

Fonction de Green

DAVY Leo, KAOUAH Mohammed, ABRIBAT Clement

May 22, 2017

1 Photo-émission et fonction de Green

Afin de sonder la matière une méthode expérimentale très efficace est la spectrométrie. Cependant la prédiction théorique des spectres est très difficile à calculer. En effet les bandes que l'on peut observer sur un spectre correspondent à un aperçu des niveaux d'énergie de l'ensemble des particules qui composent la matière étudiée. Or la matière étant composée de particules fondamentales dont on connaît les lois qui les régissent d'une manière très efficace, ces lois correspondent au modèle standard de la physique des particules. Le modèle standard de la physique des particules correspond au regroupement de l'électrodynamique quantique, l'interaction faible, l'interaction électrofaible et la chromodynamique quantique (interaction forte).

En l'état de la physique il semble donc que l'on puisse prédire un spectre de photoémission. On pourrait donc calculer la fonction d'onde suivante qui interagit avec N particules :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \tag{1}$$

Cependant dans la matière on a $N \sim 10^{23}$ qui est un nombre très grand avec lequel on aurait beaucoup de mal à faire des calculs. Il apparaît donc nécessaire de trouver une autre manière de prédire un spectre de photoémission.

1.1 Bases de la photoémission

Nous nous intéressons ici à la photoémission et à la photoémission inverse. Il s'agit de deux phénomènes physiques qui sont liés à l'interaction entre la matière et la lumière.

On peut se représenter la photoémission comme étant un photon qui est envoyé dans de la matière, cette matière va donc éjecter un électron. La photoémission inverse est très similaire, elle correspond à un électron qui est envoyé dans de la matière puis un photon est émis depuis cette matière. L'intérêt de la photoémission et de la photoémission inverse est que les photons ou électrons émis par la matière pourront être mesurés. Les mesures de ces photons ou électrons nous renseigneront donc directement grâce aux relations de la physique quantique, par exemple le fait que les paquets d'énergie soient quantifiés de manière fixe, en connaissant l'énergie des photons ou électrons émis on peut directement déduire les niveaux d'énergie des particules de la matière sondée.

1.2 Étude brève de l'expression formelle de la fonction de Green

Toutes les équations suivantes seront écrites dans le système d'unité atomique.

$$\hbar = m = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1 \quad (2)$$

On peut écrire l'équation de Green de la manière suivante.

2 Introduction à l'équation de Dyson

La fonction de Green peut être écrite à l'aide de l'équation de Dyson.

$$G = G_0 + G_0 \Sigma[G] G \quad (3)$$

Avec G la fonction de Green qui représente le système, G_0 le système à l'état initial qui est mesuré, et Σ une fonctionnelle qui correspond à l'énergie propre du système. Σ s'écrit :

$$\Sigma[G] = \Sigma_{Hartree}[G] + \Sigma_{XC}[G] \quad (4)$$

$$\Sigma_{Hartree}[G] = \int \rho(r) \frac{1}{|r - r'|} dr' \quad (5)$$

avec v_c qui correspond à l'interaction Coulombienne, $\rho(r)$ correspond à la densité électronique, et r et r' qui correspondent aux positions des particules

en interaction.

$$v_c = \frac{1}{|r - r'|} \quad (6)$$

$$\Sigma_{XC} = G\Gamma[G]v_c \quad (7)$$

$$\Gamma[G] = 1 + G^2 \frac{d\Sigma_{XC}[G]}{dG} \Gamma[G] \quad (8)$$

Cependant ces équations dépendant de fonctionnelles de G elles sont trop compliquées à résoudre. Nous allons donc étudier le système en dimension spatio-temporelle nulle et renommer les variables comme suit pour plus de clarté.

$$\Sigma \longrightarrow S \quad (9)$$

$$G \longrightarrow y \quad (10)$$

$$\Gamma \longrightarrow g \quad (11)$$

$$v_c \longrightarrow u \quad (12)$$

3 Dyson

Dans cette section nous allons étudier les solutions de l'équation suivante en fonction de $g(y)$

$$y = y_0 + y_0 S(y) y \quad (13)$$

3.1 Étude de l'équation de Dyson avec $g^0(y)$

On définit :

$$g^0(y) = 1 \quad (14)$$

D'où:

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \quad (15)$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \quad (16)$$

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} u y g^0(y) = \frac{1}{2} u y \quad (17)$$

13 devient donc :

$$y = y_0 + y_0 \left(\frac{-1}{2} u y \right) y \quad (18)$$

$$y = y_0 - y_0 \frac{1}{2} u y^2 \quad (19)$$

Il suffit donc de résoudre une équation du degré 2.

$$\Delta = 1 + 2uy_0^2 \quad (20)$$

On à donc $\Delta > 0$, on obtient donc les deux solutions suivantes.

$$y_1 = \frac{1 + \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \quad (21)$$

Et

$$y_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \quad (22)$$

On peut réécrire les solutions précédentes de la manière suivante:

$$y_1/y_0 = Y_1 = \frac{-1 - \sqrt{1 + 2V}}{V} \quad (23)$$

Et

$$y_2/y_0 = Y_2 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2V}}{V} \quad (24)$$

Avec $V = uy_0^2$. Cependant une seul de ces solutions correspond à une solution physique. Afin de l'identifier on fait tendre l'interaction Coulombienne vers 0, donc $V \rightarrow 0$ et on fait un développement limité à l'ordre 1 de la racine carrée. Ce qui correspond au développement limité suivant avec $a = \frac{1}{2}$

$$(1 + x)^a = 1 + ax \quad (25)$$

On obtient donc

$$Y_1 = \frac{-1 - 1 - \frac{1}{2}2V}{V} = \frac{-2 - V}{V} \quad (26)$$

$$Y_2 = \frac{-1 + 1 + \frac{1}{2}2V}{V} = \frac{V}{V} = 1 \quad (27)$$

Or, lorsque l'on fait tendre l'interaction Coulombienne vers 0, c'est à dire que les électrons n'interagissent plus entre eux, alors ajouter ou enlever un électron au système ne va pas modifier le système. Donc on à $y_0 = y$, c'est dire, $\frac{y_2}{y_0} = 1$. On peut donc conclure que la solution physique de l'équation de Dyson est Y_2 lorsque $g^0(y) = 1$.

Cependant considérer $g^0(y) = 1$ est une approximation, on va donc essayer de résoudre l'équation de Dyson de manière plus précise dans la section suivante

3.2 Résolution de l'équation de Dyson avec $g^1(y)$

On considère dans cette section que

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \quad (28)$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \quad (29)$$

On étudie dans un premier temps $S_{XC}(y)$

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uyg(y) \quad (30)$$

Avec

$$g^1(y) = 1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy} \quad (31)$$

On combine les équations 30 et 31 :

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy(1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy}) \quad (32)$$

$$\frac{dS_{XC}(y)}{dy} = \frac{d(\frac{1}{2}uy)}{y} = \frac{1}{2}u \quad (33)$$

Or $g(y_0) = 1$,donc on combine maintenant les équations 32 et 33.

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \quad (34)$$

On obtient donc avec 28:

$$S(y) = -uy + \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \quad (35)$$

Finalement, on obtient l'équation suivante que l'on va chercher à simplifier afin de la résoudre.

$$y = -\frac{1}{2}uy_0y^2 + \frac{1}{4}u^2y_0y^4 + y_0 \quad (36)$$

$$\frac{1}{4}u^2y_0y^4 - \frac{1}{2}uy_0y^2 - y + y_0 = 0 \quad (37)$$

On multiplie l'équation précédente par

$$\frac{4}{u^2y_0}$$

On obtient :

$$y^4 - \frac{2}{u}y^2 - \frac{4y}{y_0u^2} + \frac{4}{u^2} = 0 \quad (38)$$

Posons

$$U = \frac{2}{u}$$

$$y^4 - Uy^2 - U^2 \frac{y}{y_0} + U^2 = 0 \quad (39)$$

Il faut donc maintenant résoudre 39 Afin de résoudre cette équation de degré 4 nous allons utiliser la méthode de Lagrange.

4 Résolution de l'équation de Dyson

4.1 Résolution avec la méthode générale

L'équation 39 peut s'écrire :

$$ay^4 + by^3 + cy^2 + dy + e = 0 \quad (40)$$

Avec $a = 1, b = 0, c = -U, d = \frac{-U^2}{y_0}, e = U^2$. On va donc calculer Δ afin d'identifier la forme des solutions.

$$\begin{aligned} \Delta = & 256a^3e^3 - 192a^2bde^2 - 128a^2c^2e^2 + 144a^2cd^2e - 27a^2d^4 \\ & + 144ab^2ce^2 - 6ab^2d^2e - 80abc^2de + 18abcd^3 + 16ac^4e \\ & - 4ac^3d^2 - 27b^4e^2 + 18b^3cde - 4b^3d^3 - 4b^2c^3e + b^2c^2d^2 \end{aligned}$$

$$\Delta = 256a^3e^3 - 128a^2c^2e^2 + 144a^2cd^2e - 27a^2d^4 + 16ac^4e - 4ac^3d^2 \quad (41)$$

$$\Delta = 256U^6 - 128U^6 - \frac{144U^7}{y_0^2} - 27\frac{U^8}{y_0^4} + 16U^6 + 4\frac{U^7}{y_0^2} \quad (42)$$

$$\Delta = U^6(144 - \frac{144U}{y_0^2} - 27\frac{U^2}{y_0^4} + 4\frac{U}{y_0^2}) \quad (43)$$

$$P = 8ac - 3b^2 = -8c = 8U \quad (44)$$

$$\Delta_0 = c^2 - 3bd + 12ae = U^2 + 12U^2 = 13U^2 \quad (45)$$

$$D = 64a^3e - 16a^2c^2 + 16ab^2c - 16a^2bd - 3b^4 \quad (46)$$

$$D = 64U^2 - 16U^2 = 48U^2 \quad (47)$$

On fait l'hypothèse que $\Delta > 0$ et d'après 44 et 47 on à $D > 0$ et $P > 0$. On en déduit donc qu'il y a deux paires de racines complexes conjuguées non réelles.

$$p = \frac{8ac - 3b^2}{8a^2} = c = -U \quad (48)$$

$$q = \frac{b^3 - 4abc + 8a^2d}{8a^3} = d = \frac{-U^2}{y_0} \quad (49)$$

On obtient ensuite

$$S = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-2}{3}p + \frac{1}{3}(Q + \frac{\Delta_0}{Q})} \quad (50)$$

Où :

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3}}{2}} \quad (51)$$

Avec :

$$\Delta_1 = 2c^3 - 9bcd + 27b^2e + 27ad^2 - 72ace = -2U^3 + 27\frac{U^4}{y_0^2} + 72U^3 \quad (52)$$

Or

$$\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3 = -27\Delta \quad (53)$$

On peut donc écrire 51

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{-27\Delta}}{2}} \quad (54)$$

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + U^3 \sqrt{-27 * (144 - \frac{144U}{y_0^2} - 27\frac{U^2}{y_0^4} + 4\frac{U}{y_0^2})}}{2}} \quad (55)$$

$$Q = U \sqrt[3]{\frac{-2U + 27\frac{U}{y_0^2} + 72 + \sqrt{-27 * (144 - \frac{140U}{y_0^2} - 27\frac{U^2}{y_0^4})}}{2}} \quad (56)$$

$$S = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2U}{3} + \frac{1}{3}(Q + \frac{\Delta_0}{Q})} \quad (57)$$

Finalement on obtient les différentes racines :

$$y_{1,2,3,4} = \pm S \pm \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 - 2p + \frac{q}{S}} \quad (58)$$

$$y_{1,2,3,4} = \pm S \pm \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \quad (59)$$

$$\begin{cases} y_1 = -S - \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \\ y_2 = -S + \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \\ y_3 = +S - \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \\ y_4 = +S + \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \end{cases} \quad (60)$$

4.2 Résolution avec la méthode de Lagrange

Donc 39 est de la forme :

$$y^4 + ay^2 + by + c \quad (61)$$

Avec

$$a = -U$$

et

$$b = -\frac{U^2}{y_0}$$

et

$$c = u^2$$

et on notera α, β, γ et δ ses solutions. On pose d, e et f les solutions de l'équation suivante :

$$y^3 - ay^2 - 4cy - b^2 + 4ac = 0 \quad (62)$$

On cherche donc les solutions d'une equation du troisième degré. On pose

$$y = z - U/3$$

On obtient donc l'équation :

$$(z - \frac{U}{3})^3 + U(z - \frac{U}{3})^2 - 4U^2(z - \frac{U}{3}) + \frac{U^2}{y_0} - 4U^3 = 0 \quad (63)$$

$$z^3 - z^2U + zU^2 - \frac{U^3}{27} + Uz^2 - 2\frac{zU^2}{3} + \frac{U^3}{9} - 4U^2z + \frac{4}{3}U^3 + \frac{U^2}{y_0} - 4U^3 = 0 \quad (64)$$

$$z^3 - z\frac{11}{3}U^2 - u^3\frac{70}{27} + \frac{U^2}{y_0} = 0 \quad (65)$$

On peut écrire 65 sous la forme :

$$z^3 + pz + q = 0 \quad (66)$$

Avec

$$p = -\frac{11}{3}U^2$$

et

$$q = -u^3\frac{70}{27} + \frac{U^2}{y_0}$$

On peut donc poser :

$$z^2 + 27qz - 27p^3 = 0 \quad (67)$$

avec z_+ et z_- les solutions de cette équation. On trouve donc

$$\Delta = (27q)^2 + 4 * 27p^3$$

$$\Delta = \frac{U^5 * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U^5 + 27^2U^4}{y_0^2} - 4 * 11^3U^6 \quad (68)$$

On obtient donc :

$$z_+ = \frac{U^370 + \frac{27U^2}{y_0} + \sqrt{\Delta}}{2} \quad (69)$$

$$z_- = \frac{U^370 + \frac{27U^2}{y_0} - \sqrt{\Delta}}{2} \quad (70)$$

On a aussi

$$\sqrt{\Delta} = \sqrt{\frac{U^5 * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U^5 + 27^2U^4}{y_0^2} - 4 * 11^3U^6} \quad (71)$$

$$\sqrt{\Delta} = \frac{U^2}{y_0} \sqrt{U * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U + 27^2 - 4 * 11^3 * U^2 * y_0^2} = \frac{U^2}{y_0} \sqrt{A} \quad (72)$$

On pose maintenant k (respectivement l) comme étant la racine cubique de z_+ (respectivement z_-). Avec $j = e^{i\frac{2\pi}{3}}$

$$\begin{cases} d = \frac{1}{3}(k + l + U) \\ e = \frac{1}{3}(kj^2 + lj + U) \\ f = \frac{1}{3}(kj + lj^2 + U) \end{cases} \quad (73)$$

$$\begin{cases} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})}e^{i\frac{4\pi}{3}} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})}e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}}) \\ f = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})}e^{i\frac{2\pi}{3}} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})}e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{cases} \quad (74)$$

$$\begin{cases} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = \frac{U}{3}(((35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))e^{i4\pi})^{\frac{1}{3}} + ((35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})))e^{i2\pi})^{\frac{1}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}}) \\ f = \frac{U}{3}(((35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))e^{i2\pi})^{\frac{1}{3}} + ((35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A}))e^{i4\pi})^{\frac{1}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{cases} \quad (75)$$

Or

$$e^{i4\pi} = e^{i2\pi} = 1 \quad (76)$$

Et

$$j^2 + j = e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} = -1 \quad (77)$$

$$\begin{cases} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = f = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{(35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))} + \sqrt[3]{(35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A}))} - 1) \end{cases} \quad (78)$$

Par ailleurs, on a :

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma + \delta = 0 \\ \alpha\beta + \gamma\delta = d \\ \alpha\gamma + \beta\delta = e \\ \alpha\delta + \beta\gamma = f \end{cases} \iff \begin{cases} \alpha + \beta + \gamma + \delta = 0 \\ (\alpha + \beta)(\gamma + \delta) = e + f \\ (\alpha + \gamma)(\beta + \delta) = d + f \\ (\alpha + \delta)(\beta + \gamma) = d + e \end{cases} \quad (79)$$

On déduit ensuite des équations de ce système :

$$\alpha + \beta = \rho_1, \gamma + \delta = -\rho_1 \text{ avec } \rho_1 = \sqrt{-e - f}$$

$\alpha + \delta = \rho_2$, $\beta + \gamma = -\rho_2$ avec $\rho_2 = \sqrt{-d - e}$
 $\alpha + \gamma = \rho_3$, $\beta + \delta = -\rho_3$ avec $\rho_3 = \sqrt{-d - f}$ On a donc :

$$\rho_1 = \sqrt{-e - f} = \sqrt{-2e} = \sqrt{\frac{-2U}{3}(\sqrt[3]{(35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))} + \sqrt[3]{(35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A}))} - 1)} \quad (80)$$

$$\rho_2 = \sqrt{-d - e} = \sqrt{\frac{-2U}{3}(\sqrt[3]{(35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))} + \sqrt[3]{(35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A}))})} \quad (81)$$

$$\rho_3 = \sqrt{-d - f} = \sqrt{-d - e} = \rho_2 \quad (82)$$

On déduit maintenant:

$$\alpha = \frac{1}{2}(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3) = \frac{1}{2}(\rho_1 + 2\rho_2) \quad (83)$$

$$\beta = \frac{1}{2}(\rho_1 - \rho_2 - \rho_3) = \frac{1}{2}(\rho_1 - 2\rho_2) \quad (84)$$

$$\gamma = \frac{1}{2}(-\rho_1 - \rho_2 + \rho_3) = \frac{1}{2}(-\rho_1) \quad (85)$$

$$\delta = \frac{1}{2}(-\rho_1 + \rho_2 - \rho_3) = \gamma \quad (86)$$

On a donc $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ qui sont les solutions de 39.