Introduction aux méthodes semiclassiques en chaos quantique

Amaury MOUCHET

novembre 1996

Le chaos quantique désigne l'étude quantique des systèmes dont le comportement classique est chaotique. En simplifiant à l'extrême, on peut dire qu'il se dégage deux ¡¡ philosophies ¿¿ complémentaires pour tâcher de comprendre la physique de tels systèmes. La première est analogue à celle des physiciens qui, il y a un siècle, ont introduit la notion d'ensemble statistique afin de décrire les propriétés thermodynamiques macroscopiques d'un système dont le comportement microscopique était incommensurablement complexe à cause du grand nombre de degrés de liberté impliqués. La démarche dont on connaît le succès, consiste à s'affranchir d'une information microscopique, de toute façon inessentielle, en substituant au manque d'information des lois de probabilité ne reflétant qu'un petit nombre de propriétés pertinentes. On gagne ainsi en universalité ce que l'on perd en complexité. La théorie des matrices aléatoires s'appuie sur la même idée : ce n'est pas le détail microscopique des hamiltoniens mis en jeu qui est important, mais plutôt leurs symétries globales. L'une des grandes réussites de cette théorie est d'avoir montré qu'en imposant un petit nombre de contraintes sur une distribution supposée aléatoire des éléments de matrice de ces hamiltoniens, on pouvait rendre compte de certaines propriétés universelles caractérisant la nature chaotique ou intégrable des systèmes complexes [Pour une introduction sur l'application de la théorie des matrices aléatoires au chaos quantique, on pourra se reporter au cours de [18] et, pour une approche plus historique, à [75]].

Le second angle d'attaque consiste à se placer plus explicitement à ¡¡ l'interface ¿¿ entre théorie classique et quantique. Le régime, appelé semiclassique, dans lequel ces deux théories se recouvrent, correspond à des systèmes dont les actions mises en jeu sont beaucoup plus grandes que la constante de Planck $\hbar$. Contrairement à ce qui se produit en comparant théories (classiques) relativiste et non relativiste où les comportements des observables quand la vitesse de la lumière $c \to +\infty$ sont bien définis, la limite semiclassique $\hbar \to 0$ est hautement singulière et reflète la dichotomie qu'il y a entre nos visions classique et quantique [voir à ce sujet l'excellente introduction ¡¡ Theories as limits of other theories ¿¿ du cours de [9]]. La motivation des théories semiclassiques est justement d'établir des ponts entre ces deux dernières et c'est dans ce cadre que se situe le travail présenté dans cette thèse. Auparavant, esquissons brièvement un tableau de la physique semiclassique.

• • •

De prime abord la mécanique classique a évidemment fourni les premiers points d'ancrage aux pionniers fondateurs des théories quantiques. Si le principe de correspondance, énoncé dans sa version quasi-définitive par Bohr [37, §3.2], apparaissait somme toute assez naturel puisque le monde macroscopique — défini par un régime d'actions infiniment plus grandes que $\hbar$ — restait décrit correctement par la théorie classique, les règles empiriques de quantification proposées essentiellement par Sommerfeld [37, §3.1] n'étaient pas, quant à elles, sans soulever de nombreuses difficultés. Difficultés théoriques d'une part puisque, même en ce qui concernait les systèmes où elles permettaient de reproduire correctement les raies des atomes hydrogénoïdes, ces règles ne s'appuyaient pas sur une justification satisfaisante. Difficultés pratiques d'autre part, puisqu'une formulation générale faisait cruellement défaut. Plus précisément, dans la théorie dite de Bohr-Sommerfeld décrivant les états liés d'un système à un degré de liberté, on maintenait les équations d'évolution classiques pour les variables canoniques (p,q) mais on ne conservait parmi leurs solutions que celles telles que

$$\frac{1}{2\pi}\int_{t_{\mathrm{initial}}}^{t_{\mathrm{initial}}+T} p(t)\dot{q}(t)\,dt \;\in\; \hbar\,\mathbb{N}\backslash\{0\} \tag{1}$$

où T est la période du mouvement classique. La généralisation de cette règle aux systèmes séparables multidimensionnels proposée par Sommerfeld, Wilson, Schwarzschild et Epstein [37, §3.1] en imposant la condition (1) pour chaque degré de liberté restait trop restrictive et de surcroît introduisait un système privilégié de coordonnées dans l'espace des phases. [31] [[56, pour une mise en relief moderne de ce travail]voir] a montré que l'on pouvait lever cette dernière difficulté et généraliser les règles précédentes en imposant des conditions de quantification portant des invariants intégraux :

$$\forall\, k \in \{1, \ldots, \mathrm{D}\}\,, \qquad \frac{1}{2\pi}\oint_{\mathscr{C}_k} p \cdot dq \;\in\; \hbar\,\mathbb{N}\backslash\{0\} \tag{2}$$

où D est le nombre de degrés de liberté. Ces conditions s'appliquent non seulement aux systèmes séparables mais en fait dès que l'évolution dans l'espace des phases reste bornée et intégrable. Dans ce cas, en vertu du théorème de Liouville [5, §49], l'espace des phases est feuilleté en tores labellés par les D constantes du mouvement $C \stackrel{\text{def}}{=} (C_1, \ldots, C_{\mathrm{D}})$. Pour chaque valeur de C, on peut choisir une famille quelconque $\mathscr{C}_{k\in\{1,\ldots,\mathrm{D}\}}$ de D lacets tracés sur chaque tore associé à C et homotopiquement distincts. Les valeurs de C quantiquement observées sont alors telles que les conditions (2) soient toutes réalisées et ne sont donc sélectionnées que par valeurs discrètes. Le grand mérite de cette formulation était que non seulement elle élargissait la classe des systèmes quantifiables mais qu'en outre elle était explicitée dans un langage géométrique, c'est à dire indépendant du système de coordonnées choisi dans l'espace des phases. Cependant, et Einstein lui même le soulignait, une telle formulation perdait son sens pour quantifier des systèmes non intégrables et notamment les systèmes ergodiques qui, par ailleurs, jouaient un rôle crucial dans les fondements de la physique statistique microcanonique.

Si, on le voit, les premiers balbutiements de la mécanique quantique consistaient essentiellement à ne retenir parmi les solutions classiques qu'un nombre discret d'entre elles au moyen de conditions *ad hoc* dépendant de $\hbar$, les approches ultérieures — dues d'une part à Heisenberg, Born et Jordan [37, §5.1] [70, part. II] qui les ont formulées dans un langage matriciel et, d'autre part, à De Broglie et Schrödinger [37, §5.3] où le statut ondulatoire de la théorie fut définitivement établi — s'écartaient drastiquement des concepts classiques tant par la nature des observables que par leur interprétation. La seule référence à la théorie classique dans la formulation de [28], unifiant mécanique matricielle et ondulatoire, était une formulation plus quantitative du principe de correspondance à savoir un ensemble de règles plus ou moins ambiguës permettant de construire les observables quantiques à partir de leurs analogues classiques. Le statut de la physique classique pour décrire le monde microscopique a basculé d'autant plus vite vers un rôle apparemment secondaire qu'est apparue très tôt la nécessité d'introduire des observables, les spins, n'ayant aucun analogue classique. Malgré tout, un bon nombre d'approches, dont les méthodes introduites par Born et Oppenheimer en 1927 [49, vol.2, chap XVIII, §16] représentent la meilleure illustration, continuaient à méler de manière quelque peu hybride observables classiques et observables quantiques.

Ces bouleversements théoriques ont donné une nouvelle ampleur à la question de savoir comment la démarche classique pouvait être justifiée aux échelles macroscopiques à partir de la théorie quantique. En effet, il ne s'agissait plus alors d'affirmer simplement que l'on retrouvait la continuité classique dès lors que les écarts entre valeurs autorisées des invariants intégraux devenaient négligeables en même temps que $\hbar$, mais il fallait désormais donner un sens à la limite semiclassique des solutions de l'équation de Schrödinger. La difficulté essentielle, qui est à l'origine de l'ensemble des théories semiclassiques, est que cette équation ne se prête pas à une approche perturbative quand $\hbar \to 0$. Cela peut s'interpréter physiquement de la façon suivante : même si l'on peut, en vertu du comportement des inégalités d'Heisenberg quand $\hbar \to 0$, donner un sens à un ¡¡ état initial classique ¿¿ en fixant simultanément la position et l'impulsion du système et s'assurer grâce au théorème d'Ehrenfest [24, chap. III §D.1.d]Voir par exemple que les valeurs moyennes des observables suivent les lois du mouvement classique, l'étalement du paquet d'onde au cours du temps détruit en général l'état classique lorsque l'on regarde l'évolution du système pendant un temps suffisamment long [1]. Pourvu que l'on maîtrise bien l'ordre des limites $\hbar \to 0$ et $t \to \infty$, on est cependant capable de construire des états quantiques dont la dynamique revêt indiscutablement certains aspects classiques. Depuis l'introduction des premiers états cohérents par Schrödinger en 1927, un large travail s'est étendu autour des représentations des états dans l'espace des phases ainsi que de leur évolution temporelle [57, 36]. Ce domaine de recherche reste encore en pleine activité et a permis de développer des outils efficaces permettant de mieux comprendre une vaste gamme de phénomènes

[1]Récemment, on a pu montrer que c'est le couplage d'un système quantique avec son environnement (y compris les appareils de mesure) qui était à l'origine de la décohérence de ses fonctions d'ondes et leur permettait de se comporter classiquement [79, et ses références].

notamment en optique quantique. En outre, la découverte des cicatrices [36, §7.3]voir par exemple, c'est à dire des états stationnaires quantiques localisés au niveau des orbites périodiques classiques, a renforcé encore plus la conviction que la mécanique classique restait un guide incontournable.

Une approche complémentaire due à [39], [44], [20] et [76] fut de construire directement des solutions approchées de l'équation de Schrödinger en utilisant des techniques eikonales développées hors du contexte quantique par Debye en particulier [37, §5.3]. L'idée sous-jacente de la théorie (J)WKB est d'obtenir la mécanique classique comme approximation de la mécanique quantique quand la longueur d'onde de De Broglie est petite devant les échelles classiques de la même façon que l'on retrouve l'optique géométrique à partir de l'optique ondulatoire quand la longueur d'onde de la lumière est infime. En écrivant une solution de l'équation Schrödinger sous la forme

$$\psi(x,t;\hbar) = A(x,t;\hbar)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(x,t)} \tag{3}$$

où A et S sont deux fonctions lisses de leurs arguments, on peut en effet montrer que, sous des hypothèses très larges et lorsque $\hbar \to 0$, S vérifie l'équation de Hamilton-Jacobi du problème classique associé et représente donc en première approximation une action classique. Plus précisément, ψ décrit un fluide de particules classiques indépendantes et les densités de particules et de courant de ce fluide en chaque point de l'espace sont à tout instant respectivement égales à la densité de probabilité et de courant de probabilité de la particule quantique en ce point [49, chap. VI]. En outre, [21] et, bien plus tard mais sur des bases plus solides [40], ont montré par ces techniques que les conditions aux limites imposées par un potentiel intégrable et confinant sur les fonctions d'onde (3) conduisaient aux contraintes d'Einstein (2) qui deviennent donc des équations non plus exactes mais semiclassiques (appelées équations EBK). Le bon accord entre (2) et l'expérience dans bon nombre de situations justifient donc l'approximation WKB. Un autre résultat semiclassique, qui suit les travaux précédents, est dû à [71] qui donne une approximation non pas des fonctions d'onde mais des propagateurs de l'équation de Schrödinger. Si $U(t)$ dénote l'opérateur d'évolution du système au temps t, son élément de matrice entre le bra $\langle q' \,|$ et le ket $|\, q \rangle$ est approximativement donné par

$$\langle q' \,|\, U(t) \,|\, q \rangle \simeq \sum_{\mathfrak{t}} \sqrt{\left|\frac{\partial^2 S_{\mathfrak{t}}}{\partial q' \partial q}\right|}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S_{\mathfrak{t}}(q',q;t)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\nu_{\mathfrak{t}}/2} \tag{4}$$

quand $\hbar \to 0$. La somme porte sur toutes les trajectoires classiques $\mathfrak{t}$ reliant q' à q en un temps t et $S_{\mathfrak{t}}$ représente l'action classique le long de $\mathfrak{t}$ considérée comme fonction de ses extrémités. $\nu_{\mathfrak{t}}$ est un entier dépendant uniquement du nombre et de la dimension des caustiques du flot hamiltonien classique rencontrées par $\mathfrak{t}$ [2].

On arrive ainsi au cœur de la problématique moderne des théories semiclassiques. La limite de quantités construites à partir des états quantiques est singulière quand $\hbar \to 0$ et cette singularité se traduit par des termes oscillants à une fréquence proportionnelle à $1/\hbar$ comme on le voit sur (3) et (4). On est conduit alors à s'interroger sur la possibilité de généraliser des expressions comme celle obtenue par Van Vleck qui, pour $\hbar$ fixé mais petit devant les actions classiques, permet de calculer dans une excellente approximation une quantité quantique à partir de $\hbar$ et d'ingrédients uniquement classiques. Il reste étonnant qu'il ait fallu attendre quarante ans pour que les travaux précurseurs de Jeffreys, Kramers, Brillouin, Wentzel et Van Vleck se trouvent considérablement enrichis tant par une meilleure compréhension de la dynamique quantique et classique que par un élargissement de leurs domaines d'applications.

Les travaux de Maslov [48] ont donné à l'approximation semiclassique des fondements mathématiques plus rigoureux notamment en contrôlant mieux les erreurs induites par des substituts de la forme (3). Plus précisément, Maslov a montré que les amplitudes des termes rapidement oscillant pouvaient chacune s'écrire comme un développement asymptotique en puissances de $\hbar$ dont le terme dominant conduit à l'interprétation semiclassique WKB rappelée ci-dessus. En outre, la formulation de Feynman de la mécanique quantique [32], inspirée directement du principe de Huygens-Fresnel [5, §46]la discussion de ce principe dans le contexte de la mécanique classique peut-être trouvée dans à la suite d'une remarque de Dirac, permet de mieux comprendre d'un point de vue physique pourquoi la dynamique classique structure au moins partiellement la dynamique quantique. En effet, on peut souvent écrire une quantité quantique $Q(\hbar)$ comme résultat d'une interférence

[2]La situation originellement considérée par Van Vleck ne correspondait qu'à un seul $\mathfrak{t}$ et à $\nu_{\mathfrak{t}} = 0$ pour q', q et t fixés.

entre chemins de l'espace des phases appartenant à un ensemble Γ mais non contraints de vérifier un principe de moindre action. Par exemple,

$$Q(\hbar) = \int_{[p(t),q(t)]\in\Gamma} F[p(t),q(t);\hbar]\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W[p(t),q(t)]}\,\mathcal{D}[p(t),q(t)] \tag{5}$$

où $\mathcal{D}$ est une ¡¡ mesure ¿¿ de Feynman définie sur l'ensemble Γ [3]. F et W sont deux fonctionnelles des chemins $[p(t),q(t)]$ et F dépendant de façon lisse de $\hbar$. Les contributions principales à l'intégrale (5) proviennent du bord de Γ mais aussi des chemins de Γ où la phase W est stationnaire, c'est à dire que l'on sélectionne ainsi dans Γ les solutions $\mathfrak{p}$ classiques qui rendent W extrémal. La mise en œuvre explicite de l'approximation de la phase stationnaire conduit donc à un développement du type

$$Q(\hbar) \underset{\hbar\to 0}{\sim} \bar{Q}(\hbar) + \sum_{\mathfrak{p}} A[\mathfrak{p},\hbar]\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}W[\mathfrak{p}]/\hbar} \tag{6}$$

où $\bar{Q}(\hbar)$ représente la contributions des termes de bord. $\bar{Q}$ et les amplitudes A sont des fonctions de $\hbar$ au moins continues au voisinage de 0. En ne conservant que les termes d'ordre dominant en $\hbar$, on retrouve alors le développement (4) puisque dans ce cas les termes de bords sont absents et que $W[p(t),q(t)] = \int_0^t\{p\dot{q} - H(p,q)\}dt$ où H est le hamiltonien classique associé à la dynamique quantique définie par U. Les développements asymptotiques de Maslov s'obtiennent en poussant formellement l'approximation de la phase stationnaire à tous les ordres en $\hbar$.

La deuxième quantité quantique à avoir été calculée semiclassiquement est la fonction $N(E)$ qui compte le nombre de niveaux d'énergie inférieure à E pour un système lié. La densité de niveaux d'énergie s'obtient par $\rho \overset{\text{def}}{=} dN/dE$ qui s'exprime en fonction du spectre $\sigma = \{E_n\}_{n\in I\subset\mathbb{N}}$ par le peigne de Dirac :

$$\rho(E) = \sum_{E_n\in\sigma} \delta(E - E_n)\ . \tag{7}$$

De façon plus générale, la détermination du spectre d'un opérateur différentiel est un problème central dans maints domaines de la physique [7]voir l'introduction de et son comportement asymptotique pour de grands vecteurs d'onde fournit déjà bon nombre d'indications précieuses. Dans le cas de $N(E)$ et de $\rho(E)$ on peut montrer que les termes de bords sont non seulement présents mais qu'en outre ils dominent les contributions oscillantes à la limite semiclassique. À l'ordre le plus élevé, $\bar{\rho}(E)$ s'obtient en divisant le volume dans l'espace des phases de la couche d'énergie E par le volume d'occupation minimal d'un état individuel autorisé par les inégalités d'Heisenberg. Si D est le nombre de degrés de liberté et H le hamiltonien classique, alors

$$\bar{\rho}(E) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\mathrm{D}}}\int \delta\Big(H(p,q) - E\Big)\,dp\,dq\ . \tag{8}$$

Le premier résultat de ce genre a été obtenu par Weyl pour le spectre du Laplacien dans un domaine compact. La dynamique classique associée correspond alors à une particule libre rebondissant spéculairement sur les parois du domaine, autrement dit à la dynamique à l'intérieur d'un billard. Le problème de Weyl a été abondamment étudié et élargi [7]. Notamment on a cherché à obtenir et à interpréter les ordres suivants du développement asymptotique semiclassique de $\bar{\rho}(E)$ qui dans le cas du billard bidimensionnel dépendent essentiellement de sa forme (longueur du périmètre, genre, etc.). La généralisation de ces résultats donne lieu encore à de nombreuses questions ouvertes [30]Voir par exemple.

Si l'on veut non seulement rendre compte du comportement moyen de Q mais également des fluctuations oscillantes $Q_{\mathrm{osc}} \overset{\text{def}}{=} Q - \bar{Q}$, on a vu qu'une connaissance de la structure des trajectoires classiques $\mathfrak{p}$ s'imposait. Or, le comportement de la dynamique classique d'un système dépend avant tout du nombre de constantes du mouvement impliquées : si dans le cas intégrable les trajectoires dans l'espace des phases s'organisent en famille réparties sur les tores de Liouville décrits plus haut, on sait depuis [58] que génériquement ces structures régulières sont absentes de l'espace des phases. On comprend alors pourquoi les sommes intervenant dans l'expression semiclassique de Q_{osc} dépendent de manière cruciale du caractère intégrable ou chaotique de la

[3]Dans l'approche initiale de Feynman, les intégrales ne portaient que sur les chemins dans l'espace de configuration (formulation lagrangienne). La généralisation aux chemins dans l'espace des phases, plus conforme à une approche hamiltonienne, est plus tardive [65, notamment le chapitre 31 et ses références].

dynamique classique associée au problème quantique initial. Le premier calcul semiclassique de $Q_{\rm osc}$ a été obtenu par [35] qui a donné une expression explicite de $\rho_{\rm osc}$ en termes des seules structures invariantes présentes dans l'espace des phases lorsque la dynamique est complètement chaotique : les orbites périodiques classiques. Le développement analogue lorsque le système est intégrable est dû à Berry et Tabor [12, 13] qui ont montré que les orbites classiques $\mathfrak{p}$ qui interviennent dans (6) se regroupent sur les tores sélectionnés précisément par les conditions d'Einstein (2) [4]. Un grand nombre de travaux, théoriques, numériques et expérimentaux [34, 22]voir par exemple ont confirmé la pertinence de ces approches semiclassiques qui apportent à la théorie un support ¡¡ intuitif ¿¿ classique permettant d'éclairer des notions souvent difficiles à saisir quantiquement. De nombreux domaines sont directement concernés, en particulier la physique atomique à petits degrés de liberté [atome d'hydrogène en champ magnétique [27], atome d'hélium [77]], la physique nucléaire [67]par exemple ainsi que celle des agrégats [19].

La reconstruction de quantités quantiques à partir d'ingrédients classiques s'accompagne de difficultés considérables qui ne sont à ce jour que partiellement maîtrisées et ce, d'autant plus que les multiples développements de la théorie des systèmes dynamiques [8, 46, 47, 50] ont révélé la complexité des solutions des équations classiques d'où a d'ailleurs émergé la notion moderne de chaos. Tout d'abord les travaux initiés par [58], [43], [3] et [52] ont montré que génériquement les trajectoires classiques, même dans les cas proches de l'intégrabilité, s'organisent en structures mélant de façon fractale la dynamique régulière et la dynamique chaotique. Ce régime qualifié de mixte rend extrêmement délicate l'écriture explicite de (6) et a fortiori son calcul numérique. En effet, la présence de nombreuses bifurcations dès qu'une perturbation est introduite modifie drastiquement le nombre et la nature des trajectoires $\mathfrak{p}$ sur lesquelles porte la somme. Or, par opposition au comportement extrêmement singulier de la dynamique classique, on s'attend à ce que le caractère ondulatoire quantique lisse les détails aux échelles plus petites que la longueur d'onde de De Broglie. Il est donc clair qu'il faille raffiner l'approche originelle de Gutzwiller si l'on veut espérer décrire semiclassiquement la régularité de la transition chaotique/intégrable au niveau quantique. C'est dans ce riche contexte que s'inscrivent de multiples travaux comme ceux de [54], de [68] ainsi que le chapitre II du présent mémoire.

Les situations où la dynamique est complètement chaotique [billards de Sinai, de Bunimovich [78, 41, ainsi que leurs références, dans le contexte classique et semiclassique respectivement.]voir, dynamique sur une surface à courbure négative constante [15], etc.] permettent d'éviter les écueils provenant des régions correspondant à un régime mixte. En effet, dans ce cas les orbites périodiques sont isolées et stables par perturbation, les amplitudes associées à chacune d'entre elles dans la formule de Gutzwiller ne divergent donc pas. En revanche, le nombre de termes oscillants reste en général prohibitif car la détermination des longues trajectoires est souvent extrêmement difficile. Un moyen de surmonter ces obstacles est de travailler avec des systèmes dont les équations d'évolution classique sont bien maîtrisées (billards, systèmes pulsés, dynamique symbolique, fonction ζ de Riemann etc.). La présence d'un codage, même approximatif, permet parfois de dresser un inventaire des contributions oscillantes suffisant pour obtenir des résultats satisfaisants. Un grand pas dans la compréhension de ces problèmes a été fait par [73] et [11] qui ont montré que dans le cas complètement chaotique on pouvait resommer l'ensemble des termes correspondant à de longues périodes car ces derniers contiennent une information redondante vis a vis de celle déjà présente dans les autres termes y compris les termes de Weyl [10]. Dans le cas intégrable, on peut formuler des conditions exactes de quantification de type WKB en mettant à profit là aussi des propriétés de résurgence [72, 74]. De façon générale, à cause des propriétés analytiques des fonctions mises en jeu, il faut s'attendre à ce qu'un sous-ensemble des trajectoires classiques code, de manière le plus souvent très subtile et mal comprise, une partie de l'information totale. Comme l'ont d'ailleurs montré Balian et Bloch [6, §3,§4 et §12], l'inclusion de solutions complexes aux équations classiques dans les sommes (6) permet de retrouver semiclassiquement sinon toute, une bonne partie de l'information quantique pour des valeurs arbitraires de $\hbar$.

Cette information peut s'exprimer sous la forme de nombreuses propriétés a priori très profondément ancrées au niveau quantique. C'est le cas notamment de l'effet tunnel qui par définition reste inaccessible à une approche purement classique. Pour retrouver les effets qui bien qu'exponentiellement petits jouent souvent un rôle déterminant, on peut comprendre pourquoi les formules habituelles de Gutzwiller sont insuffisantes : Elles ne contiennent pas de termes décroissant exponentiellement avec $\hbar$ de façon explicite. En revanche l'inclusion de trajectoires complexes permet de décrire correctement l'effet tunnel et reste souvent le seul moyen de le calculer

[4]En toute rigueur il faut tenir compte de la présence des caustiques du flot dans l'espace de configuration ce qui a pour conséquence de modifier les conditions telles qu'elles sont écrites en (2) [40].

effectivement. Si la formulation WKB permettait déjà de retrouver semiclassiquement l'effet tunnel pour un degré de liberté [45, §50], sa généralisation à de plus grandes dimensions reste délicate surtout en présence de chaos [17, 69, 25, 26, et leurs références.]Pour des travaux récents dans ce domaine on pourra consulter.

D'autres effets quantiques sans analogue classique font l'objet de nombreuses recherches semiclassiques. Les phénomènes ondulatoires liés à la diffraction [55, 59]On pourra par exemple consulter, entrent dans cette catégorie ainsi que le déphasage des fonctions d'onde lors d'une variation adiabatique des paramètres classiques pilotant un système, par exemple constitué des électrons externes d'une molécule dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer. Ce déphasage d'abord étudié quantiquement et systématisé par Berry n'est compris classiquement que dans le cas de systèmes intégrables. Peu de travaux [61, 38] encore concernent l'étude de la phase de Berry pour des systèmes génériquement chaotiques. Cependant dans de nombreux cas, une approximation semiclassique apparaît comme le seul moyen possible de calculer explicitement ces phases.

Les succès des approches semiclassiques a suscité l'espoir d'élargir plus encore leurs domaines d'application, par exemple en sortant du cadre des systèmes liés et en essayant de décrire des propriétés attachées aux phénomènes de diffusion [66, 29]. Les motivations ont des origines très diverses puisque l'on touche alors aussi bien aux mécanismes réactionnels entre molécules [51] qu'aux problèmes de conduction dans les solides. Dans ce dernier cas, la nature du désordre joue un rôle crucial et notamment en ce qui concerne des phénomènes mal expliqués comme la localisation [33, et ses références]. Comme l'effet tunnel cette dernière semble en profond désaccord avec la prédiction classique. La confrontation entre les méthodes actuelles permettant de comprendre et de prédire la localisation [22, Part one: Classical chaos and quantum localisation] et le point de vue semiclassique [63, 64] apparaît donc comme très prometteur. En outre les progrès de la physique des matériaux semiconducteurs ont permis la réalisation expérimentale de potentiels à bords durs à l'échelle mésoscopique rendant ainsi possible la construction de billards électroniques bidimensionnels dont les applications technologiques sont prometteuses. De façon générale, les méthodes semiclassiques s'appliquent naturellement aux systèmes mésoscopiques puisque l'on entend par là des objets dont l'échelle est, d'une part, suffisamment petite (de l'ordre du micron) pour que les effets ondulatoires gouvernent leur comportement mais, d'autre part, suffisamment grande devant l'échelle atomique. [Le cours des Houches [1] fournit un éventail très complet de la physique mésoscopique].

Depuis peu, s'est ouvert un autre domaine de prédilection pour les démarches semiclassiques. En effet le développement de la physique atomique à très basse température permet de travailler avec des systèmes cohérents assez grands (de l'ordre de 10^8 atomes pour fixer les idées) dont on contrôle raisonnablement la dynamique. Les atomes froids fournissent alors un moyen particulièrement adapté pour mieux comprendre et tester les idées semiclassiques [62, et ses références].

Il reste, on le constate, beaucoup à faire concernant l'application des méthodes semiclassiques en chaos quantique. L'étude des connexions les liant à d'autres approches tout aussi fructueuses comme la théorie des matrices aléatoire mérite d'être encore plus approfondie [16], en particulier à la suite des travaux récents [2, et ses références].

Le passage à un nombre de degrés de liberté supérieur à celui considéré habituellement revêt également un intérêt particulier puisque l'on connaît mal l'analogue quantique de la réduction de Poincaré [14, 60]. En outre, il serait intéressant entre-autre, d'étudier les implications quantiques, si elles existent, de la diffusion d'[4]. On ignore aussi dans quelle mesure les empreintes que peut laisser le chaos classique en théorie quantique des champs pourraient être pertinentes.

References

[1] Eric Akkermans, Gilles Montambaux, J.-L. Pichard, and Jean Zinn-Justin, editors. *Mesoscopic quantum physics*, Amsterdam, 1995. Les Houches, école d'été de physique théorique 1994, session LXI, North-Holland.

[2] A. V. Andreev, B. D. Simons, O. Agam, and B. L. Altshuler. Semiclassical field theory approach to quantum chaos. preprint, 1996.

[3] Vladimir I. Arnold. Small denominators and the problem of stability of motion in classical and celestial mechanics. *Russian Math. Surveys*, 18:85–191, 1963. (Reprinted in [47]).

[4] Vladimir I. Arnold. Instability of dynamical systems with several degrees of freedom. *Soviet Math. Dokl.*, 5:581–585, 1964. (Reprinted in [47]).

[5] Vladimir I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, volume 60 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1978.

[6] Roger Balian and Claude Bloch. Distribution of eigenfrequencies for the wave equation in a finite domain. III. eigenfrequency density oscillations. *Ann. Physics*, 69(1):76–160, 1972.

[7] Heinrich P. Baltes and Eberhard R. Hilf. *Spectra of Finite Systems.* Bibliographisches Institut-Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1976.

[8] Michael V. Berry. Regular and irregular motion (Jorna, S. ed.). In Jorna Siebe, editor, *Topics in Nonlinear Dynamics — A Tribute to Sir Edward Bullard*, volume 46, pages 16–120, 1978. Reprinted in [47].

[9] Michael V. Berry. Some quantum-to-classical asymptotics. In Giannoni et al. [34], pages 251–303.

[10] Michael V. Berry and Christopher J. Howls. High orders of the Weyl expansion for quantum billiards: resurgence of periodic orbits, and the Stokes phenomenon. *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, 447:527–555, 1994.

[11] Michael V. Berry and Jonathan P. Keating. A rule for quantizing chaos ? *J. Phys. A*, 23:4839–4849, 1990.

[12] Michael V. Berry and Michael Tabor. Closed orbits and the regular bound spectrum. *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, 349:101–123, 1976.

[13] Michael V. Berry and Michael Tabor. Calculating the bound spectrum by path summation in action-angle variables. *J. Phys. A*, 10(3):371–379, 1977.

[14] Eugene B. Bogomolny. Semiclassical quantization of multidimensional systems. *Nonlinearity*, 5:805–866, 1992.

[15] Eugene B. Bogomolny. Introduction to models on constant negative curvature surfaces. In Oppo et al. [53], pages 1–47.

[16] Eugene B. Bogomolny and Jonathan P. Keating. Gutzwiller's trace formula and spectra statistics: Beyond the diagonal approximation. *Phys. Rev. Lett.*, 77(2):1472–1475, 1996.

[17] O. Bohigas, D. Boosé, R. Egydio de Carvalho, and V. Marvulle. Quantum tunneling and chaotic dynamics. *Nuclear Phys. A*, 560:197–210, 1993.

[18] Oriol Bohigas. Random matrices and chaotic dynamics. In Giannoni et al. [34], pages 87–199.

[19] M. Brack. The physics of simple metal clusters: self-consistent jellium model and semiclassical approaches. *Rev. Modern Phys.*, 65(3):677–732, 1993.

[20] Léon Brillouin. La mécanique ondulatoire de schrödinger; une méthode générale de résolution par approximations successives. *C. R. Acad. Sci. Paris*, 183:24–26, 1926. (in french).

[21] Léon Brillouin. Remarques sur la mécanique ondulatoire. *Le Journal de Physique et le Radium*, Série VI – Tome VII(12):353–368, 1926. (in french).

[22] Giulio Casati and Boris Chirikov, editors. *Quantum chaos — Between order and disorder.* Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[23] Giulio Casati and Boris Chirikov, editors. *Rendiconti della scuola internazionale di fisica Enrico Fermi — CXIX Corso: Quantum chaos; 1991.* North-Holland, Amsterdam, 1995.

[24] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Mécanique quantique.* enseignement des sciences. Hermann, Paris, 1980. (2 vol.).

[25] Stephen C. Creagh. Tunnelling in multidimensional systems. *J. Phys. A*, 27:4969–4993, 1994.

[26] Stephen C. Creagh and Niall D. Whelan. Complex periodic orbits and tunnelling in chaotic potentials. submitted to Phys. Rev. Lett., 1996.

[27] Dominique Delande. Chaos in atomic and molecular physics. In Giannoni et al. [34], pages 665–726.

[28] Paul A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics.* The international series of monographs in physics. Oxford University Press, London, 1958a. (4th edition).

[29] E. Doron and U. Smilansky. Semiclassical quantization of chaotic billiards: a scattering theory approach. *Nonlinearity*, 5:1055–1084, 1992.

[30] J.-P. Eckmann and C.-A. Pillet. Spectral duality for planar billiards. *Commun. Math. Phys.*, 1995. in press.

[31] Albert Einstein. Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein. *Verh. Deutsch. Phys. Ges.*, 19:82–92, 1917. (in german) It is discussed and partially translated in [56].

[32] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals.* International series in pure and applied physics. McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1965.

[33] Shmuel Fishman. Quantum localisation. In Oppo et al. [53], pages 115–151.

[34] M.-J. Giannoni, André Voros, and Jean Zinn-Justin, editors. *Chaos et Physique Quantique — Chaos and Quantum Physics*, Amsterdam, 1991. Les Houches, école d'été de physique théorique 1989, session LII, North-Holland.

[35] Martin C. Gutzwiller. Periodic orbits and classical quantization conditions. *J. Math. Phys.*, 12:343–358, 1971.

[36] Eric J. Heller. Wavepacket dynamics and quantum chaology. In Giannoni et al. [34], pages 547–663.

[37] Max Jammer. *The Conceptual Development of Quantum Mechanics.* McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1966.

[38] Christopher Jarzynski. Geometric phases and anholonomy for a class of chaotic classical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 74(10):1732–1735, 1995.

[39] Harold Jeffreys. On certain approximate solutions of linear differential equations of the second order. *Proc. London Math. Soc. (2nd ser.)*, 23:428–436, 1925.

[40] Joseph B. Keller. Corrected Bohr-Sommerfeld quantum conditions for nonseparable systems. *Ann. Physics*, 4:180–188, 1958.

[41] M. Kollmann, J. Stein, U. Stoffregen, H.-J. Stöckmann, and B. Eckhardt. Periodic orbit analysis of billiard level dynamics. *Phys. Rev. E*, 49:R1–R4, 1994.

[42] A. N. Kolmogorov. General theory of dynamical systems and classical dynamics. In Johan C. H. Gerretsen and Johannes De Groot, editors, *Proceedings of the international congress of mathematicians, Amsterdam–1954 (vol. 1)*, pages 315–333, Amsterdam, 1954. North-Holland, Noordhoff. (In russian. See appendix for an english translation.).

[43] A. N. Kolmogorov. On conservation of conditionally periodic motions under small perturbations of the hamiltonian. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 98:527–530, 1954. (In russian. For an english presentation see [42]).

[44] H. A. Kramers. Wellenmechanik und halbzahlige quantisierung. *Zts. f. Phys.*, 39:828–840, 1926. (in german).

[45] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics (non relativistic theory)*, volume 3 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, Oxford, 1958.

[46] A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman. *Regular and Stochastic Motion*, volume 38 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1983.

[47] R. S. Mackay and J. D. Meiss. *Hamiltonian Dynamical Systems*. Adam Hilger, Bristol and Philadelphia, 1987.

[48] V. P. Maslov and M. V. Fedoriuk. *Semi-Classical Approximation in Quantum Mechanics*. D. Reidel publishing company, Dordrecht: Holland, 1981.

[49] Albert Messiah. *Mécanique Quantique (2 vol.)*. Dunod, Paris, 1964. English translation: North-Holland (Amsterdam).

[50] Kenneth R. Meyer and Glen H. Hall. *Introduction to Hamiltonian Dynamical Systems and the N-Body Problem*, volume 90 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1992.

[51] William H. Miller. Semiclassical theory of atom-diatomcollisions: Path integrals and the classical S-matrix. *J. Chem. Phys.*, 53(5):1949–1959, 1970.

[52] Jürgen k. Moser. On invariant curves of area-preserving mappings of an annulus. *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen Math.-Phys. Kl. II*, 1:1–20, 1962.

[53] G.-L. Oppo, S. M. Barnett, E. Riis, and M. Wilkinson, editors. *Quantum Dynamics of simple systems*, Bristol and Philadelphia, 1996. The forty fourth scottish universities summer school in physics, Stirling, August 1994, Scottish Universities Summer School & Institute of Physics Publishing.

[54] Alfredo M. Ozorio de Almeida and John H. Hannay. Resonant periodic orbits and the semiclassical energy spectrum. *J. Phys. A*, 20:5873–5883, 1987.

[55] Nicolas Pavloff and Charles Schmit. Diffractive orbits in quantum billiards. *Phys. Rev. Lett.*, 75:61–64, 1995. erratum in Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 3779.

[56] Ian C. Percival. Semiclassical theory of bound states. *Adv. Chem. Phys.*, 36:1–61, 1977.

[57] Askold Perelomov. *Generalized Coherent States and Their Applications*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, New York, 1986.

[58] Henri Poincaré. *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste, 3 vol.* Dover Publications, Inc., New York, 1957. (First edition Gauthier-Villars, Paris, 1892).

[59] H. Primack, H. Schanz, U. Smilansky, and I. Ussishkin. Penumbra diffraction in the quantization of dispersing billiards. *Phys. Rev. Lett.*, 76:1615–1618, 1996.

[60] Tomaž Prosen. General quantum surface-of-section method. *J. Phys. A*, 28:4133–4155, 1995.

[61] Jonathan M. Robbins and Michael V. Berry. The geometric phase for chaotic systems. *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, 436:631–661, 1992.

[62] J. C. Robinson, C. F. Bharucha, K. W. Madison, F. L. Moore, B. Sundaram, S. R. Wilkinson, and M. G. Raizen. Can a single-pulse standing wave induce chaos in atomic motion. *Phys. Rev. Lett.*, 76(18):3304–3307, 1996.

[63] Rainer Scharf and Bala Sundaram. Periodic orbit origin to dynamical localization. *Phys. Rev. Lett.*, 76(26):4907–4910, 1996.

[64] Rainer Scharf and Bala Sundaram. Quantum chaos and the limit of semiclassical prediction. *Phys. Rev. Lett.*, 77(2):263–266, 1996.

[65] Lawrence S. Schulman. *Techniques and Applications of Path Integration.* John Wiley and sons, Inc., New York, 1981.

[66] Uzy Smilansky. The classical and quantum theory of chaotic scattering. In Giannoni et al. [34], pages 371–441.

[67] V. M. Strutinsky, A. G. Magner, S. R. Ofengenden, and T. Døssing. Semiclassical interpretation of the gross-shell structure in deformed nuclei. *Z. Phys. A*, 283:269–285, 1977.

[68] Steven Tomsovic, Maurice Grinberg, and Denis Ullmo. Semiclassical trace formulas of near-integrable systems: Resonances. *Phys. Rev. Lett.*, 75(25):4346–4349, 1995.

[69] Steven Tomsovic and Denis Ullmo. Chaos-assisted tunneling. *Phys. Rev. E*, 50(1):145–161, 1994.

[70] B. L. Van Der Waerden. *Sources of quantum mechanics*, volume 5 of *Classics of science*. Dover Publications, Inc., New York, 1967.

[71] J. H. Van Vleck. The correspondance principle in the statistical interpretation of quantum mechanics. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 14:178–188, 1928.

[72] André Voros. The return of the quartic oscillator. the complex wkb method. *Ann. Inst. H. Poincaré. Phys. Théor.*, 39(3):211–338, 1983.

[73] André Voros. Spectral zeta functions. In N. Kurokawa and T. Sunada, editors, *Zeta functions in geometry (Proceedings, Tokyo 1990)*, volume 21, pages 327–358, 1992.

[74] André Voros. Exact quantization condition for anharmonic oscillators (in one dimension). *J. Phys. A*, 27:4653–4661, 1994.

[75] Hans A. Weidenmüller. Random matrix theory: Introduction and overview. preprint, 1995.

[76] Gregor Wentzel. Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingungen für die Zwecke der Wellenmechanik. *Zts. f. Phys.*, 38:518–529, 1926. (in german).

[77] D. Wintgen, K. Richter, and G. Tanner. The semiclassical helium atom. *Chaos*, 2:19–32, 1992. Reprinted in [23].

[78] Maciej Wojtkowski. Principles for the design of billiards with nonvanishing Lyapounov exponents. *Comm. Math. Phys.*, 105:391–414, 1986. reprinted in [47].

[79] Wojciech H. Zurek. Decoherence and the transition from quantum to classical. *Phys. Today*, 44(10):36–44, 1991.