cette anomalie apparaît avec la perturbation qui présente la particularité de contenir des termes couplés en (p, q). Il est alors possible que la façon de symétriser le hamiltonien joue un rôle non négligeable dans la procédure numérique de diagonalisation.

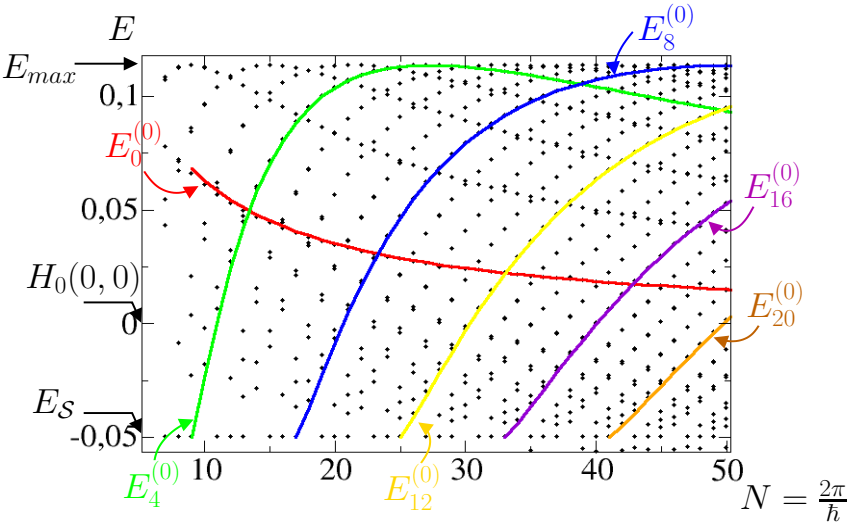


FIG. 6.3: On représente une partie du spectre en énergie du hamiltonien non perturbé $\hat{H}_0(p,q)$ défini en (6.40) en fonction de $N = 2\pi/\hbar$, pour les valeurs de paramètres $\{a_0 = 1, a_1 = -0.55, b = 0\}$. Le paramètre $\hbar = N/(2\pi)$ étant ici discret, le spectre apparaît comme un ensemble de points. On construit les énergies $E_{kr}^{(0)}$ utiles dans le calcul de ΔE_0. Ces énergies sont évaluées semiclassiquement à l'aide de la procédure (6.72). Grâce à celles-ci, il est alors possible de « suivre » parmi la forêt de points lesquels correspondent aux énergies non perturbées nécessaires. Il est important de noter que les vrais niveaux suivis ici sont en réalité des doublets, d'après la symétrie du potentiel, et donc les $E_n^{(0)}$ correspondent aux valeurs moyennes semiclassiques des doublets $\Delta E_n^{(0)}$. En particulier, l'énergie $E_0^{(0)}$ permet de suivre l'évolution du doublet $\Delta E_0^{(0)}$ dont les états sont localisés au centre de l'îlot stable. Pour toutes les valeurs de $\hbar$ que nous avons choisies, le niveau $E_0^{(0)}$ reste confiné dans l'oeil de l'îlot, c'est-à-dire dans la cuve avec l'énergie du minimum local $H_0(0,0) = 0$ et la hauteur maximale de la barrière d'énergie $E_{max} = H_0(p_*^{\pm} q_*)$. Enfin, les niveaux excités qui participent aux couplages apparaissent lorsqu'ils entrent dans l'îlot, à travers la séparartrice d'énergie $E_{\mathcal{S}}$. Ils se rapprochent ensuite du haut de la barrière E_{max} pour enfin pénétrer dans l'oeil de l'îlot et descendre vers le minimum local, à l'instar du niveau d'énergie $E_4^{(0)}$ (en vert).

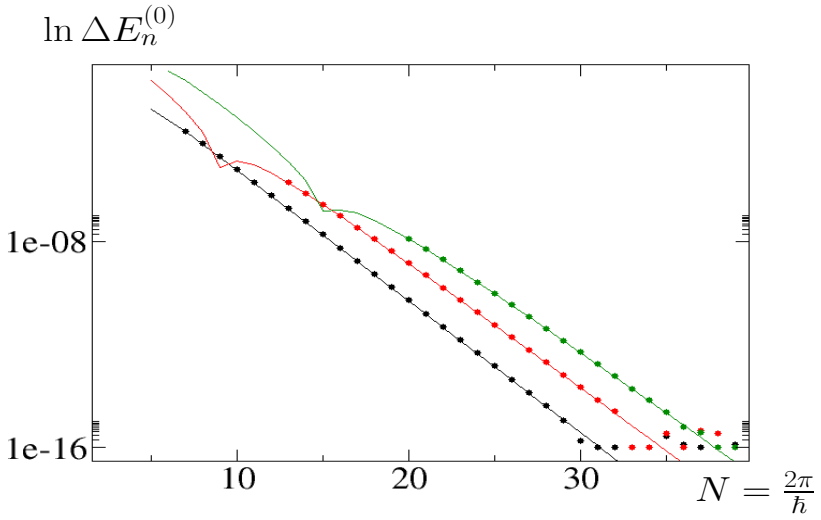


FIG. 6.4: On représente ici la largeur des doublets tunnel $\Delta E_n^{(0)}$, en échelle semilogarithmique en fonction de $N = 2\pi/\hbar$, du système exact non perturbé $H_0 p, q$ défini en (6.41) entre les deux îlots centrés en $(p, q) = (0, 0)$ et $(p, q) = (0, 2\pi)$ (voir l'espace des phases sur la figure (6.2)) pour les paramètres $\{a_0 = 1, a_1 = -0.55, b = 0\}$. Les trois premiers doublets $n = 0$, $n = 1$ et $n = 2$ (respectivement en noir, rouge et vert). Les points correspondent au calcul par diagonalisation et les traits pleins sont évalués par la formule (6.69). L'accord avec le calcul exact est bon, en particulier, comme on peut s'y attendre, dans le régime semiclassique, $N \to \infty$. On remarque un écart au comportement exponentiellement décroissant de la formule semiclassique lorsque l'énergie semiclassique moyenne E_n^0 associée au doublet $\Delta E_n^{(0)}$ est proche du haut de la barrière d'énergie E_{max}. Ceci provient de la pulsation ω_n, évaluée en calculant la dérivée de l'énergie $E_n^{(0)}$ par rapport à l'action $W(E_n^{(0)})$ qui tend à être nulle au voisinage de E_{max}. Cependant, pour les énergies utiles au calcul de ΔE_n, cet écart intervient pour des valeurs de $\hbar$ où le terme $\Delta E_{kr}^{(0)}$ correspondant, doit déjà être exponentiellement sous dominant dans la somme (6.64).

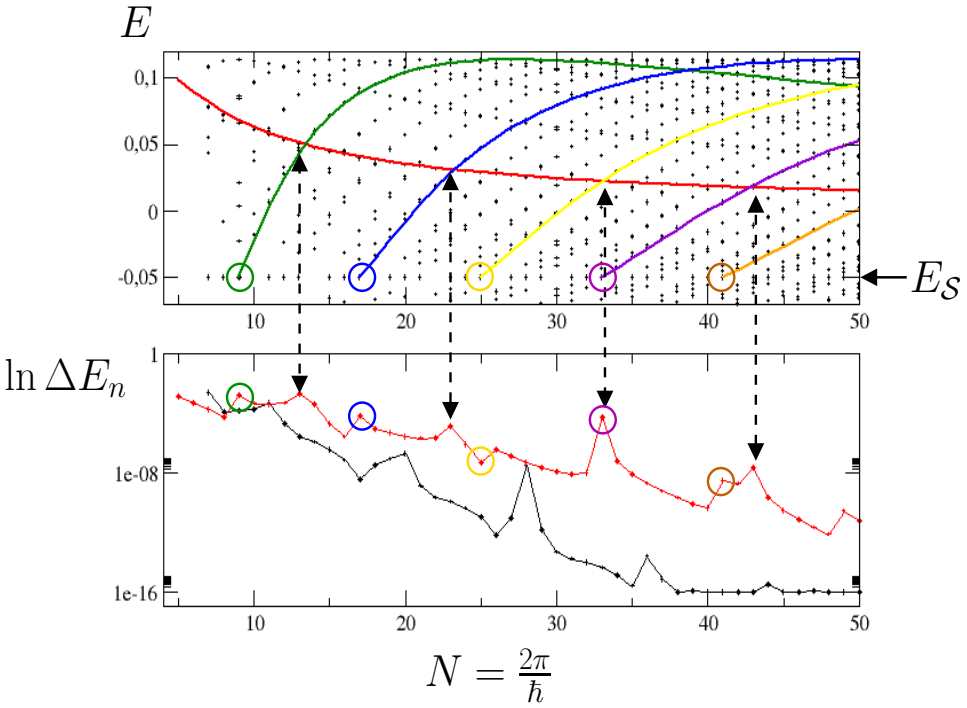


FIG. 6.5: On présente sur le graphique du bas, la largeur du doublet fondamental ΔE_0 pour le système perturbé $H(p,q)$ défini en (6.40) pour le jeu de paramètres $\{a_0 = 1, a_1 = -0.55, b = -0.05\}$, en échelle semilogarithmique en fonction de $N = 2\pi/\hbar$. La courbe en points noirs reliés correspond au calcul exact par diagonalisation tandis que la courbe rouge est le résultat obtenu avec la formule (6.64). Il est clair que l'accord avec le calcul exact est très mauvais. En effet, la formule utilisée pour approcher le doublet perturbé ne reproduit pas la pente et ni la position des pics de résonances obtenu par diagonalisation. On reproduit sur la figure du haut le spectre du hamiltonien non perturbé $H_0(p,q)$ déjà présenté sur la figure (6.3). Les doubles flèches indiquent la correspondance entre la dégénérescence des énergies semiclassiques $E_0^{(0)}$ et $E_{kr}^{(0)}$ du système non perturbé intervenant dans les amplitudes de la somme (6.64) et les pics obtenus par cette même formule. Les cercles colorés indiquent qu'un nouvel état $|kr\rangle$, qui contribue à la somme (6.64), « entre » dans l'îlot délimité par les séparatrices d'énergie $E_{\mathcal{S}}$. Chaque nouveau terme qui apparaît dans la somme est responsable d'une discontinuité dans le calcul approché de ΔE_0.

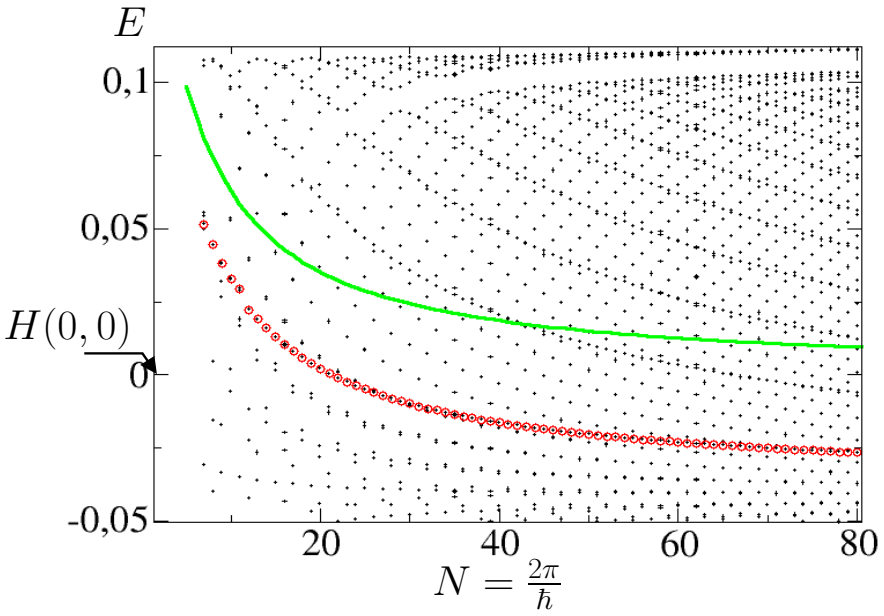


FIG. 6.6: On trace ici le spectre du hamiltonien perturbé exact $H(p,q)$ en fonction de $N = 2\pi/\hbar$ pour le jeu de paramètres $\{a_1 = 1, b_1 = -0.55, b = -0.05\}$. La ligne verte représente l'énergie semiclassique $E_0^{(0)}$ du système non perturbé ($b = 0$) tandis que les ronds rouges caractérisent les énergies propres qui définissent le doublet exact ΔE_0 du système perturbé.

Conclusion

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés aux processus de transmission tunnel dans le cadre des systèmes intégrables. Lorsque ces systèmes sont bornés et présentent deux régions de l'espace des phases classiquement distinctes, on peut extraire du spectre discret en énergie, la signature de l'effet tunnel en évaluant l'écart entre deux énergies propres quasi-dégénérées. L'objectif de cette thèse était de trouver une nouvelle méthode de calcul direct de la largeur de ces doublets sous des conditions très générales de symétrie du hamiltonien. La méthode que nous avons obtenue est basée sur le calcul des traces d'un produit d'opérateurs

$$\Delta E_n \simeq \Delta_n(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\hbar}{\mathrm{i}T} \frac{\operatorname{tr} \hat{S}\hat{\Pi}_n \hat{U}(T)}{\operatorname{tr} \hat{\Pi}_n \hat{U}(T)}, \tag{6.74}$$

impliquant l'opérateur d'évolution $\hat{U}(T) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}T/\hbar}$ que l'on prolonge analytiquement en autorisant le temps T à être complexe (rotation de Wick partielle). Cette approche généralise la technique des instantons [21], qui utilise un temps purement imaginaire, et apparaît comme une alternative intéressante à la formule d'Herring [25] puisqu'elle ne nécessite pas le prolongement analytique des fonctions d'onde dans le plan complexe.

L'étape suivante qui intervient naturellement lorsque l'on étudie l'effet tunnel est le développement semiclassique de la formule proposée et son interprétation en termes de trajectoires classiques complexes qui relient les deux tores réels d'énergie E_n impliqués. Le cadre des systèmes unidimensionnels et indépendants du temps nous a permis de montrer comment l'utilisation d'un temps complexe et la possibilité de déformer le contour des intégrales de chemin mis en jeu, grâce à l'indépendance du choix du chemin du temps complexe, sélectionnent simplement toutes les classes topologiques des trajectoires complexes qui contribuent à l'effet tunnel en choisissant de manière appropriée le chemin du temps complexe $[t]$ et nous amène au résultat principal

$$\Delta_n(T) \stackrel{\hbar \to 0}{\sim} \sum_{[\rho_1, \rho_2 \ldots]} (-1)^{\mu_\circ + 1} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tilde{S}(b_{\beta'}, b_\beta, E_n)/\hbar}. \tag{6.75}$$

En particulier, nous avons traité l'exemple standard du double puits pour lequel nous avons montré que cet avantage permet non seulement d'accéder au doublet fondamental mais d'estimer également les doublets excités, inaccessibles par la méthode des instantons. L'effet tunnel dynamique, à travers l'exemple du pendule simple, est aussi inclus dans cette approche, ce qui n'est pas possible avec une rotation de Wick complète. La formule de traces présentée ici a aussi été adaptée aux taux de transmission tunnel d'un état localisé dans un minimum local à travers une barrière d'énergie vers un continuum d'états. Enfin, un

autre phénomène important que nous pouvons prédire est l'effet tunnel résonant lorsque le potentiel présente au moins deux barrières d'énergie à franchir. Dans ce dernier cas, encore une fois l'approche par un temps purement imaginaire échoue et notre méthode permet d'expliquer les pics de résonances comme des interférences constructives entre des orbites complexes répétées à l'image d'un effet Fabry-Pérot en optique ondulatoire.

Ces deux derniers exemples présentent, en réalité, un intérêt au-delà des sytèmes intégrables unidimensionnels. En effet, la formule semiclassique obtenue de manière élégante dans le cas du taux de décroissance est équivalente à l'expression du taux de transmission tunnel direct d'un îlot stable vers la mer chaotique, démontrée récemment dans [3] [4]. Il est étonnant de constater la simplicité de cette expression, qui ne fait appel qu'à des caratéristiques classiques de systèmes intégrables, pour décrire un processus quantique dont la structure classique sous-jacente est d'une grande complexité. Après avoir premièrement présenté l'effet tunnel résonant en utilisant un système intégrable très simple (le triple puits), dans la troisième partie de cette thèse nous avons proposé de recréer des résonances à l'aide d'une classe de systèmes intégrables $1D$ construits en utilisant les formes normales. Une fois la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances correctement appliquée à ces modèles, l'étape suivante sera d'appliquer la méthode développée ici et de comprendre la topologie des orbites périodiques complexes et de leurs répétitions qui contribuent à l'apparition des résonances observées, par exemple, sur la figure (6.5).

L'intégrabilité des systèmes étudiés ici nous permet de connecter deux tores réels de l'espace des phases en prolongeant dans le plan complexe les variétés associées à ces tores et garantit donc l'existence de trajectoires complexes joignant les deux régions de l'espace des phases. Dans le cas de systèmes à plusieurs dimensions (ou encore dépendant du temps), le manque de constantes de mouvement isole les différents îlots réguliers qui peuvent exister dans l'espace des phases par des régions chaotiques. Dans ce cas, le prolongement analytique des tores KAM est compromis par l'existence de frontières naturelles [39]. L'analyse semiclassique de l'effet tunnel dans les systèmes chaotiques s'avère donc hautement non triviale et le calcul semiclassique des propagateurs quantiques devient très technique en raison de l'apparition du phénomène de Stokes [87] [89]. Néanmoins, on peut avancer l'hypothèse que l'approche par un temps complexe permet d'éviter cette situation. En adaptant correctement le chemin du temps, on peut espérer joindre les deux tores KAM réels symétriques où sont localisés les niveaux d'énergie E_n des états mis en jeu dans l'effet tunnel et extraire les orbites périodiques complexes dominantes des traces de la formule (6.74). Sous cette hypothèse, on peut s'attendre à une généralisation de la forme

$$\left| \frac{f(\hbar)}{T} \sum_{[\rho_1,\rho_2\ldots]} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\sum_{i=1}^{N} w_i[\tilde{S}_i(E_n)-\pi\hbar]} \mathrm{e}^{-\sum_{j=1}^{M} w'_j[\tilde{S}'_j(E_n)]/\hbar} \right|, \tag{6.76}$$

où f définit une loi en puissance de $\hbar$ en fonction de la dimension du système et la somme sur $[\rho_1, \rho_2 \ldots]$ correspond aux différentes classes topologiques de trajectoires complexes à prendre en compte qui connectent les deux tores KAM réels symétriques en un temps T. Enfin, les actions $\tilde{S}_i(E_n)$ et $\tilde{S}'_j(E_n)$ proviennent des orbites primitives (et de leurs répétitions w_i et w'_j) construites, encore une fois, en forçant le chemin du temps $[t]$ à varier uniquement sous la forme de marches d'escalier (variations purement réelles ou purement imaginaires). Bien entendu, la difficulté principale réside dans le choix d'un chemin du

temps $[t]$ adéquat et en particulier d'un critère de sélection des orbites complexes qui fournissent une contribution dominante à l'effet tunnel en présence de chaos parmi le nombre exponentiellement grand de trajectoires qui interviennent dans les calculs semiclassiques des propagateurs quantiques. Malgré les récents travaux et les avancées prometteuses de l'étude détaillée des chaînes de LAPUTA afin d'extraire ces informations [86] [88], la question des orbites dominantes reste encore ouverte à ce jour.

À partir d'une expression de la forme (6.76), on pourrait, ici encore, interpréter la répartition des résonances quantiques dans les systèmes mixtes en termes d'interférences constructives des répétitions d'orbites périodiques complexes. De plus, comme nous l'avons observé dans le cas des systèmes intégrables (et comme il a été montré pour les systèmes $1D$ pulsés dans [75]), une rotation de WICK partielle d'angle θ détruit progressivement les fluctuations lorsque θ augmente et permet de sélectionner les contributions des résonances principales uniquement. Classiquement, une telle rotation modifie drastiquement la topologie de l'espace des phases. En particulier, il pourrait être profitable de mener une étude systématique de l'influence d'une rotation de WICK partielle sur le comportement des frontières naturelles dans l'espace des phases.

L'approche proposée ici, associée aux récents développements de l'équipe japonaise sur l'étude des chemins complexes dans les systèmes mixtes, semble être un outil particulièrement approprié afin de compléter le mécanisme de l'effet tunnel assisté par les résonances élaboré dans [67] [4] et d'obtenir une description entièrement semiclassique de ces processus (en particulier le développement de l'opérateur d'évolution $\hat{U}$) à l'aide des ingrédients classiques de l'espace des phases.

Annexes

Annexe A

Contributions à l'expression semiclassique de $\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{U}(T)$ des trajectoires de longueur nulle et non nulle

Dans cette annexe nous proposons une démonstration des expressions (2.64) et (2.65). Nous allons traiter simultanément les deux cas $\mathrm{tr}\,\hat{S}\hat{U}(T)$ et $\mathrm{tr}\,\hat{U}(T)$, comme il a été proposé dans la section 2.4, en utilisant la notation

$$\eta = \begin{cases} +1 \text{ si } \hat{A} = 1, \\ -1 \text{ si } \hat{A} = \hat{S}. \end{cases} \tag{A.1}$$

Avant de détailler chaque type de contributions, il est utile de revenir sur la définition (2.54) de l'intégrale de chemin. Si l'on revient à une description discrétisée de l'intégrale (le chemin du temps est découpé en sous intervalles), les orbites $\mathfrak{o}$ qui contribuent sont composées de points séparés distinctement sur une section de Poincaré. On remarque que dans la limite semiclassique $\hbar \to 0$, les points d'une orbite $\mathfrak{o}$ vérifiant $(p_f, q_f) = (\eta p_i, \eta q_i)$ sont séparés d'une distance plus grande que $\sqrt{\hbar}$ et vont alors compter indépendamment lors de la phase stationnaire mais en donnant la même contribution. Dans ce cas, chacun de ces points est traité comme un point critique isolé de l'action et leur contribution est donnée par l'équation (2.65). L'ordre des limites $\lim\limits_{(T/N)\to 0}\lim\limits_{\hbar\to 0}$ revient alors à traiter un système discretisé comme les systèmes pulsés ou les résultats dépendront du paramètre (T/N). En revanche, lorsque l'ordre des limites est inversé $\lim\limits_{\hbar\to 0}\lim\limits_{(T/N)\to 0}$ (limite intégrable), les points des trajectoires seront suffisamment proches pour qu'ils soient indiscernables dans la limite semiclassique. En effet, lors de la phase stationnaire, l'intégrale de chemin ne pourra alors pas être découpée pour garder la contribution de chaque point indépendamment. Ces trajectoires, qui sont maintenant des ensembles continus de points formant des lignes dans l'espace des phases, sont alors des orbites de longueur non nulle et leur contribution est donnée par l'expression (2.65). Les seules contributions provenant d'orbites de longueur nulle, dans la limite intégrable, sont celles des points d'équilibre du système. C'est dans

cette limite intégrable que tous les calculs seront effectués.

A.1 Trajectoires de longueur nulle

Dans le cas où une orbite participe au calcul de l'intégrale (2.60) provient d'un point d'équilibre, alors la méthode de la phase stationnaire nous dit que le contour d'intégration peut être déformé pour traverser un point critique q_c isolé de l'action $S_{\mathfrak{o}}(\eta q, q, T)$ et la contribution de ce point correspond à

$$(-1)^{\sigma_{\mathfrak{o}}} \sqrt{\frac{(\partial^2_{q_i q_f} S_{\mathfrak{o}})\big|_{(\eta q_c, q_c, T)}}{(-\partial^2_{qq} S_{\mathfrak{o}})\big|_{(\eta q_c, q_c, T)}}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar) S_{\mathfrak{o}}(\eta q_c, q_c, T)}. \tag{A.2}$$

Encore une fois, $\sigma_{\mathfrak{o}}$ détermine le signe de la racine carré et comprend également un changement de signe possible lors du passage d'une division de racines carrés à la racine carré d'une division de grandeurs complexes. Afin de simplifier cette forme, on utilise les propriétés de la matrice de monodromie associée à la trajectoire que l'on considère. Classiquement, il est toujours possible de décrire les coordonnées finales (p_f, q_f) à l'instant $t(s_f) = T$ d'une trajectoire classique $\mathfrak{o}$ dans l'espace des phases comme des fonctions des conditions initiales (p_i, q_i) à l'instant $t(s_i) = 0$, une fois le chemin complexe du temps $[t]$ fixé. La matrice de monodromie $M_{\mathfrak{o}}$ permet de relier linéairement une perturbation infinitésimale des conditions initiales $(p_i + \delta p_i, q_i + \delta q_i)$ à la variation sur les coordonnées finales $(p_f + \delta p_f, q_f + \delta q_f)$ à l'aide des différentielles des fonctions $p_f = p_f(p_i, q_i)$ et $q_f = q_f(p_i, q_i)$. Au premier ordre dans les perturbations, la matrice $M_{\mathfrak{o}}$ s'écrit

$$\begin{pmatrix} \delta p_f \\ \delta q_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{\mathfrak{o},11} & M_{\mathfrak{o},12} \\ M_{\mathfrak{o},21} & M_{\mathfrak{o},22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta p_i \\ \delta q_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_{p_i} p_f & \partial_{q_i} p_f \\ \partial_{p_i} q_f & \partial_{q_i} q_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta p_i \\ \delta q_i \end{pmatrix} \tag{A.3}$$

et vérifie la condition $\det M_{\mathfrak{o}} = 1$. En utilisant de nouveau les propriétés des fonctions génératrices [93], on réécrit les éléments de matrice complexes en fonction de l'action $S_{\mathfrak{o}}$

$$M_{\mathfrak{o},11} = -\frac{(\partial^2_{q_f q_f} S_{\mathfrak{o}})}{(\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})}, \tag{A.4}$$

$$M_{\mathfrak{o},12} = (\partial^2_{q_i q_f} S_{\mathfrak{o}}) - \frac{(\partial^2_{q_f q_f} S_{\mathfrak{o}})(\partial^2_{q_i q_i} S_{\mathfrak{o}})}{(\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})}, \tag{A.5}$$

$$M_{\mathfrak{o},21} = -\frac{1}{(\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})}, \tag{A.6}$$

$$M_{\mathfrak{o},22} = -\frac{(\partial^2_{q_i q_i} S_{\mathfrak{o}})}{(\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})}. \tag{A.7}$$

En inversant ces relations pour extraire $(\partial^2_{q_iq_i}S_\mathfrak{o})$, $(\partial^2_{q_fq_f}S_\mathfrak{o})$ et $(\partial^2_{q_fq_i}S_\mathfrak{o})$ en fonction des éléments de la matrice de monodromie

$$\partial^2_{q_fq_i}S_\mathfrak{o} = -\frac{1}{M_{\mathfrak{o},21}}, \tag{A.8}$$

$$\partial^2_{q_iq_i}S_\mathfrak{o} = \frac{M_{\mathfrak{o},22}}{M_{\mathfrak{o},21}}, \tag{A.9}$$

$$\partial^2_{q_fq_f}S_\mathfrak{o} = \frac{M_{\mathfrak{o},11}}{M_{\mathfrak{o},21}}, \tag{A.10}$$

et en remarquant que

$$\frac{\partial^2 S_\mathfrak{o}}{\partial q\partial q}(\eta q, q, T) = 2\eta\frac{\partial^2 S_\mathfrak{o}}{\partial q_f\partial q_i} + \frac{\partial^2 S_\mathfrak{o}}{\partial q_f\partial q_f} + \frac{\partial^2 S_\mathfrak{o}}{\partial q_i\partial q_i}, \tag{A.11}$$

la fraction sous la racine carré de l'expression $(A.2)$ devient

$$\frac{\partial^2_{q_iq_f}S_\mathfrak{o}}{-(\partial^2_{qq}S_\mathfrak{o})} = \frac{(-1/M_{\mathfrak{o},21})}{-(1/M_{\mathfrak{o},21})(-2\eta + M_{\mathfrak{o},11} + M_{\mathfrak{o},22})}, \tag{A.12}$$

$$= \frac{1}{-2\eta + \operatorname{tr} M_\mathfrak{o}}. \tag{A.13}$$

En utilisant la relation

$$\det(1 - \eta M_\mathfrak{o}) = 2 - \eta \operatorname{tr} M_\mathfrak{o}, \tag{A.14}$$

la forme $(A.2)$ se réécrit

$$\frac{(-1)^{\sigma_\mathfrak{e}}}{\sqrt{(-\eta)\det(1-\eta M_\mathfrak{o})}}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_\mathfrak{o}}. \tag{A.15}$$

Comme les contributions aux traces des trajectoires de longueur nulle ne proviennent que de points d'équilibre $(p_\mathfrak{e}, q_\mathfrak{e})$ (points critiques isolés), on peut linéariser le flot hamiltonien autour de chacun de ces points et d'obtenir la matrice de monodromie. Les valeurs propres de la matrice s'écrivent $\mathrm{e}^{\pm\lambda_\mathfrak{e}T}$ où $\lambda_\mathfrak{e}$ correspond à l'exposant de Lyapunov. L'action $S_\mathfrak{o}$, dans le cas d'un point d'équilibre, s'écrit très simplement car le premier terme dans l'intégrale (2.55) est nul et le hamiltonien reste constant. L'action s'écrit alors

$$S_\mathfrak{o}(\eta q_\mathfrak{e}, q_\mathfrak{e}, T) = -H(p_\mathfrak{e}, q_\mathfrak{e})T. \tag{A.16}$$

En tenant compte de ces remarques, l'expression $(A.15)$ devient finalement

$$\frac{(-1)^{\mu_\mathfrak{e}}}{\mathrm{e}^{\lambda_\mathfrak{e}T/2} - \eta\mathrm{e}^{-\lambda_\mathfrak{e}T/2}}\mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)H(p_\mathfrak{e},q_\mathfrak{e})T}. \tag{A.17}$$

L'exposant $\mu_\mathfrak{e}$ absorbe tous les changements de signes qui sont apparus au cours des différentes opérations. On peut noter que dans le cas où l'on recherche des orbites demi-périodiques $(p_i, q_i) = (-p_i, -q_i)$, seulement l'origine de l'espace des phases peut fournir une contribution dominante. Enfin, les valeurs propres $\mathrm{e}^{\pm\lambda_\mathfrak{e}T}$ sont situées dans le plan complexe (T est complexe) et ne sont pas nécessairement restreintes à l'axe réel (point d'équilibre instable) ou sur le cercle unité (point stable). Donc pour une valeur générique de T, le dénominateur de $(A.17)$ ne s'annule pas *a priori*.

A.2 Trajectoires de longueur non nulle

Comme nous l'avons fait remarquer plus haut, les points de départ des orbites $\mathfrak{o}$ dominantes de longueur non nulle correspondent à des points critiques dégénérés le long de ces trajectoires. Dans le cas unidimensionnel, comme l'intégration se fait le long de la trajectoire, la phase $S_{\mathfrak{o}}(\eta q, q, T)$ de l'intégrale oscillante (2.60) reste constante avec la variable d'intégration q. On peut s'en convaincre en remarquant que, puisque chacun des points critiques dégénérés qui contribuent à une trajectoire correspond à un point de départ sur cette même trajectoire, alors l'action associée est toujours la même. Dans ce cas on peut sortir l'exponentielle de l'intégrale (2.60) et par conséquent pour chaque orbite $\mathfrak{o}$ qui va contribuer au calcul des traces, on devra traiter l'expression

$$(-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}} \int \mathrm{d}q \sqrt{\left(\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar} \left. \frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f} \right|_{(\eta q, q, T)} \right)}. \tag{A.18}$$

Pour évaluer l'intégrale restante, on commence par noter que l'on peut établir une relation entre différentes grandeurs E, T, q_i, q_f en définissant le temps complexe d'une orbite $\mathfrak{o}$ à l'aide de l'équation d'Hamilton (2.34) que l'on intègre pour donner

$$T = T_{\mathfrak{o}} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{s_i}^{s_f} \frac{\mathrm{d}q/\mathrm{d}s}{\partial_p H(p(q(s), E), q(s))} \mathrm{d}s. \tag{A.19}$$

Le long d'une orbite $\mathfrak{o}$, l'énergie est conservée $H(p, q) = E$ et il est alors possible de définir une fonction implicite $p(q, E)$ en chaque point de la trajectoire, sauf pour les points de rebroussements ($\partial_p H = 0$). Cette fonction implicite permet de reconstruire la trajectoire $\mathfrak{o}$ dans l'espace des phases en connectant deux à deux les différentes branches possibles $p_\beta(q, E)$ de la fonction $p(q, E)$ aux points de rebroussement (par exemple p_+ et p_- sur la figure (2.1)). Dans le cas d'un hamiltonien du type $H = p^2 + V(q)$, il existe deux branches correspondant aux deux signes possibles de la racine carrée (voir l'équation (1.5)). Pour un chemin du temps fixé, le choix de la branche sur laquelle est évaluée l'intégrale (A.19) est imposé par la valeur du paramètre d'intégration s dans l'intégrale. La définition (A.19) peut être inversée pour obtenir une forme implicite de l'énergie $E = E_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i, T)$ et en utilisant le théorème des fonctions implicites et les relations sur leurs dérivées partielles, l'équation $H(p, q) - E = 0$ permet d'obtenir

$$\frac{\partial p}{\partial E} = \frac{1}{\partial_p H(p, q)}, \tag{A.20}$$

tandis que la fonction implicite définie comme $T_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i, E) - T = 0$ mène à

$$\frac{\partial E}{\partial q_i} = \frac{(\partial_{q_i} T_{\mathfrak{o}})}{(\partial_E T_{\mathfrak{o}})} = -\frac{\partial T_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i} \frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial T} \stackrel{(A.19)}{=} \frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial T} \frac{1}{\partial_p H(p_i, q_i)}. \tag{A.21}$$

Puis en dérivant par rapport à q_i la relation (2.62) où l'impulsion finale est une fonction de plusieurs variables $p_f = p(q_f, E_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i, T))$, on obtient

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_f}(q_f, q_i, T) = \frac{\partial p_f}{\partial q_i} = \frac{\partial p_f}{\partial E}\frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i}, \tag{A.22}$$

$$\overset{(A.20)}{=} \frac{1}{\partial_p H(p_f, q_f)}\frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i}, \tag{A.23}$$

$$\overset{(A.21)}{=} \frac{1}{\partial_p H(p_f, q_f)}\frac{1}{\partial_p H(p_i, q_i)}\frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial T}(q_f, q_i, T). \tag{A.24}$$

L'équation $(A.24)$ correspond au terme sous la racine dans l'intégrale $(A.18)$ lorsque $q_i = q$ et $q_f = \eta q$. On utilise maintenant le fait que la classe des hamiltoniens qui nous intéressent respecte la symétrie (2.48), c'est-à-dire $H(\eta p, \eta q) = H(p, q)$, et que les orbites (demi-)périodiques qui contribuent dans l'expression des traces vérifient $(p_f, q_f) = (\eta p_i, \eta q_i)$, pour écrire

$$\frac{\partial H}{\partial p}(\eta p, \eta q) = \eta \frac{\partial H}{\partial(\eta p)}(\eta p, \eta q) = \eta \frac{\partial H}{\partial p}(p, q). \tag{A.25}$$

Cette dernière condition est utile lorsque l'on dérive le temps total $(A.19)$ d'une orbite $\mathfrak{o}$

$$\frac{\partial T_{\mathfrak{o}}}{\partial q}(\eta q, q, E) = \frac{\eta}{\partial_p H(\eta p, \eta q)} - \frac{1}{\partial_p H(p, q)} \overset{(A.25)}{=} 0. \tag{A.26}$$

On vient de montrer que l'énergie $E_{\mathfrak{o}}$ d'une orbite $\mathfrak{o}$ (demi-)périodiques ne dépend alors que du temps $T = T_{\mathfrak{o}}$ et non du point de départ q de la trajectoire $\mathfrak{o}$

$$\frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial T}(\eta q, q, T) = \frac{\mathrm{d}E_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}T}. \tag{A.27}$$

Finalement, en remplaçant $(A.24)$ sous la racine dans l'expression $(A.18)$, on peut sortir de l'intégrale la dérivée de l'énergie par rapport au temps pour obtenir

$$(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}}}{\sqrt{-2\mathrm{i}\eta\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\mathrm{d}E_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}T}}\int \frac{\mathrm{d}q}{\partial_p H(p(q, E), q)}. \tag{A.28}$$

On peut évaluer cette dernière intégrale en notant que l'intégration se fait sur tous les points de la trajectoire $\mathfrak{o}$ qui contribue. Cette trajectoire peut être décomposée selon les différentes branches qui la constitue et l'intégrale peut alors être découpée en regroupant tous les points critiques (points de départ de la trajectoire) appartenant à une même branche. Dans ce cas, l'intégrale de $(A.28)$ devient la somme sur toutes les branches β différentes

$$\int \frac{\mathrm{d}q}{\partial_p H(p(q, E), q)} = \sum_\beta \int \frac{\mathrm{d}q}{\partial_p H(p_\beta(q, E), q)} \overset{\text{def}}{=} \sum_\beta T_\beta(E). \tag{A.29}$$

Comme chaque branche est séparée par deux points de rebroussement, la variable d'intégration évolue d'un point de rebroussement à l'autre et chacune de ces intégrales correspond alors au temps passé pour parcourir entièrement la branche β contrairement à la définition

(A.19) où le temps total est celui de l'orbite $\mathfrak{o}$. Finalement la contribution aux traces (2.60) d'une trajectoire dominante $\mathfrak{o}$ de longueur non nulle est

$$(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{\sum_\beta T_\beta}{\sqrt{-2\mathrm{i}\eta\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\mathrm{d}E_{\mathfrak{o}}}{\mathrm{d}T}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}}, \tag{A.30}$$

qui correspond bien à l'expression (2.65). L'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$ comprend encore une fois la façon dont sont calculées les racines carrées et le possible changement de signe lors du regroupement sous une même racine d'un produit de racines carrées de grandeurs complexes. Généralement, il est difficile d'évaluer correctement cet indice mais il sera pour nous suffisant de savoir que, comme il correspond au nombre de fois où l'approximation semiclassique n'est plus valable lors du parcours le long de la trajectoire, il doit seulement dépendre du nombre de points de rebroussement et de leur nature, rencontrés sur l'orbite $\mathfrak{o}$. Il est aussi important de souligner que la somme sur β ne contient qu'une seule fois chaque branche qui constitue la trajectoire même si l'orbite repasse plusieurs fois par le même point. L'expression (A.30) n'est pas inconnue dans l'étude standard JWKB et une forme similaire a déjà été obtenue dans le cadre de la théorie des champs [27].

Annexe B

Calcul de $\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$

On cherche ici à calculer semiclassiquement la trace

$$\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) = \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q'\Pi_n(q,q')G(\eta q',q,T). \tag{B.1}$$

Nous avons dit que l'opérateur $\hat{\Pi}_n$ doit imiter le projecteur exact $|\psi_n^+\rangle\langle\psi_n^+| + |\psi_n^-\rangle\langle\psi_n^-|$ où les $|\psi_n^\pm\rangle$ sont les états propres du système. Une façon naturelle d'approcher l'opérateur $\hat{\Pi}_n$ est d'utiliser un quasimode $|\Psi_n\rangle$, localisé sur un des tores réels impliqué dans le doublet tunnel, qui est défini comme

$$|\Psi_n\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\psi_n^+\rangle + |\psi_n^-\rangle\Big). \tag{B.2}$$

En utilisant l'opérateur de parité $\hat{S}$, on remarque immédiatement que

$$\hat{S}|\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\psi_n^+\rangle - |\psi_n^-\rangle\Big) \tag{B.3}$$

À partir de cette définition, le projecteur se réécrit

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_n &= |\psi_n^+\rangle\langle\psi_n^+| + |\psi_n^-\rangle\langle\psi_n^-|, & \text{(B.4)}\\ &= |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| + \hat{S}|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{S}. & \text{(B.5)} \end{aligned}$$

Le quasimode $|\Psi_n\rangle$ peut être donné semiclassiquement par les méthodes semiclassiques développées au premier chapitre. Dans le cas d'un nombre arbitraire de branches β des tores classiques [54] [80], le quasimode prend la forme générale

$$\Psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{\sum_\beta T_\beta(E_n)}}\sum_\beta \frac{A_{n,\beta}}{\sqrt{\partial_p H(p_\beta(q,E_n),q)}}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\int_{b_\beta}^q p_\beta(x,E_n)\mathrm{d}x}, \tag{B.6}$$

où $T_\beta(E_n)$ et $b\beta$ sont respectivement le temps caractéristique et le point de référence de la branche β et $A_{n,\beta}$ est un coefficient sans dimension. Nous allons travailler dans l'espace des positions q mais un traitement similaire dans l'espace des impulsions p mènera au même

résultat. En utilisant le quasimode, l'opérateur de sélection est réécrit dans l'espace des positions comme

$$\Pi_n(q,q') = \langle q|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|q'\rangle + \langle q|\hat{S}|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\hat{S}|q'\rangle = 2\Psi_n(q)\Psi_n^*(q'), \tag{B.7}$$

et on peut maintenant l'insérer dans la double intégrale $(B.1)$ pour obtenir

$$\mathrm{tr}\,\hat{A}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) = 2\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q'\Psi_n(q)\Psi_n^*(q')G(\eta q',q,T). \tag{B.8}$$

Le propagateur semiclassique $G(\eta q',q,T)$ a déjà été défini au chapitre 2 et est donné par la somme (2.56). Finalement, en insérant $(B.6)$ et (2.56) dans cette dernière expression de la trace, on arrive à une somme d'intégrales de la forme

$$\frac{(-1)^{\kappa_\mathfrak{o}}\sqrt{2}\mathrm{i}A_{n,\beta}A^*_{n,\beta'}}{\sqrt{\pi\hbar(\sum_\beta T_\beta)(\sum_{\beta'}T_{\beta'})}}\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q' \quad \frac{\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\int_{b_\beta}^{q}p_\beta(x,E_n)\mathrm{d}x}}{\sqrt{\partial_p H(p_\beta(q,E_n),q)}}\frac{\mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\int_{b_{\beta'}}^{q'}p_{\beta'}(x,E_n)\mathrm{d}x}}{\sqrt{\partial_p H(p_{\beta'}(q',E_n),q')}}$$
$$\times\sqrt{\frac{\partial^2 S_\mathfrak{o}}{\partial q_i\partial q_f}}\Bigg|_{(\eta q',q,T)}\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_\mathfrak{o}(\eta q',q,T)}. \tag{B.9}$$

Dans la limite semiclassique, on peut calculer la condition de phase stationnaire sur q

$$\frac{\partial S_\mathfrak{o}}{\partial q_i}(\eta q',q,T) = -p_\beta(q,E_n), \tag{B.10}$$

et sur q'

$$\frac{\partial S_\mathfrak{o}}{\partial q_f}(\eta q',q,T) = \eta p_{\beta'}(q',E_n). \tag{B.11}$$

Ces deux conditions nous indiquent que les trajectoires que nous recherchons sont des orbites d'énergie E_n qui partent à $t(s_i)=0$ du point $(p_i,q_i)=p_\beta(q,E_n),q$ et atteignent le point d'arrivée $(p_f,q_f)=(\eta p_{\beta'}(q',E_n),\eta q')$ à l'instant $t(s_f)=T$. On remarque alors que l'on ne cherche pas nécessairement des trajectoires périodiques. De plus, en regroupant tous les termes des exponentielles, on remarque que l'action totale ne dépend que des branches de départ b_β et d'arrivée $b_{\beta'}$ et non précisemment de (p_i,q_i) et (p_f,q_f), puisqu'elle s'écrit

$$\begin{aligned}
S_{\mathfrak{o},\beta,\beta'}(E_n,T) &= \int_{b_\beta}^{q_i}p_\beta(x,E_n)\mathrm{d}x - \int_{q_f}^{b_{\beta'}}p_{\beta'}(x,E_n)\mathrm{d}x + S_\mathfrak{o}(q_f,q_i,T), && \text{(B.12)}\\
&= \int_{b_\beta}^{q_i}p_\beta(x,E_n)\mathrm{d}x - \int_{q_f}^{b_{\beta'}}p_{\beta'}(x,E_n)\mathrm{d}x + \int_{s_i}^{s_f}p(s)\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s}\mathrm{d}s - E_nT, && \text{(B.13)}\\
&= \tilde{S}_\mathfrak{o}(b_\beta,b_{\beta'},E_n) - E_nT. && \text{(B.14)}
\end{aligned}$$

Comme le quasimode est défini sur un seul tore d'énergie E_n, les variables q et q' varient sur le même tore. On comprend bien alors que dans le cas où $\eta=1$, les points de départ et d'arrivée seront définis sur le même tore tandis que si $\eta=-1$ les trajectoires devront connectées les deux tores symétriques réels. Ensuite, lorsque l'énergie E_n et le temps T sont fixés pour un point de départ q_i donné sur la branche β, alors le point d'arrivée q_f et la branche β' est défini de manière unique. Cette remarque nous permet d'effectuer la

phase stationnaire sur q' et les points critiques $q'_c = q'_c(q)$ sont définis uniquement.La phase stationnaire sur q' nous conduit à

$$\frac{(-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} 2\mathrm{i} A_{n,\beta} A^*_{n,\beta'}}{\sqrt{(\sum_\beta T_\beta)(\sum_{\beta'} T_{\beta'})}} \int \mathrm{d}q \left\{ \frac{\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\int_{b_\beta}^{q} p_\beta(x,E_n)\mathrm{d}x}}{\sqrt{\partial_p H(p_\beta(q,E_n),q)}} \frac{\mathrm{e}^{(-\mathrm{i}/\hbar)\int_{b_{\beta'}}^{q'} p_{\beta'}(x,E_n)\mathrm{d}x}}{\sqrt{\partial_p H(p_{\beta'}(q'_c,E_n),q'_c)}} \right.$$
$$\left. \times \sqrt{\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}}\bigg|_{(\eta q'_c,q,T)} \frac{\mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o}}(\eta q'_c,q,T)}}{\sqrt{(-\partial_{q'} p_{\beta'} + \partial^2_{q'q'} S_{\mathfrak{o}})|_{q'=q'_c}}} \right\}. \tag{B.15}$$

On peut simplifier cette expression en dérivant $(B.11)$ par rapport à q avec $q'_c = q'_c(q)$ et en utilisant les relations des fonctions implicites pour $T = T_{\mathfrak{o}}(\eta q'_c(q), q, E_n)$, on obtient la condition

$$\frac{\partial p_{\beta'}}{\partial q'} - \frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q'^2} = \eta \frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f} \left(\frac{\mathrm{d}q'_c}{\mathrm{d}q}\right)^{-1}, \tag{B.16}$$

$$= -\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f} \left(\frac{\partial_{q_f} T_{\mathfrak{o}}}{\partial_{q_i} T_{\mathfrak{o}}}\right), \tag{B.17}$$

$$\overset{(A.19)}{=} \frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f} \left(\frac{\partial_p H(p_i,q_i)}{\partial_p H(p_f,q_f)}\right). \tag{B.18}$$

Enfin, en remplaçant cette dernière forme dans $(B.15)$ puis en utilisant $(A.25)$, on retrouve une intégrale du type T_β défini en $(A.29)$ en rappelant que l'exposant est indépendant du point de départ q,

$$\frac{(-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} 2\sqrt{\eta} A_{n,\beta} A^*_{n,\beta'}}{\sqrt{(\sum_\beta T_\beta)(\sum_{\beta'} T_{\beta'})}} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)S_{\mathfrak{o},\beta,\beta'}(E_n,T)} \int \frac{\mathrm{d}q}{\partial_q H(p_\beta(q,E_n),q)}. \tag{B.19}$$

Cependant le domaine d'intégration de cette intégrale peut être inclus dans celui de $(A.29)$. En effet, les trajectoires n'étant pas obligatoirement (demi-)périodiques, il est possible que lorsque l'on déplace le point de départ sur une branche β, le point d'arrivée franchisse une bifuraction (point de rebroussement) et change de branche β'. Cependant, comme dans l'appendice A, l'intégrale fournit des temps caractéristiques et on ne compte pas le nombre de fois que la branche est traversée par la trajectoire. Finalement, la somme totale de toutes les intégrales peut, comme expliqué dans l'exemple du double puits au chapitre 5, être réécrite comme une somme sur toutes les classes topologiques de trajectoires $\mathfrak{o}$ différenciées par leur séquence de points de rebroussement $[\rho_1, \rho_2, \ldots]$ sur la section $\mathfrak{s}$ d'énergie E_n. Selon notre critère de sélection, les trajectoires complexes retenues dans la somme sont celles qui maintiennent une variable canonique réelle. Dans le cas de tores possédant seulement deux branches, on peut utiliser les formules de connexions [61] pour évaluer les coefficients $A_{n,\beta}$ du quasimode. On évalue ainsi la trace tr $\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ qui se réécrit finalement

$$\mathrm{tr}\,\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T) \overset{\hbar\to 0}{\sim} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} \frac{\mathrm{i}(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1}}{2} \mathrm{e}^{(\mathrm{i}/\hbar)\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_\beta,b_{\beta'},E_n)} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n T/\hbar}. \tag{B.20}$$

Nous utiliserons dans le cas de la trace $\operatorname{tr} \hat{\Pi}_n\hat{U}(T)$ l'approximation (5.44). Cette somme est très utile puisqu'elle ne fait intervenir que des quantités géométriques indépendantes de la paramétrisation du temps T et du choix des coordonnées. Enfin, l'indice $\mu_{\mathfrak{o}}$, qui est relié principalement au nombre de points de rebroussement rencontrés, et $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}$ sont des quantités additives et dépendent du nombre de fois que l'on traverse les branches des tores.

Annexe C

Développement asymptotique des actions $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$ et $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$ lorsque $E \to 0^+$

Cet appendice présente comment calculer le développement asymptotique de l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$ de l'orbite primitive $\mathfrak{r}$ et de l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$ de l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ dans la limite $E \to 0^+$.

C.1 Calcul de $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$

On commence par effectuer le développement de $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)$ en écrivant

$$\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E) = 2\int_{q_r(E)}^{q'_r(E)} \sqrt{2[E - V(q)]}\mathrm{d}q, \tag{C.1}$$

$$\stackrel{\text{def}}{=} \tilde{S}_+(E) + \tilde{S}_-(E), \tag{C.2}$$

avec

$$\tilde{S}_+(E) \stackrel{\text{def}}{=} 2\int_{a}^{q'_r(E)} \sqrt{2[E - V(q)]}\mathrm{d}q, \tag{C.3}$$

$$\tilde{S}_-(E) \stackrel{\text{def}}{=} 2\int_{q_r(E)}^{a} \sqrt{2[E - V(q)]}\mathrm{d}q. \tag{C.4}$$

On rappelle que a correspond à la position d'un minimum local tel que $V(a) = 0$, $V^{(1)}(a) = 0$ et $V^{(2)}(a) = \omega^2$ (les exposants définissent l'ordre de la dérivée) tandis que $q_r(E)$ et $q'r(E)$ vérifient $V(q_r(E)) = V(q'_r(E)) = E$. On va calculer indépendamment ces deux termes en commençant par $\tilde{S}_-(E)$. Dans l'intégrale $(C.3)$, on effectue le changement de variable suivant

$$q = a - s\epsilon, \quad s \in [0,1] \quad \text{et } \epsilon \stackrel{\text{def}}{=} a - q_r(E), \tag{C.5}$$

et on obtient

$$\tilde{S}_-(E) = 2\epsilon\sqrt{2}\int_0^1 \sqrt{V(a-\epsilon) - V(a - s\epsilon)}\mathrm{d}s. \tag{C.6}$$

On procède au développement limité autour de $\epsilon = 0$ de $V(a-\epsilon)$ et $V(a-s\epsilon)$

$$V(a-\epsilon) = \frac{\epsilon^2}{2}\omega^2 - \frac{\epsilon^3}{6}V^{(3)}(a) + \frac{\epsilon^4}{24}V^{(4)}(a) + \mathrm{o}(\epsilon^4), \tag{C.7}$$

$$V(a-s\epsilon) = \frac{(s\epsilon)^2}{2}\omega^2 - \frac{(s\epsilon)^3}{6}V^{(3)}(a) + \frac{(s\epsilon)^4}{24}V^{(4)}(a) + \mathrm{o}((s\epsilon)^4). \tag{C.8}$$

En injectant les deux développements dans l'intégrand $(C.6)$ et en développant de nouveau autour de $\epsilon = 0$, on arrive à

$$\begin{aligned}\sqrt{V(a-\epsilon) - V(a-s\epsilon)} &\simeq \frac{\omega\epsilon}{\sqrt{2}}\sqrt{1-s^2}\sqrt{1 + \frac{\epsilon V^{(3)}(a)}{3\omega^2}\frac{s^3-1}{1-s^2} + \frac{\epsilon^2 V^{(4)}(a)}{12\omega^2}\frac{1-s^4}{1-s^2}}, \\ &\overset{\epsilon\to 0}{\simeq} \frac{\omega\epsilon}{\sqrt{2}}\sqrt{1-s^2} + \frac{\epsilon^2 V^{(3)}(a)}{6\sqrt{2}\omega}\frac{s^3-1}{\sqrt{1-s^2}} + \frac{\epsilon^3 V^{(4)}(a)}{24\sqrt{2}\omega}\frac{1-s^4}{\sqrt{1-s^2}} \\ &\quad - \frac{\epsilon^3 (V^{(3)})^2(a)}{72\sqrt{2}\omega^3}\frac{(1-s^3)^2}{(1-s^2)^{3/2}}.\end{aligned} \tag{C.9}$$

En injectant dans l'équation $(C.6)$, on intègre chaque terme, ce qui donne

$$\tilde{S}_- \simeq \frac{\omega\pi}{2}\epsilon^2 + \frac{V^{(3)}(a)}{3\omega}\left(\frac{2}{3} - \frac{\pi}{2}\right)\epsilon^3 + \left[\frac{5\pi V^{(4)}(a)}{192\omega} - \frac{(V^{(3)})^2(a)}{36\omega^3}\left(4 - \frac{15\pi}{16}\right)\right]\epsilon^4. \tag{C.10}$$

On a obtenu une expression de l'action $\tilde{S}_-$ en puissance de ϵ. En faisant un développement asymptotique autour de $\epsilon = 0$ de la fonction implicite $V(a-\epsilon) = E$

$$V(a-\epsilon) = E = \overset{\epsilon\to 0}{\simeq} \sum_{n\geqslant 2} \frac{(-1)^n V^{(n)}(a)}{n!}\epsilon^n, \tag{C.11}$$

on peut trouver la dépendance de ϵ en E sous la forme d'une série

$$\epsilon = \alpha_0 + \alpha_1\sqrt{E} + \alpha_2 E + \alpha_3 E^{3/2} + \alpha_4 E^2 + \dots. \tag{C.12}$$

Une fois $(C.12)$ remplacé dans $(C.11)$, on annule tous les ordres sauf le terme en E. Cette opération mène à

$$\alpha_0 = 0, \quad \alpha_1 = \pm\frac{\sqrt{2}}{\omega}, \quad \alpha_2 = \frac{V^{(3)}(a)}{3\omega^4}, \quad \alpha_3 = \pm\frac{\sqrt{2}}{36\omega^7}[5(V^{(3)})^2(a) - 3\omega^2 V^{(4)}(a)] \tag{C.13}$$

où on sélectionnera les signes + afin de garder $\epsilon = a - q_r(E) > 0$. Le développement $(C.12)$ devient alors

$$\epsilon = \frac{\sqrt{2}}{\omega}\sqrt{E} + \frac{V^{(3)}(a)}{3\omega^4}E + \frac{\sqrt{2}}{36\omega^7}[5(V^{(3)})^2(a) - 3\omega^2 V^{(4)}(a)]E^{3/2} + \mathrm{o}(E^2). \tag{C.14}$$

En injectant enfin cette dernière expression dans le développement $(C.10)$, on obtient la forme asymptotique de l'action $\tilde{S}_-(E)$

$$\tilde{S}_-(E) \simeq \frac{\pi}{\omega}E + \frac{4\sqrt{2}}{9\omega^4}V^{(3)}(a)E^{3/2} + \frac{\pi}{\omega^7}\left(\frac{5(V^{(3)})^2(a)}{48} - \frac{V^{(4)}(a)\omega^2}{16}\right)E^2 + \mathrm{o}(E^2). \tag{C.15}$$

La même démarche peut être menée pour l'action $\tilde{S}_+$. En posant cette fois $\gamma = q_r'(E) - a > 0$, on arrive à

$$\tilde{S}_+(E) \simeq \frac{\pi}{\omega}E - \frac{4\sqrt{2}}{9\omega^4}V^{(3)}(a)E^{3/2} + \frac{\pi}{\omega^7}\left(\frac{5(V^{(3)})^2(a)}{48} - \frac{V^{(4)}(a)\omega^2}{16}\right)E^2 + \mathrm{o}(E^2). \quad \text{(C.16)}$$

On peut enfin calculer le développement asymptotique de $\tilde{S}_r(E)$ en sommant les deux formules $(C.15)$ et $(C.16)$

$$\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E) = \frac{2\pi}{\omega}E + BE^2 + \mathrm{o}(E^2) \quad \text{(C.17)}$$

avec

$$B = \frac{\pi}{24\omega^7}[5(V^{(3)})^2(a) - 3\omega^2 V^{(4)}(a)]. \quad \text{(C.18)}$$

C.2 Calcul de $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$

L'action de l'orbite primitive $\mathfrak{c}$ d'énergie E s'écrit

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}} = 4\int_0^{q_r(E)} \sqrt{2(V(q) - E)}\mathrm{d}q. \quad \text{(C.19)}$$

Il n'est pas possible de reproduire exactement le traitement précédent puisque $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ n'est pas différentiable en $E = 0$. On commence par le changement de variable $q = a - s$ et $\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} a - q_r(E)$. L'intégrale devient

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}} = 4\sqrt{2}\int_\epsilon^a \sqrt{V(a-s) - V(a-\epsilon)}\mathrm{d}s. \quad \text{(C.20)}$$

La dérivée par rapport à l'énergie s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E}(E) = -\int_\epsilon^a \frac{2\sqrt{2}\mathrm{d}s}{\sqrt{V(a-s) - V(a-\epsilon)}} \stackrel{\text{def}}{=} -\int_\epsilon^a L(\epsilon, s)\mathrm{d}s \quad \text{(C.21)}$$

On peut extraire la partie discontinue de la fonction $L(\epsilon, s)$ en utilisant son développement asymptotique pour $\epsilon \to 0$. En utilisant des relations du type $(C.7)$, on note que

$$\begin{aligned} V(a-s) - V(a-\epsilon) &= \frac{\omega^2}{2}(s^2 - \epsilon^2) + \sum_{n\geqslant 3}\frac{(-1)^n V^{(n)}(a)}{n!}(s^n - \epsilon^n), && \text{(C.22)} \\ &= \frac{\omega^2}{2}(s^2 - \epsilon^2)\left[1 + \sum_{n\geqslant 3}\frac{2(-1)^n V^{(n)}(a)}{\omega^2 n!}\frac{(s^n - \epsilon^n)}{(s^2 - \epsilon^2)}\right], && \text{(C.23)} \end{aligned}$$

et en injectant cette expression dans $L(\epsilon, s)$ on obtient

$$L(\epsilon, s) = \frac{4}{\omega\sqrt{s^2 - \epsilon^2}}\left[1 + \sum_{n\geqslant 3}\frac{2(-1)^n V^{(n)}(a)}{\omega^2 n!}\frac{(s^n - \epsilon^n)}{(s^2 - \epsilon^2)}\right]^{-1/2}. \quad \text{(C.24)}$$

On développe la racine carré pour avoir

$$L(\epsilon, s) = \frac{4}{\omega\sqrt{s^2-\epsilon^2}} + \frac{4V^{(3)}(a)}{6\omega^3}\frac{s^3-\epsilon^3}{(s^2-\epsilon^2)^{3/2}} + M(\epsilon, s). \tag{C.25}$$

Le terme $M(\epsilon, s)$ contient le reste du développement et est une fonction continue de s et ϵ. Dans ce cas, $\epsilon \mapsto \int_\epsilon^a M(\epsilon, s)\mathrm{d}s$ est aussi continu et dans la limite $\epsilon \to 0$, on a

$$\int_0^a M(0,s)\mathrm{d}s = \int_0^a \left[L(0,s) - \frac{4}{s\omega} - \frac{2V^{(3)}(a)}{3\omega^3}\right]\mathrm{d}s, \tag{C.26}$$

$$= \int_0^a \left[\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{V(a-s)}} - \frac{4}{s\omega}\right]\mathrm{d}s - \frac{2aV^{(3)}(a)}{3\omega^3}. \tag{C.27}$$

Le changement de variable $q = a - s$ dans l'intégrale du membre de droite de $(C.26)$ donne

$$\int_0^a M(0,s)\mathrm{d}s = \frac{4}{\omega}\int_0^a \left(\frac{\omega}{\sqrt{2V(q)}} - \frac{1}{a-q}\right)\mathrm{d}q - \frac{2aV^{(3)}(a)}{3\omega^3}, \tag{C.28}$$

$$= \frac{4A}{\omega} - \frac{2aV^{(3)}(a)}{3\omega^3}, \tag{C.29}$$

avec

$$A = \int_0^a \left(\frac{\omega}{\sqrt{2V(q)}} - \frac{1}{a-q}\right)\mathrm{d}q. \tag{C.30}$$

On retrouve ici l'expression (5.27). On peut maintenant calculer la dérivée de l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ par rapport à l'énergie en injectant $(C.25)$ et $(C.29)$ dans $(C.21)$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E} = \frac{4}{\omega}\ln\left(\frac{\epsilon}{2a}\right) - \frac{4A}{\omega}, \tag{C.31}$$

$$\overset{(C.14)}{=} \frac{4}{\omega}\ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega}\right) - \frac{4A}{\omega}. \tag{C.32}$$

Enfin on retrouve l'action $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ en intégrant sur l'énergie cette dernière expression

$$\int_0^E \frac{\mathrm{d}\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{\mathrm{d}E'}\mathrm{d}E' = \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) - \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(0), \tag{C.33}$$

$$\overset{(C.31)}{=} -\frac{2}{\omega}(2A+1)E + \frac{4E}{\omega}\ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega}\right) \tag{C.34}$$

qui fournit le développement asymptotique (5.25)

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) = \tilde{S}_{\mathfrak{c}}(0) + \frac{4E}{\omega}\ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega}\right) - \frac{2(2A+1)}{\omega}E + \mathrm{o}(E). \tag{C.35}$$

Annexe D

Article

Instantons re-examined: Dynamical tunneling and resonant tunneling

Jérémy Le Deunff* and Amaury Mouchet†

Laboratoire de Mathématiques et de Physique Théorique, Université François Rabelais de Tours–CNRS, Fédération Denis Poisson, UMR 6083, Parc de Grandmont, 37200 Tours, France

(Received 20 November 2009; published 8 April 2010)

Starting from trace formulas for the tunneling splittings (or decay rates) analytically continued in the complex time domain, we obtain explicit semiclassical expansions in terms of complex trajectories that are selected with appropriate complex-time paths. We show how this instantonlike approach, which takes advantage of an incomplete Wick rotation, accurately reproduces tunneling effects not only in the usual double-well potential but also in situations where a pure Wick rotation is insufficient, for instance dynamical tunneling or resonant tunneling. Even though only one-dimensional autonomous Hamiltonian systems are quantitatively studied, we discuss the relevance of our method for multidimensional and/or chaotic tunneling.

DOI: 10.1103/PhysRevE.81.046205 PACS number(s): 05.45.Mt, 03.65.Sq, 03.65.Xp, 05.60.Gg

I. INTRODUCTION: EVENTS OCCUR IN COMPLEX TIME

Instantons generally refer to solutions of classical equations in the Euclidean space-time, i.e., once a Wick rotation $t \mapsto -it$ has been performed on time t in the Minkowskian space-time. Since the mid-seventies, they have been extensively used in gauge field theories to describe tunneling between degenerate vacua [1]. In introductory texts [[2,3], for instance], they are first presented within the framework of quantum mechanics: when the classical Hamiltonian of a system with one degree of freedom has the usual form

$$H(p,q) = \frac{1}{2}p^2 + V(q) \tag{1}$$

(p and q denote the canonically conjugate variables), the Wick rotation induces an inversion of the potential and, then, some classical real solutions driven by the transformed Hamiltonian $p^2/2 - V(q)$ can be exploited to quantitatively describe a tunneling transition. As far as we know, in this context, only the simplest situations have been considered, namely the tunneling decay from an isolated minimum of V to a continuum and the tunneling oscillations between N degenerated minima of V that are related by an N-fold symmetry. In those cases, what can be captured is tunneling at the lowest energy only. However, not to speak of the highly nontrivial cases of tunneling in nonautonomous and/or nonseparable multidimensional systems, there are many situations that cannot be straightforwardly treated with a simple inversion of the one-dimensional, time-independent, potential.

First, tunneling—i.e., any quantum phenomenon that cannot be described by *real* classical solutions of the original (non Wick-rotated) Hamilton's equations—may manifest itself through a transition that is not necessarily a classically forbidden jump in *position* [4]. For instance, the reflection above an energy barrier, as a forbidden jump in momentum, is indeed a tunneling process [5,6]. In the following, we will consider the case of a simple pendulum whose dynamics is governed by the potential $V(q) = \gamma \cos q$; for energies larger than the strength $\gamma > 0$ of the potential, one can observe a quantum transition between states rotating in opposite direction while two distinct rotational classical solutions, obtained one from each other by the reflection symmetry, are always disconnected in real phase-space.

A second example is provided by a typical situation of resonant tunneling: when, for instance, V has a third, deeper, well which lies in between two symmetric wells [see Fig. 6(a)], the oscillation frequency between the latter can be affected by several orders of magnitude, when two eigenenergies get nearly degenerate with a third one, corresponding to a state localized in the central well. Then, we lose the customary exponential weakness of tunneling and it is worth stressing, coming back for a second to quantum field theory, that having a nearly full tunneling transmission through a double barrier may have drastic consequences in some cosmological models. In this example, one can immediately see [Fig. 6(b)] that $-V$ also has an energy barrier and working with a complete Wick rotation only remains insufficient in that case.

In order to describe the tunneling transmission at an energy E below the top of an energy barrier, which may be crucial in some chemical reactions, the pioneer works by Freed [7] and George and Miller [8,9] have shown that the computation of a Green's function $\widetilde{G}(q_f,q_i;E)$ (or a scattering matrix element) requires taking into consideration classical trajectories with a complex time. These complex times come out when looking for the saddle-point main contributions to the Fourier transform of the time propagator,

$$\widetilde{G}(q_f,q_i;E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^\infty G(q_f,q_i;t)e^{iEt/\hbar}dt, \tag{2}$$

which is, up to now, the common step shared by all the approaches involving complex time [[10–14], for instance]. Though well suited for the study of scattering, indirect computations are required to extract from the poles of the energy Green's function (2) some spectral signatures of tunneling in bounded systems. Generically, these signatures appear as small splittings between two quasidegenerate energy levels and can be seen as a narrow-avoided crossing of the two

*jeremy.ledeunff@lmpt.univ-tours.fr
†mouchet@lmpt.phys.univ-tours.fr

 ©2010 The American Physical Society

levels when a classical parameter is varied [15–18]. In the present article, we propose a unified treatment that provides a direct computation of these splittings [formulas (9) or (10)]; as shown in Sec. II, it takes full advantage of the possibility of working not necessarily with purely imaginary time, but with a general parametrization of complex time as first suggested in [19]. The semiclassical approach naturally follows (Sec. III) and some general asymptotic expansions can be written [Eqs. (C6) and (40)] and simplified [Eq. (73)]; they constitute the main results of this paper. To understand where these formulas come from and how they work, we will start with the paradigmatic case of the double-well potential (Sec. IV) and the simple pendulum (Sec. V); we defer some general and technical justifications in the appendices. Then we will treat the resonant case in detail in Sec. VI, where an appropriate incomplete Wick rotation $t \mapsto e^{-i\theta}t$ provides the key to showing how interference effects à la Fabry-Pérot between several complex trajectories reproduce the nonexponential behavior of resonant tunneling, already at work in open systems with a double barrier [20,21]. After having shown how to adapt our method to the computations of escape rates from a stable island in phase-space (Sec. VII), we will conclude with more long-term considerations by explaining how our approach provides a natural and new starting point for studying tunneling in multidimensional systems.

II. TUNNELING SPLITTINGS

A particularly simple signature of tunneling can be identified when the Hamiltonian has a two fold symmetry and, therefore, we will consider quantum systems whose time-independent Hamiltonian $\hat{H}=H(\hat{p},\hat{q})$ commute with an operator $\hat{\mathsf{S}}$ such that $\hat{\mathsf{S}}^2=1$ (the $\hat{}$ allows to distinguish the quantum operators from the classical phase-space functions or maps). In most cases, $\hat{\mathsf{S}}$ stands for the parity operator

$$H(-p,-q)=H(p,q). \tag{3}$$

The spectrum of $\hat{H}$ can be classified according to $\hat{\mathsf{S}}$ and, for simplicity, we will always consider a bounded system whose discrete energy spectrum and the associated orthonormal eigenbasis are defined by

$$\hat{H}|\phi_n^{\pm}\rangle = E_n^{\pm}|\phi_n^{\pm}\rangle, \quad \hat{\mathsf{S}}|\phi_n^{\pm}\rangle = \pm|\phi_n^{\pm}\rangle, \tag{4}$$

where n is a natural integer. When the Planck constant $\hbar$ is small compared to the typical classical actions, standard semiclassical analysis [[22–24]] shows that one can associate some classical regions in phase-space to each eigenstate $|\phi_n^{\pm}\rangle$. This can be done by constructing a phase-space representation of $|\phi_n^{\pm}\rangle$, typically the Wigner or the Husimi representation, and look where the corresponding phase-space function $\phi_n^{\pm}(p,q)$ is mainly localized (all the more sharply than $\hbar$ is small). For a Hamiltonian of the form (1) where V has local minima, some of the eigenstates remain localized in the neighborhood of the stable equilibrium points. For instance, for a double-well potential whose shape is shown in Fig. 1(a), the symmetric state $|\phi_n^{+}\rangle$ and the antisymmetric state $|\phi_n^{-}\rangle$ at energies below the local maximum of the barrier have their Husimi representation localized around both stable equilibrium points $(p,q)=(0,\pm a)$, more precisely along the lines $H(p,q)=E$ (1d tori) at energy $E \simeq E_n^{+} \simeq E_n^{-}$. Because of the nonexact degeneracy of E_n^{+} and E_n^{-}, any linear combination of $|\phi_n^{+}\rangle$ and $|\phi_n^{-}\rangle$ constructed in order to be localized in one well only will not be stationary anymore and will oscillate back and forth between $-a$ and a at a tunneling frequency $|E_n^{-}-E_n^{+}|/(2\pi\hbar)$. At low energy this process is classically forbidden by the energy barrier. This is very general, even for multidimensional nonintegrable systems: the splitting $\Delta E_n=|E_n^{-}-E_n^{+}|$ between some nearly degenerated doublets provides a quantitative manifestation of the tunneling between the phase-space regions where the corresponding eigenstates are localized.

Rather than computing the poles of $E \mapsto \tilde{G}(a,-a,E)$, another systematic strategy to obtain one individual splitting [49] is to start with Herring's formula [26–28] that relies on the knowledge of the eigenfunctions outside the classically allowed regions in phase-space. Here, we will propose alternative formulas [29] that involve traces of a product of operators, among them the evolution operator,

$$\hat{U}(T) \overset{\text{def}}{=} e^{-i\hat{H}T/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} (|\phi_n^{+}\rangle\langle\phi_n^{+}|e^{-iE_n^{+}T/\hbar} + |\phi_n^{-}\rangle\langle\phi_n^{-}|e^{-iE_n^{-}T/\hbar}), \tag{5}$$

analytically continued in some sector of the complex time domain. This approach, which privileges the time domain, provides, of course, a natural starting point for a semiclassical analysis in terms of classical complex orbits.

The simplest situation occurs when the tunneling doublet is made of the two lowest energies $E_0^{+} \lesssim E_0^{-}=E_0^{+}+\Delta E_0$ of the spectrum. If $\hbar\omega$ denotes the energy difference between the nearest excited states and $E_0^{\pm}$ (for the double well potential $E_1^{\pm} \simeq E_0^{\pm}+\hbar\omega$, where ω is the classical frequency around the stable equilibrium points), by giving a sufficiently large imaginary part to $-T$,

$$-\omega\,\mathrm{Im}(T) \gg 1, \tag{6}$$

we can safely retain the $n=0$ terms only, which exponentially dominate the trace of (5). To be valid, this approximation requires that we remain away from a quantum resonance where the definition of the tunneling doublet is made ambiguous by the presence of a third energy level in the neighborhood of E_0^{+} and E_0^{-}. Then we have immediately

$$\tan\left(\frac{T\Delta E_0}{2\hbar}\right) \simeq -i\frac{\mathrm{tr}(\hat{\mathsf{S}}\hat{U}(T))}{\mathrm{tr}(\hat{U}(T))}. \tag{7}$$

When the tunneling splitting is smaller than $\hbar\omega$ by several orders of magnitude, we can work with a complex time such that

$$\frac{|T|\Delta E_0}{2\hbar} \ll 1 \tag{8}$$

remains compatible with condition (6) and, therefore,

$$\Delta E_0 \simeq \Delta_0(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\hbar}{iT}\frac{\mathrm{tr}(\hat{\mathsf{S}}\hat{U}(T))}{\mathrm{tr}(\hat{U}(T))} \tag{9}$$

will provide a good approximation of the tunneling splitting for a wide range of T. Though condition (8) is widely fulfilled in many situations this is not an essential condition since one can keep working with $\tan^{-1}$. Numerically, the estimation (9) has also the advantage of obviating a diagonalization.

When we want to compute a splitting, due to tunneling, between an arbitrary doublet, the selection of the corresponding terms in the right-hand side of (5) can be made with an operator $\hat{\Pi}_n$ that will mimic the (*a priori* unknown) projector $|\phi_n^+\rangle\langle\phi_n^+|+|\phi_n^-\rangle\langle\phi_n^-|$. It will be chosen such that its matrix elements are localized in the regions of phase-space where $\phi_n^\pm(p,q)$ are dominant. Under the soft condition $|T|\Delta E_n/(2\hbar)\ll 1$, we will therefore take

$$\Delta E_n \simeq \Delta_n(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\hbar}{iT}\frac{\mathrm{tr}(\hat{\mathsf{S}}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T))}{\mathrm{tr}(\hat{\Pi}_n\hat{U}(T))}. \tag{10}$$

The localization condition on the matrix elements of $\hat{\Pi}_n$ is a selection tool that replaces Eqs. (6). In that case, there is a battle of exponentials between the exponentially small matrix elements $\langle\phi_m^\pm|\,\hat{\Pi}_n\,|\phi_m^\pm\rangle$ and the time dependent terms $e^{-i(E_m-E_n)T/\hbar}$. The last term would eventually dominate for the lower energy states ($E_m<E_n$) if $-\mathrm{Im}\,T$ could be increased arbitrarily. But once a $\mathrm{Im}\,T<0$ is given, one expects to recover a good approximation of the excited splitting by increasing $\mathrm{Re}\,T$ since, when $\mathrm{Re}\,T\gg|\mathrm{Im}\,T|$, we actually recover the real time case.

The next step consists in computing $\Delta_n(T)$ by semiclassical techniques and, then, we will add some more specific prescriptions on the choice of T, in order to improve the accuracy of ΔE_n. We will illustrate how this works in the examples of Secs. IV–VI.

Let us mention another way to select excited states that we did not exploit further. With the help of a positive smooth function $F(u)$ that has a deep, isolated minimum at $u=0$, say $F(u)=u^{2N}$ with N strictly positive, we can freeze the dynamics around any energy E by considering a new Hamiltonian $H'(p,q)\stackrel{\text{def}}{=}F(H(p,q)-E)$. Classically, the phase-space portrait is the same as the original one obtained with Hamiltonian H except that the set of points $H(p,q)=E$ now consists of equilibrium points. The quantum Hamiltonian $\hat{H}'\stackrel{\text{def}}{=}F(\hat{H}-E)$ has the same eigenfunctions as $\hat{H}$ but the corresponding spectrum is now $F(E_n^\pm-E)$. By choosing $E=E_n^+$, the doublet $E_n^\pm$ yields to the ground-state doublet $\Delta E_n'=F(\Delta E_n)$ and we can use the approximation (9) with $\hat{U}'=\exp(-i\hat{H}'T)$. With the F given above, we have

$$\Delta E_n \simeq [\Delta_n'(T)]^{1/(2N)} \stackrel{\text{def}}{=} \left[\frac{2\hbar}{iT}\frac{\mathrm{tr}(\hat{\mathsf{S}}\hat{U}'(T))}{\mathrm{tr}(\hat{U}'(T))}\right]^{1/(2N)}. \tag{11}$$

III. SEMICLASSICAL EXPRESSIONS

A. Hamiltonian dynamics with complex time

Formally, the numerator and the denominator of the right-hand side of Eq. (9) can be written as a phase-space path integral of the form

$$\int_{\mathcal{P}} e^{iS[p,q;t]/\hbar}\mathrm{D}[p]\mathrm{D}[q], \tag{12}$$

where the continuous action is the functional

$$S[p,q;t] \stackrel{\text{def}}{=} \int_{s_i}^{s_f}\left(p(s)\frac{dq}{ds}(s)-H(p(s),q(s))\frac{dt}{ds}(s)\right)ds. \tag{13}$$

The subset $\mathcal{P}$ of phase-space paths, the measure $\mathrm{D}[p]\mathrm{D}[q]$ and the action (13) appear as a continuous limit ($\tau\to 0$) of a discretized expression whose precise definition depends on the choice of the basis for computing the traces but, in any cases, involves a typical, finite, complex time step τ (see also Appendix A). The complex continuous time path $s\mapsto t(s)$ is given with fixed ends $t(s_i)=t_i=0$, $t(s_f)=t_f=T$. Because the slicing of T in small complex time steps of modulus of order τ is arbitrary, the integrals of the form (12) remain independent of the choice of $t(s)$ for $s_i<s<s_f$ as long as $\mathrm{Im}\,t(s)$ is nonincreasing in order to keep the evolution operators well defined for any slice of time [19]. In the following we will denote by $[t]$ such an admissible time-path. In a semiclassical limit (keeping the order $\lim_{\hbar\to 0}\lim_{\tau\to 0}$ [50]), the dominant contributions to integrals (12) come from some paths in $\mathcal{P}$ that extremise S, i.e., from some solutions of Hamilton's equations

$$\frac{dp}{ds}=-\frac{\partial H}{\partial q}\frac{dt}{ds}, \tag{14a}$$

$$\frac{dq}{ds}=\frac{\partial H}{\partial p}\frac{dt}{ds}, \tag{14b}$$

with appropriate boundary conditions imposed on some canonical variables at s_i and/or s_f. When H is an analytic function of the phase-space coordinates (p,q), we can take the real and imaginary parts of equations (14), use the Cauchy-Riemann equations that render explicit the entanglement between the real part and the imaginary part of any analytic function $f(z)$: $\mathrm{Re}(df/dz)=\partial(\mathrm{Re}\,f)/\partial(\mathrm{Re}\,z)=\partial(\mathrm{Im}\,f)/\partial(\mathrm{Im}\,z)$ and $\mathrm{Im}(df/dz)=\partial(\mathrm{Im}\,f)/\partial(\mathrm{Re}\,z)=-\partial(\mathrm{Re}\,f)/\partial(\mathrm{Im}\,z)$, and then obtain

$$\frac{d\,\mathrm{Re}\,p}{ds}=-\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{Re}\,q}\left[\mathrm{Re}\left(H\frac{dt}{ds}\right)\right], \tag{15a}$$

$$\frac{d(-\mathrm{Im}\,p)}{ds}=-\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{Im}\,q}\left[\mathrm{Re}\left(H\frac{dt}{ds}\right)\right], \tag{15b}$$

$$\frac{d\,\mathrm{Re}\,q}{ds}=\frac{\partial}{\partial\,\mathrm{Re}\,p}\left[\mathrm{Re}\left(H\frac{dt}{ds}\right)\right], \tag{15c}$$

$$\frac{d\,\mathrm{Im}\,q}{ds} = \frac{\partial}{\partial(-\mathrm{Im}\,p)}\left[\mathrm{Re}\left(H\frac{dt}{ds}\right)\right]. \tag{15d}$$

Therefore, the dynamics described in terms of complex canonical variables is equivalent to a dynamics that remains Hamiltonian—though not autonomous with respect to the parametrization s whenever dt/ds varies with s—involving twice as many degrees of freedom as the original system, namely $(\mathrm{Re}\,q, \mathrm{Im}\,q)$ and their respectively conjugated momenta $(\mathrm{Re}\,p, -\mathrm{Im}\,p)$. The new Hamiltonian function is then $\mathrm{Re}(Hdt/ds)$ but it would have been equivalent (though not canonically equivalent) to choose the other constant of motion $\mathrm{Im}(Hdt/ds)$ as a Hamiltonian.

What will be important in what follows is that $[t]$ will not be given a priori. Unlike in the standard instanton approach where t is forced to remain on the imaginary axis, we will see that for describing tunneling it is a more efficient strategy to look for some complex paths $(p(s), q(s))$ that naturally connect two phase-space regions and then deduce $[t]$ from one of the equations (14). It happens that in the two usual textbook examples that we mentioned in the first paragraph of Sec. I, the complex time $[t]$ has a vanishing real part, but in more general cases where tunneling between excited states is studied, this is no longer true.

B. Trace formulas

Let us privilege the q-representation and consider the analytic continuation for complex time T of the well-known Van Vleck approximation for the propagator

$$G(q_f,q_i;T) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \sum_{\mathfrak{o}} (-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} \sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}\right)} e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar}. \tag{16}$$

The sum involves (complex) classical trajectories $\mathfrak{o}$ in phase-space, i.e., solutions of equations (15) with $q(s_i)=q_i$, $q(s_f)=q_f$ for a given $[t]$ such that $t(s_i)=0$, $t(s_f)=T$. The action $S_{\mathfrak{o}}$ is computed along $\mathfrak{o}$ with definition (13) and is considered as a function of $(q_f,q_i;T)$. The integer $\kappa_{\mathfrak{o}}$ encapsulates the choice of the Riemann sheet where the square root is computed; it keeps a record of the number of points on $\mathfrak{o}$ where the semiclassical approximation (16) fails. As far as we do not cross a bifurcation of classical trajectories when smoothly deforming $[t]$, the number of $\mathfrak{o}$'s, the value of $S_{\mathfrak{o}}$ and $\kappa_{\mathfrak{o}}$ do not depend of the choice of $[t]$. The numerator (respectively, denominator) of $\Delta_0(T)$ are given by the integral $\int G(\eta q,q;T)dq$ where $\eta=-1$ (respectively, $\eta=+1$). Within the semiclassical approximation, when $\mathfrak{o}$ contributes to the propagator $G(\eta q,q;T)$, we have to evaluate

$$(-1)^{\kappa_{\mathfrak{o}}} \int dq \sqrt{\det\left(\frac{i}{2\pi\hbar}\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}\bigg|_{(\eta q,q;T)}\right)} e^{iS_{\mathfrak{o}}(\eta q,q,T)/\hbar}. \tag{17}$$

The steepest descent method requires the determination of the critical points of $S_{\mathfrak{o}}(\eta q,q,T)$. Since the momenta at the end points of $\mathfrak{o}$ are given by

$$p_i = p(s_i) = -\partial_{q_i} S_{\mathfrak{o}}(q_f,q_i;T), \tag{18a}$$

$$p_f = p(s_f) = \partial_{q_f} S_{\mathfrak{o}}(q_f,q_i;T), \tag{18b}$$

the dominant contributions to $\mathrm{tr}(\hat{U}(T))$ come from periodic orbits, i.e., when $(p_f,q_f)=(p_i,q_i)$, whereas the dominant contributions to $\mathrm{tr}(\hat{\mathbf{S}}\hat{U}(T))$ come from half *symmetric* periodic orbits, i.e., when $(p_f,q_f)=(-p_i,-q_i)$. As explained in detail in the Appendix A, one must distinguish the contributions of the zero length orbits $\mathfrak{e}$ (the equilibrium points) from the non-zero-length periodic orbits $\mathfrak{o}$. For one degree of freedom, their respective contributions are given, up to sign, by

$$\frac{e^{-iH(p_e,q_e)T/\hbar}}{e^{\lambda_{\mathfrak{e}}T/2} - \eta e^{-\lambda_{\mathfrak{e}}T/2}}, \tag{19a}$$

with $\pm\lambda_{\mathfrak{e}}$ the two Lyapunov exponents of the equilibrium point $\mathfrak{e}=(p_e,q_e)$, and

$$(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{\sum_{\beta} T_\beta}{\sqrt{-2\eta i\pi\hbar}} \sqrt{\frac{dE_{\mathfrak{o}}}{dT}} e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar}, \tag{19b}$$

where $\mathfrak{o}$ is a periodic orbit of period $T_{\mathfrak{o}}=T$ if $\eta=+1$ and half a symmetric periodic orbit of half period $T_{\mathfrak{o}}=T$ if $\eta=-1$. The sum runs over all the branches β that compose the geometrical set of points belonging to $\mathfrak{o}$. T_β is the characteristic time (A12) on the branch β. The energy $E_{\mathfrak{o}}$ is implicitly defined by Eq. (A10) and $\mu_{\mathfrak{o}}$ essentially counts the number of turning points on $\mathfrak{o}$.

Expressions (19a) and (19b) are purely geometric; their classical ingredients do not rely on a specific choice of canonical coordinates and they are independent of the choice of the basis to evaluate the traces.

In the general case, the most difficult part consists in determining which periodic orbits contribute to the semiclassical approximation of the traces. Condition $T_{\mathfrak{o}}=T$ is necessary but far from being sufficient; the structure of the complex paths (keeping a real time) may appear to be very subtle [30] and have been the subject of many recent delicate works [31]. Even for a simple oscillating integral, the determination of the complex critical points of the phase that do contribute is a highly nontrivial problem because it requires a global analysis: one must know how to deform the whole initial contour of integration to reach a steepest descent paths.

Our strategy consists in retaining the terms (19b) for which we can choose the complex time $[t]$ to constrain the (half) periodic orbit $\mathfrak{o}$ to keep one of the canonical coordinate (say q) real. This $\mathfrak{o}$ surely contributes because we do not have to deform the q part of the integration domain of Eq. (12) in the complex plane. But we will see in the next section that two different periodic orbits with real q correspond to two different choices of $[t]$: For a chosen $[t]$, only some isolated points, if any, in phase space, will provide a starting point (p_i,q_i) of a trajectory with $q(s)$ real all along $\mathfrak{o}$. When sliding slightly the initial real coordinate q_i in the integral (17), it requires to change $[t]$ as well to maintain $q(s)$ real on the whole $\mathfrak{o}$. This is not a problem since all the quantities involved in expression (17) are $[t]$ independent if the deformation of $[t]$ is small enough not to provoke a bifurcation of $\mathfrak{o}$, that is, whenever the initial point does dot cross one of the turning points, which are the boundaries of the branches β.

The integral (17) may be computed with a fixed time-path or an adaptive one for each separated branch. This computation, presented in the Appendix A, generates the sum over all branches that appears in formula (19b). To sum up, to keep a contribution to the traces, we must know if we can choose a shape of $[t]$ in order to pick a real-q periodic orbit with a specific q_i.

This construction is certainly not unique (one may choose other constraints) so we will use the intuitive principle that the periodic orbits we choose will connect the two regions of phase-space that are concerned by tunneling, i.e., where $\phi_n^{\pm}$ are dominant; this is justified by the presence of the operator $\hat{\Pi}_n$ in the right-hand side of Eq. (10). The prefactor $\Pi_n(q,q') \overset{\text{def}}{=} \langle q|\hat{\Pi}_n|q'\rangle$ will select in the integral

$$\int dq dq' \Pi_n(q,q') G(\eta q',q;T), \tag{20}$$

a domain around the projection onto the q space of the appropriate tori. In the specific case of the ground-state splitting, condition (6) does the job of $\hat{\Pi}_0$: the large value of $\mathrm{Im}\, T$ requires that the orbit approach at least one equilibrium point and then follow a separatrix line. In general we will not be able to prove that other complex periodic orbits give subdominant contributions but the examples given in the following sections are rather convincing. Moreover, our criterion of selection allows us to justify the four rules presented in [[32], Sec. IIA] for computing the contributions of complex orbits to the semiclassical expansions of the energy Green's function.

IV. APPLICATION TO THE DOUBLE-WELL POTENTIAL

Let us show first that our strategy leads to the usual instanton results for a Hamiltonian of the form (1) with an even V having two stable symmetric equilibrium points at $q=\pm a$ [Fig. 1(a)]; in their neighborhood, the frequency of the small vibrations is ω. We are interested in the ground-state splitting ΔE_0 for $\hbar$ small enough in order to have $\Delta E_0 \ll \hbar\omega$.

Before we make any semiclassical approximations, we check in Fig. 2 the validity of the estimation (9) on the quartic potential by (a) verifying that $\Delta_0(T)$ is almost real and independent of the choice of the complex T provided that conditions (6) and (8) are fulfilled, and (b) by checking that this constant gives a good approximation of the "exact" ΔE_0 computed by direct numerical diagonalization of the Hamiltonian [33].

As explained at the end of section Sec. III, in phase-space we will try to find some time-path $[t]$ that allows the existence a (half) symmetric periodic orbit $\mathfrak{o}$ that connects two tori at (real) energy $E \gtrsim 0$ in the neighborhood of $(p,q) = (0,\pm a)$ while q remains real. If we impose $t(s_i)=0$ and $t(s_f)=T$, then $E=E_{\mathfrak{o}}(q_f,q_i,T)$ is implicitly given by relation (A10). We will denote by $q_r(E)$ [respectively, $q_r'(E)$] the position of the turning point at energy $E>0$ that lies in between $q=0$ and $q=a$ (respectively, that is larger that a). The two branches $p_{\pm}(q,E)=\pm\sqrt{2[E-V(q)]}$ are either purely real

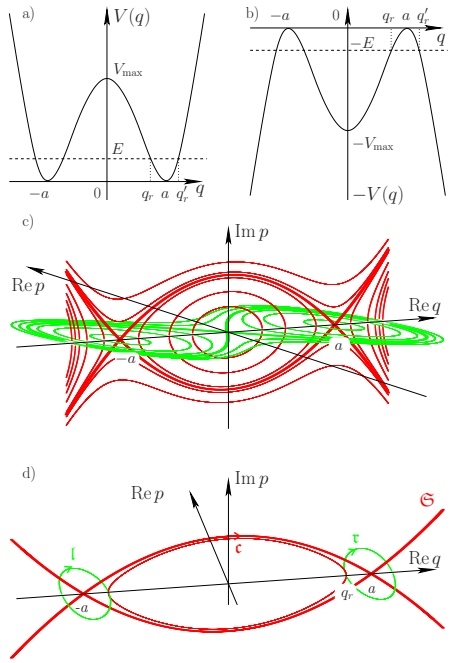


FIG. 1. (Color online) In the case of a double well potential shown in (a), tunneling can be described by a solution of Eq. (14) with a purely real q evolving from one well to the other. In phase-space, this trajectory appears to be a concatenation of two types of curves that join on the $(\mathrm{Re}\, q)$ axis: (1) a trajectory that lies in the phase-space plane $(\mathrm{Re}\, q, \mathrm{Re}\, p)$ with real variations of t at energy E with the potential V and (2) a trajectory that lies in the phase-space plane $(\mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, p)$ with imaginary variations of t at energy $-E$ with the potential $-V$ shown in (b). In (c) a family of constant energy curves is shown (horizontal green (light gray) for the first type, vertical red (dark gray) for the second type). In (d) for a given energy, we show how the three curves $\mathfrak{l}$, $\mathfrak{c}$, $\mathfrak{r}$ glue together at the turning points $(0,\pm q_r)$. $\mathfrak{S}$ denotes the separatrix $\mathrm{Im}\, p = \pm\sqrt{2V(q)}$.

when $V(q) \geqslant E$ or purely imaginary when $V(q) \leqslant E$. Then, from Eq. (14b),

$$\frac{dt}{ds} = \frac{1}{p}\frac{dq}{ds} \tag{21}$$

is purely real in the classically allowed region, while purely imaginary in the forbidden region. Therefore the complex time path $[t]$ must have the shape of a descending staircase whose steps are made of pure real or pure imaginary variations of time (see Fig. 3).

The complex orbit with real q can be represented in phase-space as a continuous concatenation of paths, following the lines $E=(\mathrm{Re}\, p)^2/2+V(q)$ in the allowed region and $-E=(\mathrm{Im}\, p)^2/2-V(q)$ in the forbidden region. It is natural to represent $\mathfrak{o}$ in the three dimensional section $\mathrm{Im}\, q=0$ of the complex phase-space with axes given by $(\mathrm{Re}\, q, \mathrm{Re}\, p, \mathrm{Im}\, p)$: the junctions at the turning points lie necessarily on the $(\mathrm{Re}\, p=0,\ \mathrm{Im}\, p=0)$ axis [see Figs. 1(c) and 1(d)]. A periodic orbit is made of a succession of repetitions of

(i) primitive real periodic orbits $\mathfrak{r}$ with energy E in the right region, that is, such that $q_r(E) \leqslant q(s) \leqslant q_r'(E)$ and $\mathrm{Im}\, p(s)=0$;

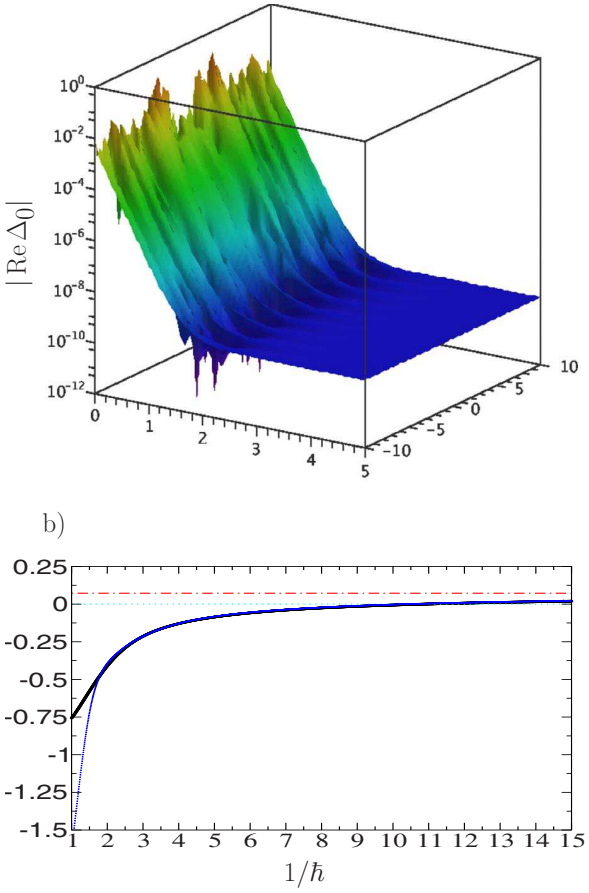


FIG. 2. (Color online) For $V(q)=(q^2-a^2)^2$ with $a=1$ and $\hbar \simeq 1/12$, we have plotted in the upper graph (a) the real part of Δ_0 defined by Eq. (9) as a function of the complex T. It becomes constant for $\mathrm{Im}\,T$ large enough for having Eq. (6) $[1/\omega = 1/(2\sqrt{2}a) \simeq 0.35]$ regardless of $\mathrm{Re}\,T$. In the same range, $\mathrm{Im}(\Delta_0(T))$ is negligible compared to $\Delta E_0 \sim 4.4\times 10^{-10}$ and condition (8) is largely fulfilled. In the lower graph (b), we have computed the "exact" value ΔE_0 by direct diagonalization. The black thick solid line corresponds to $\ln(\Delta E_0)$ from which we have substracted $\Lambda(\hbar) \overset{\mathrm{def}}{=} -\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(\hbar\omega/2)/(2\hbar)+\ln(\hbar\omega/\pi)$ in order to emphasize the contribution of the prefactor. The blue solid line corresponds to $\ln|\Delta_0|-\Lambda(\hbar)$ for $T\simeq -4i$ and become indistinguishable from the previous one for $1/\hbar \gtrsim 3$. With the same substraction, our first proposal (39) gives the constant $(\ln\sqrt{\pi}) \simeq 0.6$ and our second one (44), which is the same as the formula in Landau and Lifshitz [[34], Sec. 50, problem 3], corresponds to 0 (dotted line). Garg's formula [[28], Eq. 1.1] gives the constant $(\ln\sqrt{\pi/e} \simeq 0.07)$ (dash-dotted line).

(ii) primitive complex periodic orbits $\mathfrak{c}$ in the central region with purely imaginary p and real q, that is, such that $-q_r(E) \leq q(s) \leq q_r(E)$ and $\mathrm{Re}\,p(s)=0$;

(iii) primitive real periodic orbits $\mathfrak{l}$ with energy E in the left region. They are obtained from the periodic orbits $\mathfrak{r}$ by the symmetry S.

By denoting $T_{\mathfrak{r}}(E)$ and $T_{\mathfrak{c}}(E)$ the (real, positive) periods of the primitive periodic orbits $\mathfrak{r}$ and $\mathfrak{c}$ at energy E respectively, we have

$$T_{\mathfrak{o}}(E) = w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E) - iw_{\mathfrak{c}}T_{\mathfrak{c}}(E) - i\frac{1-\eta}{4}T_{\mathfrak{c}}(E) \tag{22}$$

with the winding numbers $w_{\mathfrak{r}}$ and $w_{\mathfrak{c}}$ being non-negative integers. The trajectory $\mathfrak{o}$ may contribute to the denominator $(\eta=+1)$ or to the numerator $(\eta=-1)$ of the right hand side of Eq. (9) provided that $T_{\mathfrak{o}}=T$. For $\eta=+1$, $\mathfrak{o}$ is periodic whereas, for $\eta=-1$, $\mathfrak{o}$ is half a symmetric periodic orbit. We will keep the contributions of all orbits for which a staircase $[t]$ can be constructed. We can understand from Fig. 3 that orbits differing by a small sliding of their initial q_i can be obtained by a small modification of the length or height of the first step. All these contributions are summed up when performing the integral (17) on one branch β and correspond to one term in the sum Σ_β in formula (19b). When at least one of the winding number is strictly larger than one, several staircase time-paths can be constructed while keeping relation (22): they differ one from each other by a different partition into steps of the length and/or heights of the staircase. The corresponding orbits $\mathfrak{o}$ can be obtained one from each other by a continuous smooth sliding of the steps of the staircase but during this process one cannot avoid an orbit starting at a turning point where a bifurcation occurs.

In the right-hand side of Eq. (16), the sum involves several trajectories differing one from each other by the sequence of turning points that are successively encountered along $\mathfrak{o}$. Therefore, to compute the dominant contribution of the non-zero-length orbits to the numerator and to the denominator of Eq. (9), we will add all the contributions of the topological classes of orbits, each of them uniquely characterized by an ordered sequence of turning points $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$, in other words by a partition of $w_{\mathfrak{r}}$ and $w_{\mathfrak{c}}$ into integers and by the branch β where its starting point lies. We can therefore express our result in a way that can be applied to cases more general than the double well: the total contribution of the non-zero-length paths to the numerator $(\eta=-1)$ and to the denominator $(\eta=+1)$ of Eq. (9) is

$$\sum_{\mathfrak{s}} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{T_\beta}{\sqrt{-2\eta i\pi\hbar}} \sqrt{\frac{dE_{\mathfrak{o}}}{dT}} e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar}. \tag{23}$$

$\mathfrak{s}$ denotes a section of an energy surface in complex phase space corresponding to one purely real canonical variable. $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$ is an ordered sequence of (not necessarily distinct) turning points that belong to a section $\mathfrak{s}$. The sum concerns all $\mathfrak{s}$ (different energies may be possible) and $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$ such that we can construct on $\mathfrak{s}$, with an appropriate choice of $[t]$, a periodic orbit $\mathfrak{o}$ if $\eta=+1$ (a half symmetric periodic orbit $\mathfrak{o}$ if $\eta=-1$) of period $T_{\mathfrak{o}}=T$. The branch β is the one where $\mathfrak{o}$ starts, the sequence of turning points that are successively crossed by $\mathfrak{o}$ is exactly $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$.

In the case of the double-well, for an energy below $V_{\max}$, a section $\mathfrak{s}$ for real q has four turning points $(0,\pm q_r)$ and $(0,\pm q_r')$. Only the points on $\mathfrak{s}$ such that $-q_r' < q < q_r'$ can provide starting points of a periodic orbit. They belong to one of the three closed loops $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$, $\mathfrak{l}$ that connect on the axis $(p=0,\ \mathrm{Im}\,q=0)$ at the turning points $(0,\pm q_r)$. Once T is given, the condition $T_{\mathfrak{o}}=T$ will select a finite set of energies

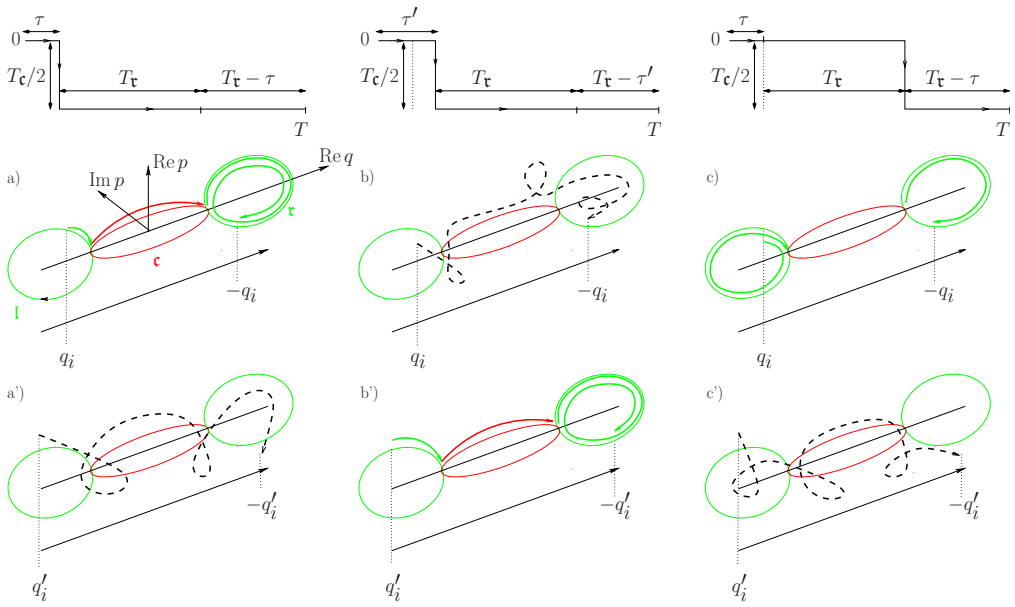


FIG. 3. (Color online) For the double well in Fig. 1, at a given energy $0<E<V_{\max}$, when $T=2T_{\mathfrak{r}}(E)-iT_{\mathfrak{c}}(E)/2$, for each one-step time path, there exists a unique half symmetric periodic orbit with energy E keeping $\mathrm{Im}\,q=0$ starting from the left allowed region. Its initial point is uniquely defined: For the time-path depicted in the left column, (p_i,q_i) is such that it takes exactly the real time τ to reach the turning point $(0,-q_r)$ following the primitive orbit $\mathfrak{l}$. Then it follows half of the orbit $\mathfrak{c}$ and ends in the right well winding once along $\mathfrak{r}$ (a). When starting at $q_i'<q_i$, there still exists a half periodic orbit joining (p_i',q_i') to $(-p_i',-q_i')$ in time T for some p_i' but unlike the previous one it gets outside the three dimensional section $\mathrm{Im}\,q=0$ (its projection is schematically represented by the dashed line in (a′). However an appropriate shift of the time step to $\tau'>\tau$ (central column) turns the latter smoothly into a trajectory with $\mathrm{Im}\,q=0$ (b′). During this process, the first trajectory starting at q_i cannot keep a purely real q anymore (b). If we shift the step by exactly $T_{\mathfrak{r}}$ (right column), we recover a trajectory starting at q_i with purely real q (c) but with a different topology since it is now winding once along $\mathfrak{l}$. The change of topology occurs when the initial position reaches a turning point while sliding the step.

for which we have Eq. (22) with integers $w_{\mathfrak{r}}$ and $w_{\mathfrak{c}}$. Any $\mathfrak{o}$ with winding numbers $w_{\mathfrak{r}}$ and $w_{\mathfrak{c}}$ will have an action given by

$$S_{\mathfrak{o}}=w_{\mathfrak{r}}S_{\mathfrak{r}}+iw_{\mathfrak{c}}S_{\mathfrak{c}}+i\frac{1-\eta}{4}S_{\mathfrak{c}} \tag{24}$$

and an index

$$\mu_{\mathfrak{o}}=w_{\mathfrak{r}}+w_{\mathfrak{c}}+\frac{1-\eta}{2} \tag{25}$$

(in the real case, $2\mu_{\mathfrak{o}}$ is computed in the same way as the Maslov index: it counts the number of turning points encountered along $\mathfrak{o}$). These quantities are independent on the choice of the six possible starting branch β (each $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{c}$, $\mathfrak{l}$ is made of two branches). When the orbit $\mathfrak{o}$ starts on $\mathfrak{r}$ or on $\mathfrak{l}$, we will have $T_\beta=T_{\mathfrak{r}}/2$ and when $\mathfrak{o}$ starts on $\mathfrak{c}$, we have $T_\beta=-iT_{\mathfrak{c}}/2$.

For $-\mathrm{Im}\,T$ larger than the oscillation period in the central well of $-V$, $w_{\mathfrak{c}}=1$ is the minimum value of the winding number when $\eta=+1$ (just one back and forth trip around $\mathfrak{c}$) while it is $w_{\mathfrak{c}}=0$ when $\eta=-1$ (just one half of $\mathfrak{c}$ is concerned). For these orbits, condition (6) forces $\mathfrak{c}$ to stay near the separatrix $\mathfrak{S}$ defined by $\mathrm{Im}\,p=\pm\sqrt{2V(q)}$ and, thus, $\mathfrak{r}$ must lie in the immediate neighborhood of the equilibrium point $(p,q)=(0,a)$. These orbits will give the dominant contribution because they have the smallest $\mathrm{Im}\,S_{\mathfrak{o}}$ among all the other possible orbits involving repetitions of $\mathfrak{c}$. Indeed, for a fixed T, all the orbits $\mathfrak{o}$ that may contribute semiclassically are such that $\mathrm{Im}\,S_{\mathfrak{o}}=-2\,\mathrm{Im}(T)S_{\mathfrak{c}}/T_{\mathfrak{c}}$ and $S_{\mathfrak{c}}/T_{\mathfrak{c}}$ is a decreasing function of the energy $\tilde{E}\overset{\text{def}}{=}-E$ when $\mathfrak{c}$ is inside the separatrix since

$$\frac{d}{d\tilde{E}}\left(\frac{S_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})}{T_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})}\right)=\frac{d}{d\tilde{E}}\left(\frac{4}{T_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})}\int_0^{q_r(-\tilde{E})}\sqrt{2[\tilde{E}+V(q)]}dq-\tilde{E}\right)$$
$$=-\frac{4}{T_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})^2}\frac{dT_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})}{d\tilde{E}}\int_0^{q_r(E)}|p(q,E)|dq<0. \tag{26}$$

Therefore $\mathrm{Im}\,S_{\mathfrak{o}}$ reaches its minimum when $\tilde{E}$ is at its maximum, that is $E\to 0^+$. The only possible equilibrium point contributing to $\mathrm{tr}(\hat{\mathfrak{S}}\hat{U}(T))$ is the origin $(p_f,q_f)=(-p_i,q_i)=(0,0)$; it is also subdominant because $H(0,0)=V(0)=V_{\max}$ [which can be seen as the limit of $S_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})/T_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})$ when $\tilde{E}\to -V_{\max}$] is strictly larger than $S_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})/T_{\mathfrak{c}}(\tilde{E})$ for $\tilde{E}>-V_{\max}$.

Assuming that only orbits with real q do contribute to $\mathrm{tr}(\hat{\mathfrak{S}}\hat{U}(T))$, we have proven that the dominant contribution is given by the half symmetric orbits $\mathfrak{o}$ at energy E such that $T_{\mathfrak{c}}(E)=-2\mathrm{Im}\,T$ ($w_{\mathfrak{c}}=0$). However, for such an orbit to exist we cannot choose $\mathrm{Re}\,T$ arbitrarily since it must be an integer multiple of $T_{\mathfrak{r}}(E)$. To put it in another way, for a given E, we will choose $T=w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E)-iT_{\mathfrak{c}}(E)/2$ such that an orbit $\mathfrak{o}$ with a real q exists. Condition (6) will be fulfilled if E is sufficiently

small. We must now enumerate all the topological classes concerned by the sum (23): When $\mathfrak{o}$ starts on the upper branch $\mathrm{Im}\, p>0$ of $\mathfrak{c}$, it will reach the turning point $\rho_1=(0,q_r)$ then wind $w_\mathfrak{r}$ times around $\mathfrak{r}$ alternatively crossing $(0,q_r')$ and $(0,q_r)$ before turning back on the lower branch $\mathrm{Im}\, p<0$ of $\mathfrak{c}$. Starting on the lower branch of $\mathfrak{c}$ corresponds to the symmetric trajectory and provide the same contribution with $T_\beta=-iT_\mathfrak{c}/2$. When starting on the upper branch of $\mathfrak{r}$, $\mathfrak{o}$ crosses $\rho_1=(0,q_r')$ first, then reaches $\rho_2=(0,q_r)$. Then it may go on winding r times around $\mathfrak{r}$ then take the lower branch of $\mathfrak{c}$ up to the turning point $(0,-q_r)$, wind $w_\mathfrak{r}-1-r$ times around $\mathfrak{l}$ and eventually join the symmetric of its starting point on the lower branch of $\mathfrak{l}$. There are exactly $w_\mathfrak{r}$ such topological classes because we can take $r=0,\ldots,w_\mathfrak{r}-1$. If we start from the lower branch of $\mathfrak{r}$ or on one of the two branches of $\mathfrak{l}$, we obtain the same contribution and exhaust the possible topological classes. The sum of T_β on all β's and classes is then $2(-iT_\mathfrak{c}/2)+4w_\mathfrak{r}T_\mathfrak{r}/2=2T$ and keeping only the $w_\mathfrak{c}=0$ solutions, the sum (23) reduces to

$$\mathrm{tr}(\hat{\mathsf{S}}\hat{U}(T)) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{2T(-1)^{w_\mathfrak{r}+1}}{\sqrt{2i\pi\hbar}}\sqrt{\frac{dE_\mathfrak{o}}{dT}}e^{iS_\mathfrak{o}/\hbar} \tag{27}$$

with $\mathfrak{o}$ being one half symmetric orbit of energy $E_\mathfrak{o}$ defined implicitly by

$$T=w_\mathfrak{r}T_\mathfrak{r}(E)-iT_\mathfrak{c}(E)/2 \tag{28}$$

with

$$T_\mathfrak{r}(E)=2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)}\frac{dq}{\sqrt{2[E-V(q)]}}, \tag{29a}$$

$$T_\mathfrak{c}(E)=4\int_0^{q_r(E)}\frac{dq}{\sqrt{2[V(q)-E]}}. \tag{29b}$$

We have $S_\mathfrak{o}(E)=w_\mathfrak{r}S_\mathfrak{r}(E)+iS_\mathfrak{c}(E)/2$ with

$$S_\mathfrak{r}(E)+ET_\mathfrak{r}(E)=\tilde{S}_\mathfrak{r}(E)\overset{\mathrm{def}}{=}2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)}\sqrt{2[E-V(q)]}dq, \tag{30a}$$

$$S_\mathfrak{c}(E)-ET_\mathfrak{c}(E)=\tilde{S}_\mathfrak{c}(E)\overset{\mathrm{def}}{=}4\int_0^{q_r(E)}\sqrt{2[V(q)-E]}dq. \tag{30b}$$

The dominant contributions to $\mathrm{tr}(\hat{U}(T))$ comes from the two stable equilibrium points $\mathfrak{e}=(0,\pm a)$ for which $\lambda_\mathfrak{e}=i\omega$. The contribution of (0, 0) is sub-dominant as well as the contribution of any periodic orbit $\mathfrak{o}$ which necessarily turns around about $\mathfrak{e}$ during $\mathrm{Re}\, T$ then follow an orbit $\mathfrak{c}$ near $\mathfrak{S}$ during $-\mathrm{Im}\, T$ before coming back to its initial point. Together with Eq. (6), $\eta=1$, the two stable equilibrium points give two identical contributions (19a) and we have

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(T)) \underset{\hbar\to 0}{\sim} 2e^{-i\omega T/2}, \tag{31}$$

which of course could have been deduced directly from $E_0^\pm\simeq\hbar\omega/2$. Collecting all these results in the right-hand side of Eq. (9), we obtain

$$\begin{aligned}\Delta_0 \underset{\hbar\to 0}{\sim} &\sqrt{\frac{2i\hbar}{\pi}}\left(\frac{dT_\mathfrak{o}}{dE}\right)^{-1/2}\\ &\times\exp\left(-\frac{1}{2\hbar}[\tilde{S}_\mathfrak{c}(E)+(E-\hbar\omega/2)T_\mathfrak{c}(E)]\right)\\ &\times\exp\left(\frac{iw_\mathfrak{r}}{\hbar}[\tilde{S}_\mathfrak{r}(E)-(E-\hbar\omega/2)T_\mathfrak{r}(E)-\hbar\pi]\right).\end{aligned} \tag{32}$$

When $E\to 0^+$, we have the following asymptotic expansions (see Appendix B)

$$\tilde{S}_\mathfrak{c}(E)=\tilde{S}_\mathfrak{c}(0)+\frac{4E}{\omega}\ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega}\right)-\frac{2(2A+1)}{\omega}E+\mathrm{o}(E), \tag{33a}$$

$$\tilde{S}_\mathfrak{r}(E)=\frac{2\pi E}{\omega}+BE^2+\mathrm{o}(E^2), \tag{33b}$$

with

$$A\overset{\mathrm{def}}{=}\int_0^a\left(\frac{\omega}{\sqrt{2V(q)}}-\frac{1}{a-q}\right)dq; \tag{34}$$

$$B\overset{\mathrm{def}}{=}\frac{\pi}{24\omega^7}[5V^{(3)}(a)^2-3\omega^2V^{(4)}(a)] \tag{35}$$

(the superscript in parenthesis indicates the order of the derivative of V). The differentiation of expressions (33) with respect to E leads to the asymptotic expansions for $-T_\mathfrak{c}$ and $T_\mathfrak{r}$. From the first one we can extract the exponential sensitivity of E on $\mathrm{Im}\, T$,

$$E\simeq 2a^2\omega^2e^{2A}e^{\omega\,\mathrm{Im}\,T}. \tag{36}$$

From relation (28) we can see that $2dT_\mathfrak{o}/dE=2w_\mathfrak{r}dT_\mathfrak{r}/dE-idT_\mathfrak{c}/dE$ is dominated by the last term if E is small.

$$\frac{dT_\mathfrak{o}}{dE}\simeq-\frac{i}{2}\frac{dT_\mathfrak{c}}{dE}\simeq\frac{i}{\omega E}. \tag{37}$$

Inserting all these asymptotic expansions in the right hand side of Eq. (32), we get

$$\Delta_0 \underset{\hbar\to 0}{\sim} \sqrt{\frac{4\hbar a^2\omega^3}{\pi}}e^Ae^{E/(\hbar\omega)}e^{-\tilde{S}_\mathfrak{c}(0)/(2\hbar)}\times e^{-iw_\mathfrak{r}BE(E-\hbar\omega)/\hbar}. \tag{38}$$

This expression can be turned into the usual JWKB expansion $\exp(a_0(E)/\hbar+a_1(E)\ln\hbar+a_2(E)+\mathrm{o}(1))$: As soon as we have condition (6), from expression (36) we see that E is exponentially small and we obtain $a_0(0)=-\tilde{S}_\mathfrak{c}(0)/2$ and $a_1(0)=1/2$. To obtain the correct value of a_2, we must pro-

ceed to fine-tune the choice of T. A criterion is to impose on Δ_0 to have a vanishing imaginary part at any order in $\hbar$ consistent with the JWKB expansions used so far. From Eq. (32), we will choose E such that $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)=\hbar\pi$, which is exactly the Einstein-Brillouin-Keller quantization condition for the ground state in one well. This leads to $E=\hbar\omega/2+o(\hbar)$. Then $T_{\mathfrak{c}}=-2\ln(\hbar/(4a^2\omega))/\omega+4A/\omega+o(1)$ and

$$\Delta_0 \underset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi}} e^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(\hbar\omega/2)/(2\hbar)} = 2a\omega\sqrt{\frac{e\hbar\omega}{\pi}} e^{A} e^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(0)/(2\hbar)}, \quad (39)$$

which differs from [[28], Eqs. (1.1) and (1.4)] by a reasonable factor $\sqrt{e}\simeq 1.6$. This discrepancy, already noticed in [[35], Sec. V], which appears in the third order term in the $\hbar$-expansion, comes from the different kind of approximations involved in our approach on the one hand and in Herring's formula on the other hand.

We are also able to obtain a formula for the splitting of the excited states that is consistent with the result given in [[28], Eq. (B1)]. Using a semiclassical approximation for the matrix element of $\hat{\Pi}_n$, we explain in detail in appendix C how to obtain $\Delta_n(T)$. For one dimensional systems whose energy surface E_n is made of two branches (two Riemann sheets in the complex plane), we can insert Eq. (C8) into (C6) and get one of the main result of this paper,

$$\Delta_n(T) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{2T} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}+1} e^{i\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_{\beta},E_n)/\hbar}. \quad (40)$$

To see how formula (40) works in the case of the double-well potential, we choose the quasimode $|\Phi_n\rangle$ localized on the right torus $\mathfrak{r}$ at energy E_n. This torus is made of two branches labeled by the sign of p and we can choose a common base point for these two branches, namely, $b_{\pm}=q_r(E)$. On the symmetric torus $\mathfrak{l}$, the two base points will be $b_{\pm}=-q_r(E)$. Then $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_{\beta},E_n)$ and the index $\mu_{\mathfrak{o}}$ do not depend on the choice of the initial and final branch. The orbits $\mathfrak{o}$ that go from $\mathfrak{r}$ to $\mathfrak{l}$ must correspond to a T of the form

$$T = \tau + w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E_n) - i\left(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1}{2}\right)T_{\mathfrak{c}}(E_n) \quad (41)$$

for non-negative integer $(w_{\mathfrak{c}},w_{\mathfrak{r}})$ and a fraction of time τ strictly smaller that $T_{\mathfrak{c}}(E_n)$ that depends on the initial and final conditions (those are not necessarily symmetric). Then we have

$$\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_{\beta},E_n) = w_{\mathfrak{r}}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n) + i\left(w_{\mathfrak{c}} + \frac{1}{2}\right)\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n) \quad (42)$$

and we take

$$\mu_{\mathfrak{o}} = w_{\mathfrak{r}} + w_{\mathfrak{c}} + 1. \quad (43)$$

For the same reason as previously explained the dominant contributions come from those orbits where $w_{\mathfrak{c}}=0$. In order to mimic a real T, we will choose large winding numbers $w_{\mathfrak{r}}$ such that $\mathrm{Re}\,T=w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E_n)\gg \mathrm{Im}\,T=T_{\mathfrak{c}}(E_n)/2$. Because of the quantization condition in the right well $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)=(n+1/2)2\pi\hbar$, the rapid oscillations $\exp(i\,\mathrm{Re}\,S_{\mathfrak{o}}/\hbar)$ disappear (or inversely if we want to maintain Δ_n real to first order, we recover the usual quantization condition). Then we obtain

$$\Delta_n \underset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{2\hbar}{T_{\mathfrak{r}}(E_n)} e^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/(2\hbar)}. \quad (44)$$

The classical frequency $1/T_{\mathfrak{r}}(E_n)$ attached to $\mathfrak{r}$ is essentially of order $\omega/(2\pi)$. $\Delta_n(T)$ becomes independent of T for large $w_{\mathfrak{r}}$: the behavior of T is mainly governed by $w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}$, then the $1/T$ prefactor in Eq. (40) is compensated by the increasing number of identical terms in the sum since we have seen that the number of topological classes of orbits increases linearly with $4w_{\mathfrak{r}}$ (the factor 4 comes from the two possible initial branches $\beta=\pm$ and the two possible final branches $\beta'=\pm$; in other words from the sequences of $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$ beginning either by q_r or q_r' and ending either by $-q_r$ or $-q_r'$). The discrepancy between (44) and Garg's formula is just the factor g_n given by [[28], Eq. (B2)] (see also [[36], Eq. (3.41)]) that tends to 1 when n increases: $g_0=\sqrt{\pi/e}\simeq 1.075$, $g_1\simeq 1.028,\ldots$ There is also a ratio of order one, more precisely $\sqrt{2/\pi}\simeq 0.8$, between estimations (39) and (44) taken for $n=0$; the second is slightly better and coincides with the formula given in Landau and Lifshitz [[34], Sec. 50, problem 3]. Again, these discrepancies come from the different nature of the approximations that are involved.

Let us end this section by a short comment on the connection with the usual instanton theory where $\mathrm{Re}\,T=0$ and where $\mathrm{Im}\,T\to-\infty$. This regime, that allows to select the ground-state doublet only, is included in our approach because the instanton trajectories appear to be the limit of $\mathfrak{c}$ getting closer to the separatrix $\mathfrak{S}$ whereas the classical real oscillations in the wells shrink to the equilibrium points. All along this paper we emphasize that the phase-space representation is particularly appropriate and it is straightforward to recover the usual picture of instantons [for instance $q(it)$ versus it] from our Fig. 1(d).

V. DYNAMICAL TUNNELLING FOR THE SIMPLE PENDULUM

The simple pendulum corresponds to $V(q)=-\gamma\cos q$ with $\gamma>0$ and strictly periodic boundary conditions that identify $q=-\pi$ and $q=\pi$. At energy $E>\gamma$, the classical rotation with $p=\sqrt{2[E-V(q)]}$ can never switch to the inverse rotation with $-p=-\sqrt{2[E-V(q)]}$. At the quantum level, the Schrödinger's equation for the stationary wave function ϕ

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d^2}{dq^2} - \gamma\cos q\right]\phi(q) = E\phi(q) \quad (45)$$

leads to the Mathieu equation [37],

$$y''(x) + [a - 2g\cos(2x)]y(x) = 0 \quad (46)$$

with $x=q/2$, $y(x)=\phi(2x)$, $a=8E/\hbar^2$ and $g=-4\gamma/\hbar^2$. The 2π periodicity of ϕ forces y to be π periodic. The eigenfunctions can be classified according to the parity operator: Even π-periodic solutions exist only for a countably infinite set of characteristic values of a denoted by $\{a_{2n}\}$ with $n=0,1,\ldots$ Odd solutions correspond to another set, $\{b_{2n}\}$, with $n=1,2\ldots$ (the $\{a_{2n+1},b_{2n+1}\}$ correspond to π-antiperiodic solutions and will be rejected). The discrete energy spectrum

corresponding to even and odd solutions of Eq. (45) is then $\{E_n^+=\hbar^2 a_{2n}/8, n=0,1\ldots\}$ and $\{E_n^-=\hbar^2 b_{2n}/8, n=1,2\ldots\}$ respectively. Any eigenstate $|\phi_n^\pm\rangle$ with energy $E_n^\pm \simeq E_n > \gamma$ has its Husimi distribution spread symmetrically between the two half phase-space of positive and negative p, near the lines $\pm\sqrt{2[E_n - V(q)]}$ that define two disconnected tori in the cylindrical phase-space. If we prepare a wave-packet localized on the line $p=\sqrt{2[E_n-V(q)]}$, since it is no longer a stationary state, its average momentum will oscillate between two opposite values, with a tunneling frequency equal to $\Delta E_n/\hbar$ where

$$\Delta E_n = E_n^+ - E_n^- = \frac{\hbar^2}{8}(a_{2n} - b_{2n}) \tag{47}$$

is the splitting between the two quasidegenerate eigenenergies. To compute ΔE_n, we will use Eq. (10) with the operator $\hat{\Pi}_n$ very much like the exact projector $|\phi_n^+\rangle\langle\phi_n^+| + |\phi_n^-\rangle\langle\phi_n^-|$: Its matrix element $\langle p'|\hat{\Pi}_n|p\rangle$ will vanish rapidly as soon as p or p' lie outside the region of the two tori. The main contribution to the semiclassical expansion of $\mathrm{tr}(\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T))$ will come from classical trajectories that connect two symmetric tori. The trace will be semiclassically computed in the momentum basis and we will choose the complex time path to maintain p real. To construct one trajectory at energy $E>\gamma$ connecting the two tori requires to have purely imaginary q whenever $-p_r<p<p_r$ with $p_r \overset{\text{def}}{=} \sqrt{2(E-\gamma)}$ being the classical turning point in momentum. More precisely, q is given by $\cos q = -1-(p_r^2-p^2)/(2\gamma)$. From Eq. (14a)

$$\frac{dt}{ds} = -\frac{1}{\gamma \sin q}\frac{dp}{ds}, \tag{48}$$

we see immediately that $\sin(q(s))$ and dt/ds will be real when $p(s)>p_r$ or $p(s)<-p_r$ and purely imaginary otherwise. In the latter case, since we keep $p_2(s) \overset{\text{def}}{=} \mathrm{Im}\, p(s)=0$, Eqs. (15b) and (15c) lead to two possible families of solutions (i) $q_1(s) \overset{\text{def}}{=} \mathrm{Re}\, q(s)=0$ and (ii) $q_1(s)=\pm\pi$. Then, with $p_1 \overset{\text{def}}{=} \mathrm{Re}\, p$ and $q_2 \overset{\text{def}}{=} -\mathrm{Im}\, q$, Eqs. (15a) and (15d) become

$$\frac{dp_1}{ds} = \pm\gamma\,\mathrm{sh}\, q_2\left(i\frac{dt}{ds}\right), \tag{49a}$$

$$\frac{dq_2}{ds} = p_1\left(i\frac{dt}{ds}\right), \tag{49b}$$

and are associated with a real time dynamics governed by the Hamiltonian

$$\tilde{H}(p_1,q_2) = p_1^2/2 \mp \gamma\,\mathrm{ch}\, q_2, \tag{50}$$

with "−" corresponding to case (i) and "+" corresponding to case (ii). Then, instantons correspond to trajectories evolving in the transformed potential $\tilde{V}(q) \overset{\text{def}}{=} \mp\gamma\,\mathrm{ch}\, q$ rather than the usual inverted potential $-V(q)$. We will choose a one step complex time path as in Fig. 3 and we will represent the

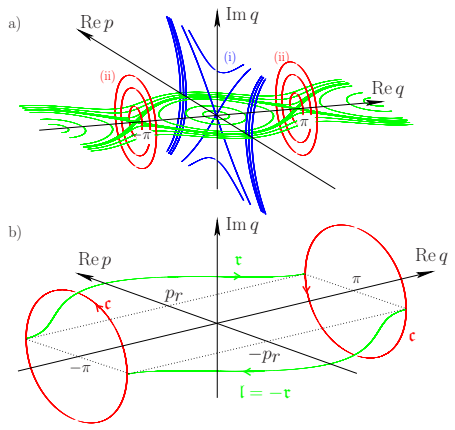


FIG. 4. (Color online) With the choice of a complex-time path given in Eq. (3) (one-step path), the contributions to $\mathrm{tr}(\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T))$ come from one half symmetric periodic orbits o (b) that are a composite of Eq. (1) (repetitions of) a periodic orbit r of period T_r in the phase-space plane $(\mathrm{Re}\, q, \mathrm{Re}\, p)$ at energy $E>\gamma$ (recall that the planes $q=\pm\pi$ are identified); Eq. (2) one half of a periodic orbit c of period T_c in the phase-space plane $(\mathrm{Im}\, q, \mathrm{Re}\, p)$ at energy E.

orbits in a three dimensional space $(\mathrm{Re}\, q, \mathrm{Re}\, q, \mathrm{Im}\, q)$ and the connection between the allowed and the forbidden trajectories occurs on the axes ($\mathrm{Re}\, q=0$, $\mathrm{Im}\, q=0$) and ($\mathrm{Re}\, q=\pm\pi$, $\mathrm{Im}\, q=0$) [Fig. 4(a)]. Trajectories in family (i) escape from the unstable point at $\mathrm{Re}\, p=0$, $\mathrm{Im}\, q=0$ without coming back to the plane $\mathrm{Re}\, p=0$, $\mathrm{Re}\, q=0$. Only orbits in family (ii) can be used to produce periodic orbits. A typical periodic orbit o connecting two symmetric rotations of the pendulum is given in Fig. 4(b)). We will choose $\mathrm{Im}\, T$ to be precisely the half period of the periodic orbit c of family (ii) at energy E_n and $\mathrm{Re}\, T$ to be (an integer multiple of) the period of rotation of the pendulum at the same energy. This choice exhibits the dominant contribution to $\mathrm{tr}(\hat{S}\hat{\Pi}_n\hat{U}(T))$. We can reproduce the same reasoning that led to Eq. (44) with the rôle of p and q being exchanged. Now $T_r = d\tilde{S}_r/dE$ is the typical frequency on the torus at energy E_n.

Keeping only the contributions that provide a positive imaginary part of the action, expression (13) becomes

$$S = \int_{s_i}^{s_f} p_1(s)\frac{dq_1}{ds}(s)ds - E\,\mathrm{Re}\, T + i\left(\int_{s_i}^{s_f} p_1(s)\frac{dq_2}{ds}(s)ds + E(-\mathrm{Im}\, T)\right). \tag{51}$$

Then

$$S_o(E) = \tilde{S}_o(E) - ET_o \tag{52}$$

with $T_o = T$ and

$$\begin{aligned}\tilde{S}_o(E) &= w_\tau \tilde{S}_\tau(E) + i\tilde{S}_c(E)/2 \\ &= 2w_\tau \int_0^\pi \sqrt{2(E+\gamma\cos q)}dq \\ &\quad + 2i\int_0^{\mathrm{argch}(E/\gamma)} \sqrt{2(E-\gamma\,\mathrm{ch}\, q)}dq.\end{aligned} \tag{53}$$

All these expressions can be written in terms of the complete elliptic integrals [38] (defined for $|u|<1$)

$$\mathcal{K}(u) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1-u^2\sin^2 x}}, \tag{54a}$$

$$\mathcal{E}(u) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\pi/2} \sqrt{1-u^2\sin^2 x}\,dx. \tag{54b}$$

Namely,

$$\tilde{S}_\tau(E) = 4\sqrt{2(E+\gamma)}\,\mathcal{E}\left(\sqrt{\frac{2\gamma}{E+\gamma}}\right), \tag{55a}$$

$$\tilde{S}_c(E) = 8\sqrt{2(E+\gamma)}\left[\mathcal{K}\left(\sqrt{\frac{E-\gamma}{E+\gamma}}\right) - \mathcal{E}\left(\sqrt{\frac{E-\gamma}{E+\gamma}}\right)\right]. \tag{55b}$$

Then we obtain

$$\Delta_n \sim \frac{2\hbar}{T_\tau(E_n)} e^{-\tilde{S}_c(E_n)/(2\hbar)} \tag{56}$$

with

$$T_\tau(E) = \frac{d\tilde{S}_\tau}{dE} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{E+\gamma}}\mathcal{K}\left(\sqrt{\frac{2\gamma}{E+\gamma}}\right). \tag{57}$$

The energies of the highly excited states are approximately given by the free rotations: $E_n \simeq n^2\hbar^2/2 \gg \gamma$. Then $T_r(E_n) \simeq 2\pi/(n\hbar)$. The asymptotic expansion of $\tilde{S}_c(E)$ for large E leads to

$$\Delta_n \sim \frac{\hbar^2}{\pi}\frac{\sqrt{2E_n}}{\hbar} e^{2[\ln(\gamma/E_n)+2-3\ln 2]\sqrt{2E_n}/\hbar}, \tag{58a}$$

$$\sim \frac{1}{\pi n^{4n-1}}\left(\frac{e}{2}\right)^{4n}\hbar^2\left(\frac{\gamma}{\hbar^2}\right)^{2n}. \tag{58b}$$

The last expression corresponds exactly to equation (3.44) of [36] obtained with standard uniform semiclassical analysis. We see on Fig. 5 that Eq. (56) is a very good approximation even when the energies E_n get close to γ the energy of the separatrix.

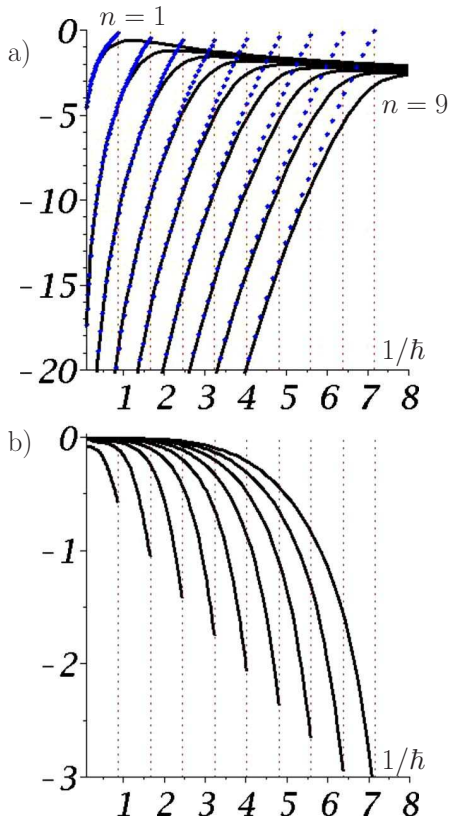


FIG. 5. (Color online) For the pendulum with $\gamma=1$, we have plotted in (a) the exact value of $\ln(\Delta E_n)$ [see Eq. (47)] versus $1/\hbar$ for $n=1,\ldots 9$ (black lines). The dots are given by the semiclassical approximation $\ln(\Delta_n)$ [see Eq. (58b)] up to the maximum value of $1/\hbar$ (vertical dotted lines) where E_n^+ become lower that the separatrix energy γ. The semiclassical limit is obtained when the states become more and more localized in the region of phase space corresponding to rotations: for a fixed n this requires to increase $E_n \simeq n^2\hbar^2/2$ that is to *increase* $\hbar$; or for a fixed energy $E>\gamma$, we must increase $n \propto \sqrt{2E}/\hbar$. To control the validity of the prefactors, we can check in (b) that $\ln(\Delta E_n/\Delta_n)$ approaches zero in the semiclassical limit.

VI. RESONANT TUNNELING AND FABRY-PÉROT EFFECT

We are now ready the see how formula (40) allows us to reproduce the resonant tunnelling between two wells related by parity when the potential in Eq. (1) has also a deeper central well [Fig. 6(a)]. The minimum of the right and left wells is fixed at zero, the minimum of the central well is $V(0)=V_{\min}<0$ and the local maximum between the wells is denoted $V_{\max}$. When $0<E<V_{\max}$, we will denote by $q_r(E) < q_r'(E) < q_r''(E)$ the three positive solutions of $V(q)=E$. As explained in Section IV, we will try to construct appropriate time paths $[t]$ to exhibit complex trajectories o with purely real q that connect the two symmetric tori from r to l at some energy $0<E<V_{\max}$. These tori are delimited by the two turning points $\pm\rho'=(0,\pm q_r')$ and $\pm\rho''=(0,\pm q_r'')$. What is new of course is the existence of a central real torus m delimited by $\rho=(0,q_r)$ and $-\rho$. Using the three dimensional. representation of the section $\mathrm{Im}\,q=0$ of phase space [Fig. 6(c) and 6(e)], we see that the orbits o must be a series of concatenation of five trajectories connecting at the turning points $\pm\rho, \pm\rho'$. First we start with one portion living on r with $dt/ds>0$ and $\mathrm{Im}\,p=0$, then connect at ρ' to a trajectory with $\mathrm{Re}\,p=0$ where $\mathrm{i}dt/ds>0$. It follows the energy curve c whose equation is $(\mathrm{Im}\,p)^2/2-V(q)=-E$. Then o can connect at ρ to a real trajectory on m with $\mathrm{Im}\,p=0$ and $dt/ds>0$, then can cross $-c$ from $-\rho$ to $-\rho'$ before reaching $l=-r$. The corresponding time path will necessary have at least two steps [Fig. 6(d)] each of them having a height which is a half-integer multiple of T_c, the real period of the primitive periodic orbit c. Among all the possible $\mathfrak{o}$'s, we will keep only the exponentially dominant contributions, when $\mathfrak{o}$ remains as shortly as possible with complex p. Then, for such

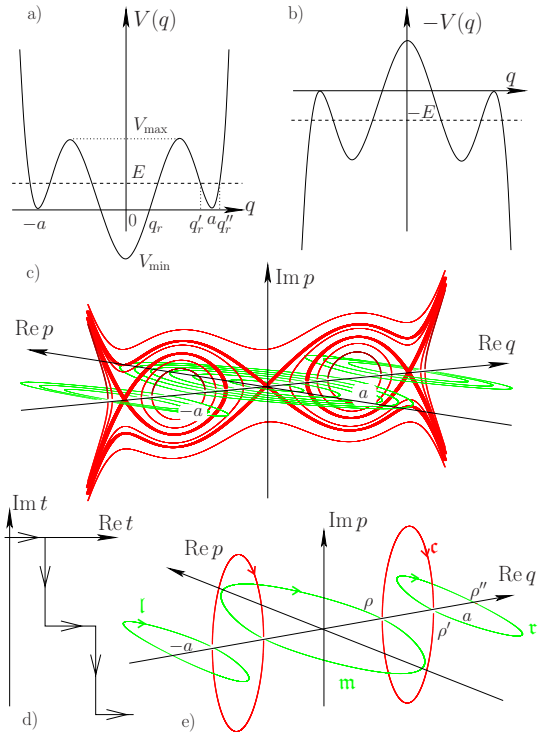


FIG. 6. (Color online) To describe resonant tunnelling between two symmetric wells centered at $\pm a$ and separated by a third central well (a), we use orbits made of five primitive trajectories with a time path given in (d). We still maintain the position q to be real and can use a three dimensional section of phase-space (see text). Here we have chosen V given by Eq. (65) with $a=7/4$ and $b=1/2$.

orbits to exist, we must choose T of the form

$$T=\tau+w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E)+\left(w_{\mathfrak{m}}+\frac{1}{2}\right)T_{\mathfrak{m}}(E)-iT_{\mathfrak{c}}(E) \tag{59}$$

involving the periods of the primitive orbits and the corresponding winding numbers $w_{\mathfrak{r}}$, $w_{\mathfrak{m}}$ which are non-negative integers. τ denotes a positive fraction of time smaller than $T_{\mathfrak{r}}(E)$. The base points for the two branches $\beta=\pm$ defined by $\mathrm{Re}\,p\gtrless 0$ on $\mathfrak{r}$ coincide with the turning point $b_{\pm}=q_r'$, the action $\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_{\beta},E_n)$ and the index $\mu_{\mathfrak{o}}$ are independent of the choice of the branch where $\mathfrak{o}$ starts,

$$\tilde{S}_{\mathfrak{o}}(b_{\beta'},b_{\beta},E_n)=w_{\mathfrak{r}}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)+\left(w_{\mathfrak{m}}+\frac{1}{2}\right)\tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E)+i\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E), \tag{60}$$

$$\mu_{\mathfrak{o}}=w_{\mathfrak{r}}+w_{\mathfrak{m}}+3. \tag{61}$$

Explicitly, we have

$$\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E)\overset{\text{def}}{=}2\int_{q_r'(E)}^{q_r''(E)}\sqrt{2[E-V(q)]}dq, \tag{62a}$$

$$\tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E)\overset{\text{def}}{=}4\int_{0}^{q_r(E)}\sqrt{2[E-V(q)]}dq, \tag{62b}$$

$$\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)\overset{\text{def}}{=}2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)}\sqrt{2[V(q)-E]}dq; \tag{62c}$$

and the corresponding periods $T_{\mathfrak{r}}$, $T_{\mathfrak{m}}$, $T_{\mathfrak{c}}$ are obtained by deriving with respect to E.

As we have seen, formula (40) will provide an approximation of the exact splitting ΔE_n that becomes better, the better the condition $\mathrm{Re}\,T(E_n)\gg\mathrm{Im}\,T(E_n)$ is satisfied. Not only this condition render the precise value of τ irrelevant, it also requires large $w_{\mathfrak{m}}$ and/or $w_{\mathfrak{r}}$, especially if we work with $E_n\gtrsim 0$ for which $T_{\mathfrak{c}}(E_n)\gg T_{\mathfrak{m}}(E)$ and $T_{\mathfrak{c}}(E_n)\gg T_{\mathfrak{r}}(E)$. For a given pair of $w_{\mathfrak{r}}$ and $w_{\mathfrak{m}}$, there are $4(w_{\mathfrak{r}}+1)$ topological classes of orbits corresponding to two possible initial branches, two possible final branches and $r=0,\ldots,w_{\mathfrak{r}}$ possible windings on $\mathfrak{r}$ for $w_{\mathfrak{r}}-r$ windings on $\mathfrak{l}$. Then all different $w_{\mathfrak{r}}$ and $w_{\mathfrak{m}}$, such that Eq. (59) holds, give a contribution to Eq. (40): If we define $R(T)\overset{\text{def}}{=}\mathrm{Re}\,T-\tau-T_{\mathfrak{m}}/2\simeq\mathrm{Re}\,T$ then,

$$\Delta_n(T)\underset{\hbar\to 0}{\sim}\frac{2\hbar}{T}e^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar}\times\sum_{\substack{\{w_{\mathfrak{r}},w_{\mathfrak{m}}\}\text{ pos. int. such that}\\ w_{\mathfrak{r}}T_{\mathfrak{r}}(E_n)+w_{\mathfrak{m}}T_{\mathfrak{m}}(E_n)=R(T)}}(w_{\mathfrak{r}}+1)\times e^{iw_{\mathfrak{r}}[\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)/\hbar-\pi]+iw_{\mathfrak{m}}[\tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E_n)/\hbar-\pi]}. \tag{63}$$

We immediately see the resonance at work since the sum reaches a maximum when both $\nu_{\mathfrak{r}}\overset{\text{def}}{=}\tilde{S}_{\mathfrak{r}}(E_n)/(2\pi\hbar)-1/2$ and $\nu_{\mathfrak{m}}\overset{\text{def}}{=}\tilde{S}_{\mathfrak{m}}(E_n)/(2\pi\hbar)-1/2$ are integers: the energy of a state mainly localized in the central well becomes nearly degenerate (up to $\hbar^2$ terms) with the energy doublet in the lateral wells. Then the contributions of the repetitions of $\mathfrak{m}$ interfere constructively like the optical rays in a Fabry-Pérot interferometer [[21], Secs. 12.14–12.17. To estimate the sum in the right hand side of Eq. (63), let us take a rational approximation of the ratio $T_{\mathfrak{m}}/T_{\mathfrak{r}}$, namely,

$$\frac{T_{\mathfrak{m}}}{T_{\mathfrak{r}}}\simeq\frac{m}{r} \tag{64}$$

with m and r being coprimes positive integers. For the polynomial potential

$$V(q)=(q^2-a^2)^2(q^2-b^2) \tag{65}$$

with $a>b>0$, the argument presented in [39] can be generalized to show that Eq. (64) is actually exact with $r=1$ and $m=2$ for any energy $0<E<V_{\max}$. If K denotes the integer part of $R(T)/(rT_{\mathfrak{m}})$, we can compute and approximate for $K\gg 1$ the right-hand side of Eq. (63) and obtain

$$|\Delta_n(T)|\underset{\hbar\to 0}{\sim}\frac{\hbar}{T_{\mathfrak{r}}}\frac{e^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar}}{|\sin(\pi(m\nu_{\mathfrak{r}}-r\nu_{\mathfrak{m}}))|}. \tag{66}$$

Figure 7 shows that this latter expression provides a good approximation for ΔE_n even in the immediate neighborhood of a resonance where estimation (10) is not justified any more. If we had continued working with a finite K, the sum

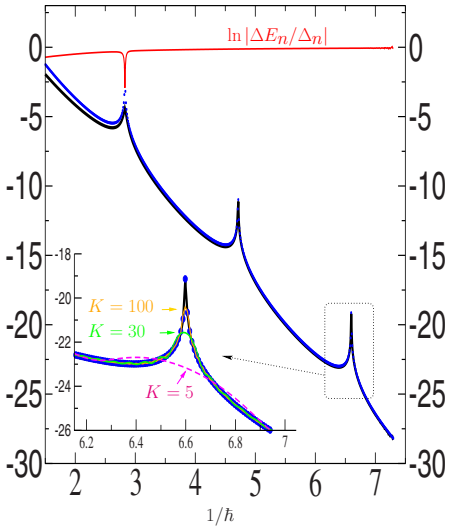


FIG. 7. (Color online) For V given by Eq. (65) with $a=7/4$ and $b=1/2$, we plot $\ln|\Delta E_n|$ (thick black line) for the lowest doublet in the symmetric wells $E_n^{\pm}\simeq\hbar\omega/2$ with $\omega=2a\sqrt{2(a^2-b^2)}\simeq 6.30$. The (blue) dots correspond to estimation (A13) with $T=|T|e^{-i\theta}=(K+1/2)T_{\mathfrak{m}}(E_n)-\mathrm{i}T_{\mathfrak{c}}(E_n)$ in the limit $K\to\infty(\theta\to 0)$. The upper thin (red) curve provides $\ln|\Delta E_n/\Delta_n|$. The inset provides a magnification of the third spike around $1/\hbar=6.6$ for which $T_{\mathfrak{m}}(E_n)=2T_{\mathfrak{r}}(E_n)\simeq 1.58$ and $T_{\mathfrak{c}}(E_n)\simeq 1.50$. Here, we have also plotted $\ln|\Delta_n(T)|$ for $K=100$ [thin orange (light gray), $\theta\simeq 0.01$] $K=30$ (thin green $\theta\simeq 0.03$), $K=5$ (dashed thin magenta $\theta\simeq 0.17$).

(63) would have involved a finite number of terms and the singularities due to the vanishing denominators in Eq. (66) would have been smoothed down (inset in Fig. 7). In other words, for a fixed $|T|$, rotating down T in the lower half plane $\mathrm{Im}\,T<0$, destroys very quickly ($\theta\simeq 0.2$) the large resonant fluctuations of tunneling. This effect has already been shown in the case of a kicked system [29].

VII. ESCAPE RATES

So far we have focused our analysis of tunneling in bounded systems only, but the philosophy we presented here can be extended to more general situations. For instance, let us show how we can compute the escape rate from a metastable state localized in a confining potential V whose shape has the form given in Fig. 8(a). The potential has a local minimum at $q=0$ (say $V_{\min}=0$) and an energy barrier for $0<q<q_{\max}$ whose height is $V_{\max}$. For $q>q_{\max}$, the potential remains non-positive and therefore in real phase-space $(\mathrm{Re}\,p,\mathrm{Re}\,q)$, V defines around the origin an island of stability made of tori with positive energy. One state whose Husimi distribution is initially localized in the island, say a quasimode $|\Phi_n\rangle$ at energy $0<E_n<V_{\max}$, will progressively decay outside the well. The decay rate Γ_n is then defined from the overlap:

$$\langle\Phi_n|\hat{U}(T)|\Phi_n\rangle=e^{-\Gamma_n T/2-iE_nT/\hbar}. \tag{67}$$

If we choose a complex T such that

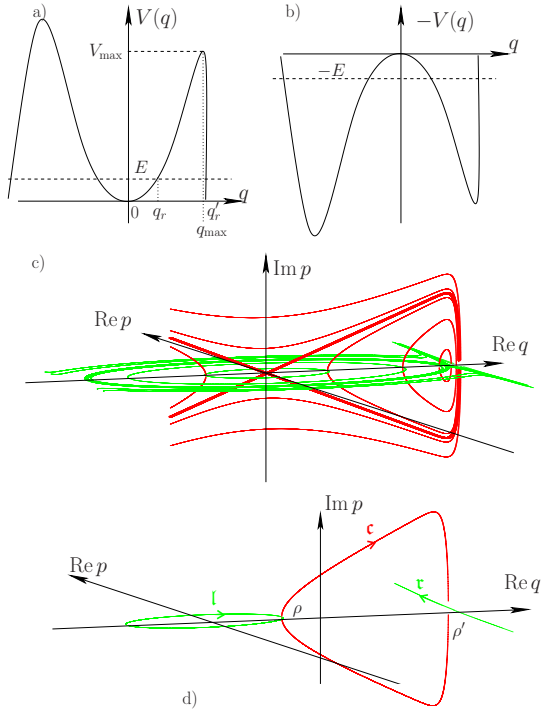


FIG. 8. (Color online) The escape rate at energy E from an island created by a confining potential V whose shape is shown in (a) can be semiclassically computed in terms of complex classical orbits where one canonical coordinate, say q, is kept real. In phase-space, this trajectory appears to be a concatenation of two types of curves that join on the $(\mathrm{Re}\,q)$-axis: (1) a trajectory that lies in the phase-space plane $(\mathrm{Re}\,q,\mathrm{Re}\,p)$ with real variations of t at energy E with the potential V and (2) a trajectory that lies in the phase-space plane $(\mathrm{Re}\,q,\mathrm{Im}\,p)$ with imaginary variations of t at energy $-E$ with the potential $-V$ shown in (b). In (c) a family of constant energy curves is shown (horizontal green for the first type, vertical red for the second type). In (d) for a given energy, we show how three curves $\mathfrak{l},\mathfrak{c},\mathfrak{r}$ glue together at the turning points.

$$|\Gamma_n T|\ll 1, \tag{68}$$

then we obtain a trace formula for Γ_n with the help of the projector-like operator $\hat{\Pi}_n$

$$\Gamma_n\simeq-\frac{2}{\mathrm{Im}\,T}\,\mathrm{Im}(e^{iE_nT/\hbar}\mathrm{tr}(\hat{\Pi}_n\hat{U}(T))) \tag{69}$$

which allows an explicit semiclassical expansion in terms of classical solutions with a complex time path. The dominant contributions will be provided by periodic orbits in time T with real q starting on the torus at energy E_n, then, while $idt/\mathfrak{s}>0$, going forth outside the well before coming back to its initial starting point [Fig. 8(c) and 8(d)]. Then, up to a dimensionless factor f_n of order one, we get

$$\Gamma_n\simeq\frac{f_n}{T_{\mathfrak{c}}(E_n)}e^{-\tilde{S}_{\mathfrak{c}}(E_n)/\hbar} \tag{70}$$

with

$$\widetilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) \overset{\text{def}}{=} 2\int_{q_r(E)}^{q_r'(E)} \sqrt{2[V(q)-E]}dq, \tag{71}$$

where $0<q_r(E)<q_r'(E)$ are the two right turning points at energy E. Here we have supposed that the action between the two left turning points is larger than Eq. (71) and gives a subdominant contribution. If the potential is symmetric, two symmetric complex orbits would contribute with the same weight and therefore the escape rate should twice as large. In the case of an island with sharp boundaries around $q_{\max}$, $\widetilde{S}_{\mathfrak{c}}(E)$, which is the area enclosed by the primitive orbit $\mathfrak{c}$ [Fig. 8(d)] is mainly given by the portion of $\mathfrak{c}$ where we can keep an harmonic approximation for the potential: $V(q) \sim \omega^2 q^2/2$, $q_r(E) \simeq \sqrt{2E/\omega}$, $q_r'(E) \simeq \sqrt{A/(\pi\omega)}$, where A is the area of the island in the real phase space. Then, with $a \overset{\text{def}}{=} \omega A/(2\pi E)$, we have

$$\widetilde{S}_{\mathfrak{c}}(E) \simeq \frac{2E}{\omega}[\sqrt{a}\sqrt{a-1} - \ln(\sqrt{a}+\sqrt{a-1})]. \tag{72}$$

Inserting this expression in Eq. (69) with $E_n \simeq (n+1/2)\hbar\omega$, we exactly recover the expression (5) used in [40] with an elegant and simple interpretation. The chaotic sea that surrounds the integrable island in the mixed system considered by Bäcker *et al.* acts as a sharp effective potential barrier as the one draw in picture 8; our complex trajectory that allows to escape from the regular region has its main features governed by the integrable (and even harmonic) approximation of the dynamics about the island, following precisely the general philosophy of [40,41]. This computation of the "direct" tunnelling (by opposition to resonant tunneling where the model of a pure quadratic kinetic energy fails) can also be reproduced within the standard one-dimensional JWKB theory used for computing transmission coefficients.

Here again, we can check easily that the traditional instanton method is included in our approach: The regime $\Re T \to 0$ selects the instanton solution and provides the escape rate from the equilibrium point as given by Eq. (2.47) of [[2], Chap. 7].

VIII. CONCLUSIONS

The explicit semiclassical expansions of trace formulas for tunneling splittings (or escape rates) in terms of classical orbits constructed with complex-time paths provide an interesting alternative approach to Herring formulae essentially because they do not require to analytically continue the wave functions in the complex plane. In multidimensional tunnelling and/or for a nonautonomous Hamiltonian system, the generic lack of constants of motion isolates the stable islands (if any) from each other by chaotic seas. The analytic continuation of the KAM tori that build the islands is prevented by the existence of natural boundaries (see for instance the recent discussion in [[31], Part II, Appendix B and references therein). The approach we have presented here seems to circumvent these difficulties but, of course, the problem of how to select, with an appropriate $[t]$, the relevant trajectories among an a priori exponentially growing number of classical complex solutions remains open. We expect the tunneling splittings between two states at energy around E localized in two symmetric islands to be approximated by the expansion of the form

$$\left| \frac{f\hbar}{T} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} e^{i\Sigma_{i=1}^N w_i[\widetilde{S}_i(E_n)/\hbar-\pi]} e^{-\Sigma_{j=1}^M w_j'[\widetilde{S}_j'(E_n)/\hbar]} \right|, \tag{73}$$

where the sum runs over all possible sequences of turning points $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$ at energy E such that we can choose a complex-time path that leads to a trajectory, made of primitive orbits, that connects in time T the two (real) tori. The winding $\{w_i\}$ and the actions $\{S_i\}$ (respectively, $\{w_j'\}$ and $\{\widetilde{S}_j'\}$) refer to the primitive orbits obtained when the variations dt/ds are purely real respectively, purely imaginary). For dimensions larger that one, the dimensionless prefactor f may appear as a power law in $\hbar$. Here, inspired by the study in Sec. VI, we can qualitatively see how the constructive interferences between repeated paths emerge in a speckle-like forest because of the presence of resonances. As shown in [29], a progressive complex rotation of time provides a natural way to select the main resonance effects. If we want to expand the splittings (or the escape rates) according to elementary process as proposed in [41], our approach offers a promising tool to interpret and compute semiclassically all of the ingredients of such an expansion.

ACKNOWLEDGMENTS

We have received a lot of benefits from discussions with Olivier Brodier, Dominique Delande, Akira Shudo, Denis Ullmo, and Jean Zinn-Justin, with special thanks to Stephen Creagh, who has had a good intuition about these issues for a long time and has shared his insights with us. We acknowledge Stam Nicolis for his careful reading of the manuscript and Olivier Thibault for his efficient skills in terms of computer maintenance. One of us (A.M.) is grateful to the Laboratoire Kastler Brossel for its hospitality.

APPENDIX A

In this appendix, we derive the dominant contributions (19a) and (19b) to the traces involved in Eq. (9). Both cases $\mathrm{tr}(\hat{U}(T))$ and $\mathrm{tr}(\hat{\mathbf{S}}\hat{U}(T))$ will be treated simultaneously by defining the sign η to be $+1$ in the first case and -1 in the second case. The semiclassical arguments underpinning the derivation are relatively standard and may be found in one way or another in the literature. For instance, the contribution (A13) for $\eta=1$ can be found in [[42], Eq. (2.12)]; within a more restricted context (see also [[43], Chap. 8]). Nevertheless we found it useful to provide all the steps in the precise context of this work, not only to render the presentation self-contained, but also because we are working in the time domain with general Hamiltonians that have not necessarily the form (1).

Given a $[t]$, for any classical phase-space path $\mathfrak{o}$, we can consider the final coordinates (p_f,q_f) at time $t(s_f)=T$ as smooth functions of the initial coordinates (p_i,q_i) at time $t(s_i)=0$. The monodromy matrix $M_{\mathfrak{o}}$ is defined as the differ-

ential of these functions: to first order, an initial small perturbation implies the final perturbation

$$\begin{pmatrix} \delta p_f \\ \delta q_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{\mathfrak{o},11} & M_{\mathfrak{o},12} \\ M_{\mathfrak{o},21} & M_{\mathfrak{o},22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta p_i \\ \delta q_i \end{pmatrix}. \tag{A1}$$

The submatrices can be expressed from the second derivatives of $S_{\mathfrak{o}}(q_f,q_i;T)$ by differentiating equations (18),

$$M_{\mathfrak{o},11} = -\partial^2_{q_f q_f} S_{\mathfrak{o}} (\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})^{-1}, \tag{A2a}$$

$$M_{\mathfrak{o},12} = \partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}} - \partial^2_{q_f q_f} S_{\mathfrak{o}} (\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})^{-1} \partial^2_{q_i q_i} S_{\mathfrak{o}}, \tag{A2b}$$

$$M_{\mathfrak{o},21} = -(\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})^{-1}, \tag{A2c}$$

$$M_{\mathfrak{o},22} = -(\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}})^{-1} \partial^2_{q_i q_i} S_{\mathfrak{o}}, \tag{A2d}$$

provided that $\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}}$ is invertible. Equations (A2a), (A2c), and (A2d) can be inverted in

$$\partial^2_{q_f q_i} S_{\mathfrak{o}} = -(M_{\mathfrak{o},21})^{-1}, \tag{A3a}$$

$$\partial^2_{q_i q_i} S_{\mathfrak{o}} = (M_{\mathfrak{o},21})^{-1} M_{\mathfrak{o},22}, \tag{A3b}$$

$$\partial^2_{q_f q_f} S_{\mathfrak{o}} = M_{\mathfrak{o},11} (M_{\mathfrak{o},21})^{-1}, \tag{A3c}$$

while Eq. (A2b) provides

$$M_{\mathfrak{o},12} = -(M_{\mathfrak{o},21})^{-1} + M_{\mathfrak{o},11} (M_{\mathfrak{o},21})^{-1} M_{\mathfrak{o},22}, \tag{A4}$$

which is nothing but the expression that $\det M_{\mathfrak{o}} = 1$ once we use the identity

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det(CAC^{-1}D - CB), \tag{A5}$$

where (A,B,C,D) are square matrices of the same size and C is invertible.

Coming back to the oscillating integral (17), if the integration path can be deformed in order to pass through an isolated critical point q_c of $q \mapsto S_{\mathfrak{o}}(\eta q,q,T)$, we will have a contribution of the form

$$\frac{\sqrt{\det\left(\dfrac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}\right)}}{\sqrt{\det\left(-\dfrac{\partial^2 (S_{\mathfrak{o}}(\eta q,q;T))}{\partial q \partial q}\right)}} e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar}, \tag{A6}$$

where all the functions are evaluated at $(\eta q_c, q_c, T)$. Physically q_c is interpreted as the initial position of the phase space paths $\mathfrak{o}$ such that $(p_f,q_f) = (\eta p_i, \eta q_i)$. With the help of Eq. (A3), the prefactor of the exponential can be written as $[\det(M_{\mathfrak{o},22} + M_{\mathfrak{o},21} M_{\mathfrak{o},11} (M_{\mathfrak{o},21})^{-1} - 2\eta)]^{-1/2}$ up to a global sign. Using Eq. (A5) again, the contribution (A6) can be written as

$$\frac{(-1)^{\nu_{\mathfrak{o}}}}{\sqrt{(-\eta)^{\mathrm{D}} \det(1 - \eta M_{\mathfrak{o}})}} e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar}, \tag{A7}$$

where $(-1)^{\nu_{\mathfrak{o}}}$ fixes the sign of the square root and D demotes the number of degrees of freedom. Recall that in the definition of the path-integrals (12), a time-slice τ is always implicit. Let us keep for a moment an explicit discretization, for instance with T being an integer multiple of τ, $\mathfrak{o}$ referring to a discrete set of points, Hamilton's equations (14) being discretized into a phase-space map, path integral (13) being turned into a discrete (Riemann) sum, etc. Then, the contribution of each of the points of a given $\mathfrak{o}$, such that $(p_f,q_f) = (\eta p_i, \eta q_i)$, is the same and remains given by Eq. (A7); but this is correct only if, for a given τ, $\hbar$ is small enough, because when performing the steepest-descent method on Eq. (17), one must be able to split the oscillating integral into separate contributions coming from two distinct points of $\mathfrak{o}$. In the continuous time limit, i.e., when the limit $\tau \to 0$ is taken before the semiclassical limit $\hbar \to 0$ (see [50]), the orbits $\mathfrak{o}$ of non-zero-length appear as a one-dimensional continuum none of whose points can be considered separately anymore. The only isolated critical points q_c are given by the position of some equilibrium points. Under the symmetric condition $(q_i,p_i) = (-p_i,-q_i)$, only the origin must be examined. Linearizing the Hamiltonian flow about a nondegenerated fixed point $\mathfrak{e} = (p_e,q_e)$ leads to a monodromy matrix whose eigenvalues can be collected by pairs $\exp(\pm \lambda_{\mathfrak{e},\alpha} T)$ where $\{\lambda_{\mathfrak{e},\alpha}\}_{\alpha=1,\ldots \mathrm{D}}$ are the Lyapunov exponents. Then Eq. (A7) becomes

$$\frac{(-1)^{\nu_{\mathfrak{e}}} e^{-iH(p_e,q_e)T/\hbar}}{\prod_{\alpha=1}^{\mathrm{D}} (e^{\lambda_{\mathfrak{e},\alpha} T/2} - \eta e^{-\lambda_{\mathfrak{e},\alpha} T/2})} \tag{A8}$$

with a possible adjustment of the sign. For a generic choice of T, the denominator does not vanish.

For a non-zero-length path $\mathfrak{o}$, the critical q's are degenerate along the trajectory; for a system with several degrees of freedom, one must treat separately the (Gaussian) integrals on the transverse coordinates $q_\perp$ along which $S_{\mathfrak{o}}(\eta q,q,T)$ varies (quadratically) from the longitudinal coordinates $q_\parallel$ along which $S_{\mathfrak{o}}(\eta q,q,T)$ is constant. Of course, the dimensions of $q_\perp$ and $q_\parallel$ depend crucially on the presence of KAM tori. However, multidimensional tunnelling is beyond the scope of this paper and, the quantitative studies presented here concern one-dimensional systems only. The contribution to the trace of such a path is then, up to a global sign,

$$\frac{e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar}}{\sqrt{-2i\pi\hbar}} \int dq \sqrt{\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}}\Bigg|_{(\eta q,q;T)}. \tag{A9}$$

The conservation of energy along $\mathfrak{o}$, $H(p,q) = E$, implicitly defines a function $p(q,E)$ in the neighborhood of any point where $\partial_p H \neq 0$. Globally along the trajectory $\mathfrak{o}$, we may encounter several possible branches $p_\beta(q,E)$ for the graph of these functions [the two possible signs of a square root when the Hamiltonian has the form (1)] which become singular but pairwise connect smoothly at the turning points, defined by $\partial_p H = 0$. A relation between E, T, q_f, and q_i can be obtained by integrating $\int_{s_i}^{s_f} (dt/ds) ds$ and using Eq. (14b),

$$T = T_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i; E) \overset{\text{def}}{=} \int_{s_i}^{s_f} \frac{dq/ds}{\partial_p H(p(q(s),E),q(s))} ds. \quad \text{(A10)}$$

Everywhere but at the turning points, the value of s dictates the choice of the branch used for the integrand. This relation implicitly defines $E_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i; T)$. The usual expression for the derivative of implicit functions leads to the relations: $\partial_E p = 1/\partial_p H$ and $\partial_{q_i} E_{\mathfrak{o}} = -\partial_{q_i} T_{\mathfrak{o}}/\partial_E T_{\mathfrak{o}} = \partial_T E_{\mathfrak{o}}/\partial_p H(p_i, q_i)$. If we differentiate (18b) with respect to q_i when p_f is given by $p(q_f, E_{\mathfrak{o}}(q_f, q_i, T))$, we obtain

$$\left.\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{o}}}{\partial q_i \partial q_f}\right|_{(q_f,q_i;T)} = \frac{1}{\partial_p H(p_f, q_f)} \frac{1}{\partial_p H(p_i, q_i)} \left.\frac{\partial E_{\mathfrak{o}}}{\partial T}\right|_{(q_f,q_i;T)}. \quad \text{(A11)}$$

With property (3), we get $\partial_p H(\eta p, \eta q) = \eta \partial_p H(p, q)$ and then, by differentiating Eq. (A10), we have $\partial_q(T_{\mathfrak{o}}(\eta q, q, E)) = 0$. Therefore, the energy $E_{\mathfrak{o}}$ of the path $\mathfrak{o}$ depends only on T, not on its starting point q. The square root of $\partial_T E_{\mathfrak{o}}(\eta q, q, T) = dE_{\mathfrak{o}}/dT$ can be got out from the integral in Eq. (A9). When adding the contribution of each path whose starting point lie on the branch β, we obtain

$$T_\beta(E) \overset{\text{def}}{=} \int \frac{dq}{\partial_p H(p_\beta(q,E), q)}. \quad \text{(A12)}$$

This is not exactly the right-hand side of Eq. (A10) because the domain of integration in Eq. (A12) is the domain of the branch where the starting point of $\mathfrak{o}$ lives. Each branch β is delimited by two turning points and T_β is the time spent to go from one point to the other.

The integral (A9) involves all the possible starting points for a trajectory $\mathfrak{o}$ and therefore we must add all the branches that patchwork smoothly in phase-space to form the geometrical set of points crossed by $\mathfrak{o}$. Referring to the purely geometrical quantities (i.e., independent of the choice of the parametrization), we have the contribution

$$(-1)^{\mu_{\mathfrak{o}}} \frac{\left(\sum_\beta T_\beta\right)}{\sqrt{-2\eta i \pi \hbar}} \sqrt{\frac{dE_{\mathfrak{o}}}{dT}} e^{iS_{\mathfrak{o}}/\hbar} \quad \text{(A13)}$$

only if $T_{\mathfrak{o}} = T$; for $\eta = +1$ the path $\mathfrak{o}$ is a periodic orbit and, for $\eta = -1$, the path $\mathfrak{o}$ is half a symmetric periodic orbit (the whole periodic orbit being of period equal to $2T$). The sum concerns all the geometrical branches β crossed by $\mathfrak{o}$ (even if $\mathfrak{o}$ passes several times by the same points, each branch is only counted once). As before, the conversion of a product of two square roots of complex numbers to the square root of the product may introduce a sign that can be absorbed in the definition of $\mu_{\mathfrak{o}}$; the exact computation of the index $\mu_{\mathfrak{o}}$ is difficult but since it may change at the bifurcation points only, where the semiclassical approximation fails, it is sufficient to know that it depends on the nature and the number of the turning points encountered on $\mathfrak{o}$. Therefore it is an additive quantity when several primitive orbits are repeated or concatenated together.

APPENDIX B

In this appendix we explain how to obtain the asymptotic expansions (33) as $E \to 0^+$.

First consider $\tilde{S}_{\mathfrak{r}}$ and split it in two parts $\tilde{S}_+ + \tilde{S}_-$ where

$$\tilde{S}_+ \overset{\text{def}}{=} \int_a^{q_r'(E)} 2\sqrt{2[E - V(q)]} dq, \quad \text{(B1a)}$$

$$\tilde{S}_- \overset{\text{def}}{=} \int_{q_r(E)}^{a} 2\sqrt{2[E - V(q)]} dq. \quad \text{(B1b)}$$

Setting $\epsilon \overset{\text{def}}{=} a - q_r(E)$, rewrite $\tilde{S}_-$ as

$$\tilde{S}_- = 2\sqrt{2}\epsilon \int_0^1 \sqrt{V(a-\epsilon) - V(a - s\epsilon)} ds, \quad \text{(B2)}$$

Now expand the integrand as a power series in ϵ up to the fourth order, compute the integrals that appear in each coefficient and insert the expansion of ϵ in E obtained from the implicit equation $V(a-\epsilon) = E$,

$$\epsilon = \frac{\sqrt{2}}{\omega}\sqrt{E} + \frac{V^{(3)}(a)}{3\omega^4} E - \frac{\sqrt{2}[3\omega^2 V^{(4)}(a) - 5(V^{(3)}(a))^2]}{36\omega^7} E^{3/2} + \mathrm{O}(E^2). \quad \text{(B3)}$$

Proceed in an analogous way for the computation of the first three terms of the asymptotic expansion in $\sqrt{E}$ for $\tilde{S}_+$. When summing S_+ and S_-, expression Eq. (33b) is obtained with Eq. (35).

The expansion of $\tilde{S}_{\mathfrak{c}}$ is more subtle since it is not differentiable at $E=0$. Its derivative is given by

$$\frac{d\tilde{S}_{\mathfrak{c}}}{dE} = -\int_\epsilon^a L(s, \epsilon) ds, \quad \text{(B4)}$$

where we denote $\epsilon \overset{\text{def}}{=} a - q_r(E)$ and define

$$L(s, \epsilon) \overset{\text{def}}{=} \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{V(a-s) - V(a-\epsilon)}}. \quad \text{(B5)}$$

The function $L(s, \epsilon)$ is not continuous but we can extract the discontinuous part from

$$L(s, \epsilon) = \frac{4}{\omega\sqrt{s^2 - \epsilon^2}} \left(1 + \sum_{n \geqslant 3} \frac{(-1)^n 2V^{(n)}(a)}{n!} \frac{s^n - \epsilon^n}{s^2 - \epsilon^2}\right)^{-1/2} \quad \text{(B6)}$$

by expanding the last factor,

$$L(s, \epsilon) = \frac{4}{\omega\sqrt{s^2 - \epsilon^2}} + \frac{2V^{(3)}(a)}{3\omega^3} \frac{s^3 - \epsilon^3}{(s^2 - \epsilon^2)^{3/2}} + M(s, \epsilon), \quad \text{(B7)}$$

where now $M(s, \epsilon)$ is a continuous function of its two variables. Then, a standard theorem in analysis assures that $\epsilon \mapsto \int_\epsilon^a M(s, \epsilon) ds$ is continuous and its limit when $\epsilon \to 0$ is

$$\int_0^a M(s,0)ds = \int_0^a \left(L(s,0) - \frac{4}{\omega s} - \frac{2V^{(3)}(a)}{3\omega^3} \right) ds$$
$$= \frac{4A}{\omega} - \frac{2aV^{(3)}(a)}{3\omega^3} \tag{B8}$$

with A given by Eq. (34). The two other integrals obtained by inserting Eq. (B7) in the right-hand side of Eq. (B4) can be computed exactly and expanded as $\epsilon \to 0^+$ up to order o(1). Then, inserting Eq. (B3), we obtain

$$\frac{d\tilde{S}_c}{dE} = \frac{4}{\omega} \ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{2a\omega} \right) - \frac{4A}{\omega} + o(1). \tag{B9}$$

Its integration leads directly to Eq. (33a).

APPENDIX C

The quasimode $|\Phi_n\rangle \overset{\text{def}}{=} (|\phi_n^+\rangle + |\phi_n^-\rangle)/\sqrt{2}$ is localized on one torus at energy $E_n^+ \simeq E_n^-$. Standard JWKB techniques [44,45] provide a semiclassical approximation to its wave function,

$$\Phi_n^{\text{s.c.}}(q) = \frac{1}{\sqrt{\sum_\beta T_\beta(E_n)}} \sum_\beta \frac{A_{n,\beta}}{\sqrt{\partial_p H(p_\beta(q,E_n),q)}}$$
$$\times \exp\left(i \int_{b_\beta}^q p_\beta(x,E_n)dx/\hbar \right) \tag{C1}$$

[β labels the possible several branches of the torus, $A_{n,\beta}$ are dimensionless coefficients of unit modulus, b_β is a base point of the branch β and $T_\beta(E_n)$ the characteristic time (A12) spent on the branch β]. Within the semiclassical approximation, it is, therefore, consistent to construct $\Pi_n(q',q)$ by substituting Eq. (C1) in the matrix elements of the projector operator $|\phi_n^+\rangle\langle\phi_n^+| + |\phi_n^-\rangle\langle\phi_n^-| = |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| + \hat{S}|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\hat{S}$. From the integral (20)

$$2\int dq dq' \Phi_n^{\text{s.c.}}(q)(\Phi_n^{\text{s.c.}}(q'))^* G(\eta q',q;T), \tag{C2}$$

when we insert the semiclassical expressions (16), we obtain a sum of integrals of the form

$$\int dq dq' \frac{e^{i/\hbar \int_{b_\beta}^q p_\beta(x,E_n)dx}}{\sqrt{\partial_p H(p_\beta(q,E_n),q)}} \frac{e^{-i/\hbar \int_{b_{\beta'}}^{q'} p_{\beta'}(x,E_n)dx}}{\sqrt{\partial_p H(p_{\beta'}(\eta q',E_n),q')}}$$
$$\times \sqrt{\frac{\partial^2 S_\mathfrak{o}}{\partial q_i \partial q_f}}\Bigg|_{(\eta q',q;T)} e^{iS_\mathfrak{o}(\eta q',q;T)/\hbar}. \tag{C3}$$

The stationary conditions

$$p_\beta(q,E_n) = -\partial_{q_i} S_\mathfrak{o}(\eta q',q;T), \tag{C4a}$$

$$\eta p_{\beta'}(q',E_n) = \partial_{q_f} S_\mathfrak{o}(\eta q',q;T) \tag{C4b}$$

select the classical trajectories $\mathfrak{o}$ with energy E_n that go from $(p_i,q_i) = (p_\beta(q,E_n),q)$ at $t(s_i)=0$ to $(p_f,q_f) = (\eta p_{\beta'}(q',E_n),\eta q')$ at time $t(s_f)=T$. Then the value of the exponent

$$S_{\mathfrak{o},\beta,\beta'}(E_n,T) = -E_n T + \tilde{S}_\mathfrak{o}(b_{\beta'},b_\beta,E_n) \tag{C5}$$

depends only on the branches where the starting and ending points lie and not on the precise location of these points on the branches. Since q and q' correspond to the same torus, such a trajectory must connect the two symmetric tori for $\eta=-1$. At a given E_n and T, for a fixed $q=q_i$ on the branch β, q_f, and β' are uniquely given and we can make the stationary phase approximation for the integral on q'. Then if we insert Eq. (A10) at energy E_n into Eq. (C4) and differentiate it with respect to q or q', we obtain some identities that, with Eq. (A11), allow us to simplify the combination of the prefactors and the remaining integral in q turns out to be precisely of the form of the right hand side of Eq. (A12). *A priori*, the domain of integration is included in the domain of the branch β but is not necessarily equal to it because when sliding the starting point on the whole branch β, the endpoint may cross a turning point and correspond to a jump of β'. However, we obtain characteristic times that depend only on the geometry of the orbit, not on the number of times the considered branch may be repeated as s goes from s_i to s_f. As discussed in the case of the double well, if there exist different topological classes of $\mathfrak{o}$, each of them being characterized by an ordered sequence of turning points $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$, we must add such contributions. Then, using directly $\text{tr}(\hat{\Pi}_n \hat{U}(T)) \simeq 2e^{-iE_nT/\hbar}$, we have proven that

$$\Delta_n(T) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \frac{\hbar}{T} \sum_{[\rho_1,\rho_2,\ldots]} (-1)^{\mu_\mathfrak{o}} A_{\beta,\beta'}(E_n,T) e^{i\tilde{S}_\mathfrak{o}(b_{\beta'},b_\beta,E_n)/\hbar} \tag{C6}$$

where the sum runs over all the sequences of turning points on the section $\mathfrak{s}$ at energy E_n where one canonical variable is maintained real. There must exist for such a sequence, one half symmetric orbit $\mathfrak{o}$ starting on the branch β of the torus at energy E_n, crossing successively all the sequences $[\rho_1,\rho_2,\ldots]$ and ending on the branch β' at time T. The dimensionless coefficients $A_{\beta,\beta'}(E_n,T)$ have a $\hbar$-independent modulus of order one and depend only on the geometrical properties of the branches. If some parts of the trajectory are repeated, their repetition numbers do not appear in $A_{\beta,\beta'}(E_n,T)$ but only in the cumulative quantities: the index μ_o and the action $\tilde{S}_o(b_{\beta'},b_\beta,E_n)$ given by

$$\tilde{S}_\mathfrak{o}(b_{\beta'},b_\beta,E_n) = \int_{s_i}^{s_f} p(s)\frac{dq}{ds}ds + \int_{b_\beta}^{q(s_i)} p_\beta(x,E_n)dx$$
$$- \int_{b_{\beta'}}^{q(s_f)} p_{\beta'}(x,E_n)dx. \tag{C7}$$

In the case of two branches, the computation of the coefficient can be done exactly using the appropriate choice of phase conventions for the base points b_β and $A_{n,\beta}$; we obtain

$$A_{\beta,\beta'}(E_n,T) = -1/2. \tag{C8}$$

We illustrate in the main body of this article, how to compute the sum in the right hand side of Eq. (C6).

[1] *Instantons in gauge theories, Advanced Series in Mathematical Physics* edited by M. A. Shifman (World Scientific, Singapore, 1994), Vol. 5.
[2] S. Coleman, *Aspects of Symmetry (selected Erice lectures)* (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
[3] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, 4th ed., International Series of Monographs on Physics (Clarendon Press, Oxford, 2002), Vol. 113.
[4] M. J. Davis and E. J. Heller, J. Chem. Phys. **75**, 246 (1981).
[5] N. T. Maitra and E. J. Heller, Phys. Rev. A **54**, 4763 (1996).
[6] N. T. Maitra and E. J. Heller, Phys. Rev. Lett. **78**, 3035 (1997).
[7] K. F. Freed, J. Chem. Phys. **56**, 692 (1972).
[8] T. F. George and W. H. Miller, J. Chem. Phys. **56**, 5722 (1972).
[9] W. H. Miller, Adv. Chem. Phys. **25**, 69 (1974).
[10] U. Weiss and W. Haeffner, Phys. Rev. D **27**, 2916 (1983).
[11] R. D. Carlitz and D. A. Nicole, Ann. Phys. (N.Y.) **164**, 411 (1985).
[12] E. M. Ilgenfritz and H. Perlt, J. Phys. A **25**, 5729 (1992).
[13] N. T. Maitra and E. J. Heller, in *Classical, Semiclassical and Quantum Dynamics in Atoms*, edited by H. Friedrich and B. Eckhardt (Springer-Verlag, Berlin, 1997), pp. 94–111.
[14] S. C. Creagh and N. D. Whelan, Ann. Phys. (N.Y.) **272**, 196 (1999).
[15] A. M. Ozorio de Almeida, J. Phys. Chem. **88**, 6139 (1984).
[16] D. Farrelly and T. Uzer, J. Chem. Phys. **85**, 308 (1986).
[17] E. J. Heller, J. Phys. Chem. **99**, 2625 (1995).
[18] S. Tomsovic, J. Phys. A **31**, 9469 (1998).
[19] D. W. Mclaughlin, J. Math. Phys. **13**, 1099 (1972).
[20] Y. Zohta, Phys. Rev. B **41**, 7879 (1990).
[21] D. Bohm, *Quantum Theory* (Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1951).
[22] K. Takahashi and N. Saitôn, Phys. Rev. Lett. **55**, 645 (1985).
[23] E. J. Heller, in *Chaos et Physique Quantique—Chaos and Quantum Physics* (Ref. [25]), pp. 547–663.
[24] G. Torres-Vega and J. H. Frederick, J. Chem. Phys. **93**, 8862 (1990).
[25] *Chaos et Physique Quantique—Chaos and Quantum Physics*, Les Houches, école d'été de physique théorique 1989, session LII, edited by M. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1991).
[26] M. Wilkinson, Physica D **21**, 341 (1986).
[27] S. C. Creagh, in *Tunneling in Complex Systems*, Proceedings from the Institute for Nuclear Theory, edited by S. Tomsovic (World Scientific, Singapore, 1997), Vol. 5, pp. 35–100.
[28] A. Garg, Am. J. Phys. **68**, 430 (2000).
[29] A. Mouchet, J. Phys. A **40**, F663 (2007).
[30] A. Shudo and K. S. Ikeda, Phys. Rev. Lett. **76**, 4151 (1996).
[31] A. Shudo, Y. Ishii, and K. S. Ikeda, J. Phys. A **42**, 265101 (2009).
[32] J. M. Robbins, S. C. Creagh, and R. G. Littlejohn, Phys. Rev. A **39**, 2838 (1989).
[33] H. J. Korsch and Glück, Eur. J. Phys. **23**, 413 (2002).
[34] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Non-relativistic Theory), Course of Theoretical Physics*, 3rd ed. (Pergamon Press, Oxford, 1977), Vol. 3.
[35] E. Gildener and A. Patrascioiu, Phys. Rev. D **16**, 423 (1977).
[36] T. Connor, J. N. L. and Uzer, R. A. Marcus, and A. D. Smith, J. Chem. Phys. **80**, 5095 (1984).
[37] M. Abramowitz and I. A. Segun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
[38] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic, New York, 1965).
[39] D. Khuat-duy and P. Lebœuf, Appl. Phys. Lett. **63**, 1903 (1993).
[40] A. Bäcker, R. Ketzmerick, S. Löck, and L. Schilling, Phys. Rev. Lett. **100**, 104101 (2008).
[41] S. Löck, A. Bäcker, R. Ketzmerick, and P. Schlagheck, Phys. Rev. Lett. **104**, 114101 (2010).
[42] R. F. Dashen, B. Hasslacher, and A. Neveu, Phys. Rev. D **10**, 4114 (1974).
[43] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer-Verlag, Berlin, 2001).
[44] J. B. Keller, Ann. Phys. (N.Y.) **4**, 180 (1958).
[45] I. C. Percival, Adv. Chem. Phys. **36**, 1 (1977).
[46] S. C. Creagh and N. D. Whelan, Phys. Rev. Lett. **77**, 4975 (1996).
[47] S. Tomsovic and D. Ullmo, Phys. Rev. E **50**, 145 (1994).
[48] F. Leyvraz and D. Ullmo, J. Phys. A **29**, 2529 (1996).
[49] Statistical approaches have also been proposed [46–48].
[50] The other order $\lim_{\tau\to 0}\lim_{\hbar\to 0}$ corresponds to the quantization of a kicked Hamiltonian that leads to τ-dependent results as shown in [29].

Bibliographie

[1] Abramowitz and Stegun, *Handbook of mathematical functions, with formulas, graphs, and mathematical tables*, Dover Publications, 1972.

[2] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics (Graduate Texts in Mathematics)*, 2nd ed., Springer, May 1989.

[3] A. Bäcker, R. Ketzmerick, S. Löck, and L. Schilling, *Regular-to-Chaotic Tunneling Rates Using a Fictitious Integrable System*, Physical Review Letters **100** (2008), no. 10, 104101–+.

[4] Arnd Bäcker, Roland Ketzmerick, and Steffen Löck, *Direct regular-to-chaotic tunneling rates using the fictitious-integrable-system approach*, Phys. Rev. E **82** (2010), no. 5, 056208.

[5] G L Baker and J A Blackburn, *The pendulum : A case study in physics*, 2005.

[6] R. Balian and C. Bloch, *Solution of the Schrödinger equation in terms of classical paths*, Annals of Physics **85** (1974), 514–545.

[7] Bender and Orszag, *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*, McGraw-Hill, 1978.

[8] M. V. Berry and K. E. Mount, *Semiclassical approximations in wave mechanics*, Reports on Progress in Physics **35** (1972), 315–397.

[9] M. V. Berry and M. Tabor, *Level clustering in the regular spectrum*, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **356** (1977), no. 1686, 375–394.

[10] G. Binning, H. Rohrer, C. Gerber, and E. Weibel, *Surface Studies by Scanning Tunneling Microscopy*, Physical Review Letters **49** (1982), 57–61.

[11] George David Birkhoff, *Dynamical systems*, vol. 9, New York, American Mathematical Society, 1927.

[12] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit, *Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws*, Phys. Rev. Lett. **52** (1984), no. 1, 1–4.

[13] O. Bohigas, S. Tomsovic, and D. Ullmo, *Manifestations of classical phase space structures in quantum mechanics*, Physics Reports **223** (1993), 43–133.

[14] David Bohm, *Quantum theory*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1951.

[15] Léon Brillouin, *La mécanique ondulatoire de Schrödinger ; une méthode générale de résolution par approximations successives*, C. R. Acad. Sci. Paris **183** (1926), 24–26, (in french).

[16] O. Brodier, P. Schlagheck, and D. Ullmo, *Resonance-Assisted Tunneling in Near-Integrable Systems*, Physical Review Letters **87** (2001), no. 6, 064101–+.

[17] ———, *Resonance-Assisted Tunneling*, Annals of Physics **300** (2002), 88–136.

[18] R. D. Carlitz and D. A. Nicole, *Classical paths and quantum mechanics*, Annals of Physics **164** (1985), 411–462.

[19] J. M. Cohen and B. Kuharetz, *Energy level degeneracy*, Journal of Mathematical Physics **34** (1993), 12–22.

[20] Cohen-Tannoudji, Diu, and Laloë, *Mécanique quantique, tome 1*, 1997.

[21] S. Coleman, *Fate of the false vacuum : Semiclassical theory*, Physical Review D **15** (1977), 2929–2936.

[22] ———, *Aspects of symmetry*, Cambridge University Press, 1985.

[23] J. N. L. Connor, T. Uzer, R. A. Marcus, and A. D. Smith, *Eigenvalues of the Schrödinger equation for a periodic potential with nonperiodic boundary conditions : A uniform semiclassical analysis*, Journal of Chemical Physics **80** (1984), 5095–5106.

[24] S. C. Creagh, *Tunnelling in multidimensional systems*, Journal of Physics A Mathematical General **27** (1994), 4969–4993.

[25] Stephen C. Creagh, *Tunneling in two dimensions*, Tunneling in complex systems, 1997, pp. 35–100.

[26] Stephen C. Creagh and Niall D. Whelan, *Complex periodic orbits and tunneling in chaotic potentials*, Phys. Rev. Lett. **77** (1996), no. 25, 4975–4979.

[27] R. F. Dashen, B. Hasslacher, and A. Neveu, *Nonperturbative methods and extended-hadron models in field theory. I. Semiclassical functional methods*, Physical Review D **10** (1974), 4114–4129.

[28] M. J. Davis and E. J. Heller, *Quantum dynamical tunneling in bound states*, Journal of Chemical Physics **75** (1981), 246–254.

[29] M. A. M. de Aguiar and A. M. O. de Almeida, *On the probability density interpretation of smoothed Wigner functions*, Journal of Physics A Mathematical General **23** (1990), L1025–L1031.

[30] Elster and Geitel, *Becquerel rays*, Wied. Ann. **66** (1889), 735.

[31] C. Eltschka and P. Schlagheck, *Resonance- and Chaos-Assisted Tunneling in Mixed Regular-Chaotic Systems*, Physical Review Letters **94** (2005), no. 1, 014101–+.

[32] L. Esaki, *Long journey into tunneling*, Reviews of Modern Physics **46** (1974), 237–244.

[33] R. H. Fowler and L. Nordheim, *Electron Emission in Intense Electric Fields*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A **119** (1928), no. 781, 173–181.

[34] K. F. Freed, *Path Integrals and Semiclassical Tunneling, Wavefunctions, and Energies*, Journal of Chemical Physics **56** (1972), 692–697.

[35] G. Gamow, *Zur Quantentheorie des Atomkernes*, Zeitschrift fur Physik **51** (1928), 204–212.

[36] A. Garg, *Tunnel splittings for one-dimensional potential wells revisited*, American Journal of Physics **68** (2000), 430–437.

[37] T. F. George and W. H. Miller, *Complex-Valued Classical Trajectories for Linear Reactive Collisions of H + H2 below the Classical Threshold*, Journal of Chemical Physics **56** (1972), 5722–5723.

[38] E. Gildener and A. Patrascioiu, *Pseudoparticle contributions to the energy spectrum of a one-dimensional system*, Physical Review D **16** (1977), 423–430.

[39] J. M. Greene and I. C. Percival, *Hamiltonian maps in the complex plane*, Physica D Nonlinear Phenomena **3** (1981), 530–548.

[40] R. W. Gurney and E. U. Condon, *Wave Mechanics and Radioactive Disintegration*, Nature **122** (1928), 439–+.

[41] F. G. Gustavson, *Oil constructing formal integrals of a Hamiltonian system near ail equilibrium point*, The Astronomical Journal **71** (1966), 670–+.

[42] Winfried K. Hensinger, Hartmut Häffner, Antoine Browaeys, Norman R. Heckenberg, Kris Helmerson, Callum McKenzie, Gerard J. Milburn, William D. Phillips, Steve L. Rolston, Halina Rubinsztein-Dunlop, and Ben Upcroft, *Dynamical tunnelling of ultracold atoms*, Nature **412** (2001), no. 6842, 52–55.

[43] C. Herring, *Critique of the Heitler-London Method of Calculating Spin Couplings at Large Distances*, Reviews of Modern Physics **34** (1962), 631–644.

[44] C. Herring and M. Flicker, *Asymptotic Exchange Coupling of Two Hydrogen Atoms*, Physical Review **134** (1964), 362–366.

[45] B. R. Holstein, *Semiclassical treatment of the double well*, American Journal of Physics **56** (1988), 338–345.

[46] F. Hund, *Zur deutung der molekelspecktren. i*, Zts. f. Phys. **40** (1927), no. 10, 742–764.

[47] ———, *Zur deutung der molekelspecktren. iii*, Zts. f. Phys. **43** (1927), no. 11-12, 805–826.

[48] K Husimi, *Some formal properties of the density matrix*, Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan **22** (1940), 264–314.

[49] E. M. Ilgenfritz and H. Perlt, *Complex time path for the tunnelling at intermediate energy*, Journal of Physics A Mathematical General **25** (1992), 5729–5740.

[50] Harold Jeffreys, *On Certain Approximate Solutions of Lineae Differential Equations of the Second Order*, Proceedings of the London Mathematical Society **s2-23** (1925), no. 1, 428–436.

[51] B. D. Josephson, *The discovery of tunnelling supercurrents*, Reviews of Modern Physics **46** (1974), 251–254.

[52] R S Kaushal, *Classical and quantum mechanics of complex hamiltonian systems : An extended complex phase space approach*, Pramana - J. Phys. **73** (2009), no. 2, 287–297.

[53] R. S. Kaushal and H. J. Korsch, *Some remarks on complex Hamiltonian systems*, Physics Letters A **276** (2000), 47–51.

[54] J. B. Keller, *Corrected bohr-sommerfeld quantum conditions for nonseparable systems*, Annals of Physics **4** (1958), 180–188.

[55] Joseph B. Keller, *Semiclassical mechanics*, SIAM Review **27** (1985), no. 4, pp. 485–504 (English).

[56] Keshavamurthy and Schlagheck, *Dynamical tunneling : Theory and experiment*, 2011.

[57] D. Khuat-Duy and P. Leboeuf, *Multiresonance tunneling effect in double-well potentials*, Applied Physics Letters **63** (1993), 1903–1905.

[58] John R. Klauder and Bo-Sture Skagerstam, *Coherent states : Applications in physics and mathematical physics*, World Scientific Pub Co Inc, 1985.

[59] H. J. Korsch and M. Glück, *Computing quantum eigenvalues made easy*, European Journal of Physics **23** (2002), 413–426.

[60] H. A. Kramers, *Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung*, Zeitschrift fur Physik **39** (1926), 828–840.

[61] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics : Non-relativistic theory*, third ed., Course of Theoretical Physics, vol. 3, Pergamon Press, Oxford ; New York, 1989, c1977.

[62] R. E. Langer, *On the Connection Formulas and the Solutions of the Wave Equation*, Physical Review **51** (1937), 669–676.

[63] A. Lapedes and E. Mottola, *Complex path integrals and finite temperature*, Nuclear Physics B **203** (1982), 58–92.

[64] P. Leboeuf and A. Mouchet, *Tunneling and the band structure of chaotic systems*, Physical Review Letters **73** (1994), 1360–1363.

[65] P. Leboeuf and A. Mouchet, *Normal forms and complex periodic orbits in semiclassical expansions of hamiltonian systems*, Annals of Physics **275** (1999), no. 1, 54 – 112.

[66] A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman, *Regular and stochastic motion*, WILEY-VCH Verlag, 1983.

[67] S. Löck, A. Bäcker, R. Ketzmerick, and P. Schlagheck, *Regular-to-Chaotic Tunneling Rates : From the Quantum to the Semiclassical Regime*, Physical Review Letters **104** (2010), no. 11, 114101–+.

[68] N. T. Maitra and E. J. Heller, *Semiclassical perturbation approach to quantum reflection*, Physical Review A **54** (1996), 4763–4769.

[69] ———, *Barrier Tunneling and Reflection in the Time and Energy Domains : The Battle of the Exponentials*, Physical Review Letters **78** (1997), 3035–3038.

[70] D. W. McLaughlin, *Complex Time, Contour Independent Path Integrals, and Barrier Penetration*, Journal of Mathematical Physics **13** (1972), 1099–1108.

[71] E. Merzbacher, *Quantum mechanics*, 2nd ed., Wiley international editions, J. Wiley, 1970.

[72] W. H. Miller and T. F. George, *Semiclassical Theory of Electronic Transitions in Low Energy Atomic and Molecular Collisions Involving Several Nuclear Degrees of Freedom*, Journal of Chemical Physics **56** (1972), 5637–5652.

[73] William H. Miller, *Classical-limit quantum mechanics and the theory of molecular collisions*, Advances in Chemical Physics (1974), 69–177.

[74] Jürgen Moser, *The analytic invariants of an area-preserving mapping near a hyperbolic fixed point*, Communications on Pure and Applied Mathematics **9** (1956), no. 4, 673–692.

[75] A. Mouchet, *Fast Track Communication : Importance of the Wick rotation on tunnelling*, Journal of Physics A Mathematical General **40** (2007), 663–+.

[76] A. Mouchet, C. Eltschka, and P. Schlagheck, *Influence of classical resonances on chaotic tunneling*, Physical Review E **74** (2006), no. 2, 026211–+.

[77] A. M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems : Chaos and Quantization*, Cambridge University Press 1988, 1988.

[78] A. Patrascioiu, *Complex time and the Gaussian approximation*, Physical Review D **24** (1981), 496–504.

[79] I. C. Percival, *Regular and irregular spectra*, Journal of Physics B Atomic Molecular Physics **6** (1973), L229–L232.

[80] Ian C. Percival, *Semiclassical theory of bound states*, John Wiley & Sons, Inc., 1977.

[81] A. M. Polyakov, *Compact gauge fields and the infrared catastrophe*, Physics Letters B **59** (1975), 82–84.

[82] J. M. Robbins, S. C. Creagh, and R. G. Littlejohn, *Complex periodic orbits in the rotational spectrum of molecules : The example of SF6*, Physical Review A **39** (1989), 2838–2854.

[83] Rutherford, *Radioactive substance emitted from thorium compounds*, Phil. Mag. **49** (1900), no. 1.

[84] E. Schrödinger, *An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules*, Physical Review **28** (1926), 1049–1070.

[85] Shifman, *Instantons in gauge theories*, vol. 5, World Scientific Publishing Company, 1994.

[86] A. Shudo and K. S. Ikeda, *Complex Classical Trajectories and Chaotic Tunneling*, Physical Review Letters **74** (1995), 682–685.

[87] ———, *Stokes Phenomenon in Chaotic Systems : Pruning Trees of Complex Paths with Principle of Exponential Dominance*, Physical Review Letters **76** (1996), 4151–4154.

[88] ———, *Chaotic tunneling : A remarkable manifestation of complex classical dynamics in non-integrable quantum phenomena*, Physica D Nonlinear Phenomena **115** (1998), 234–292.

[89] A. Shudo, Y. Ishii, and K. S. Ikeda, *Julia sets and chaotic tunneling : I*, Journal of Physics A Mathematical General **42** (2009), no. 26, 265101–+.

[90] ———, *Julia sets and chaotic tunneling : II*, Journal of Physics A Mathematical General **42** (2009), no. 26, 265102–+.

[91] D. A. Steck, W. H. Oskay, and M. G. Raizen, *Observation of Chaos-Assisted Tunneling Between Islands of Stability*, Science **293** (2001), 274–278.

[92] R. T. Swimm and J. B. Delos, *Semiclassical calculations of vibrational energy levels for nonseparable systems using the Birkhoff-Gustavson normal form*, Journal of Chemical Physics **71** (1979), 1706–1717.

[93] M. Tabor, *A semiclassical quantization of area-preserving maps*, Physica D Nonlinear Phenomena **6** (1983), 195–210.

[94] Michael Tabor, *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics : An Introduction*, 1 ed., Wiley-Interscience, January 1989.

[95] K. Takahashi and N. Saito, *Chaos and Husimi distribution function in quantum mechanics*, Physical Review Letters **55** (1985), 645–648.

[96] S. Tomsovic and D. Ullmo, *Chaos-assisted tunneling*, Physical Review E **50** (1994), 145–162.

[97] J. H. Van Vleck, *The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **14** (1928), no. 2, 178–188.

[98] U. Weiss and W. Haeffner, *Complex-time path integrals beyond the stationary-phase approximation : Decay of metastable states and quantum statistical metastability*, Physical Review D **27** (1983), 2916–2927.

[99] G. Wentzel, *Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik*, Zeitschrift fur Physik **38** (1926), 518–529.

[100] M. Wilkinson, *Tunnelling between tori in phase space*, Physica D Nonlinear Phenomena **21** (1986), 341–354.

[101] A. L. Xavier, Jr. and M. A. M. de Aguiar, *Complex Trajectories in the Quartic Oscillator and Its Semiclassical Coherent-State Propagator*, Annals of Physics **252** (1996), 458–478.

[102] Ademir Luix Xavier, Jr., *New method for obtaining complex roots in the semiclassical coherent-state propagator formula*, Brazilian Journal of Physics **31** (2001), 461 – 467 (en).

[103] Jean Zinn-Justin , *Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction*, Collection savoirs actuels, 2003.

[104] Y. Zohta, *Path-integral approach to resonant tunneling*, Physical Review B **41** (1990), 7879–7882.

Résumé :

Les travaux présentés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre général de la description de l'effet tunnel dans la limite semiclassique $\hbar \to 0$. Nous présentons une nouvelle méthode de calcul direct de la largeur des doublets tunnel. L'expression obtenue est basée sur l'utilisation de traces d'opérateurs quantiques, dont l'opérateur d'évolution $\hat{U}(T)$ prolongé analytiquement à l'aide d'un temps complexe T. L'étape suivante consiste en un développement semiclassique de ces traces. Nous nous plaçons dans le cadre des systèmes intégrables unidimensionnels afin d'insister sur l'importance d'un temps complexe et on montre que le choix d'un chemin du temps $[t]$ adapté, lors du calcul semiclassique des traces, fournit un critère de sélection efficace des trajectoires complexes dominantes. Nous verrons que cette approche retrouve la technique des instantons dans la limite d'un temps purement imaginaire et qu'elle permet d'inclure les descriptions, inaccessibles par une rotation de Wick complète, de l'effet tunnel dynamique et résonant. Nous montrons également comment adapter cette méthode au taux de transmission tunnel d'un état localisé dans un minimum local vers un continuum d'états. Enfin, nous proposerons, en guise de perspectives, d'étudier l'effet tunnel résonant à partir de modèles intégrables présentant des îlots stables entourés de chaînes de tores pour lesquels nous tenterons d'adapter la théorie de l'effet tunnel assisté par les résonances.

Mots clés :

Effet tunnel - effet tunnel dynamique - effet tunnel résonant - instantons - rotation de Wick - méthodes semiclassiques - temps complexe - trajectoires complexes.

Abstract :

The present work is developed within the general framework of the description of the tunneling effect in the semiclassical limit $\hbar \to 0$. We introduce a new method for the direct computation of the tunneling splittings. We get a trace formula involving the evolution operator continued in the complex plane using a complex time T. The next step is to obtain semiclassical expansion of these traces. Within the framework of one dimensionnal integrable systems, we show the key role of a complex time. When performing semiclassical calculations, an appropriate complex-time paths provide an efficient criterion in order to select the dominant complex trajectories involved in the traces. We will show that our approach includes instanton techniques in the limit of a purely imaginary time and describes dynamical tunneling and resonant tunneling for which a complete Wick is not sufficient. We will show also how our method works for the decay rates. Finally, as a perspective, we will study resonant tunneling from integrable models which exhibit prominent islands surrounded by chains of tori. From these models, we will try to apply the theory of resonant assisted tunneling to integrable systems.

Keywords :

Tunneling - dynamical tunneling, resonant tunneling - instantons - Wick rotation - semiclassical methods - complex time - complex trajectories.