

Approximation de la fonction de Green par méthode autocohérente

DAVY Leo, KAOUAH Mohammed, ABRIBAT Clément

Tuteur : A.J. Berger

L1 Parcours Spécial, Université Paul Sabatier, Toulouse

May 25, 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.

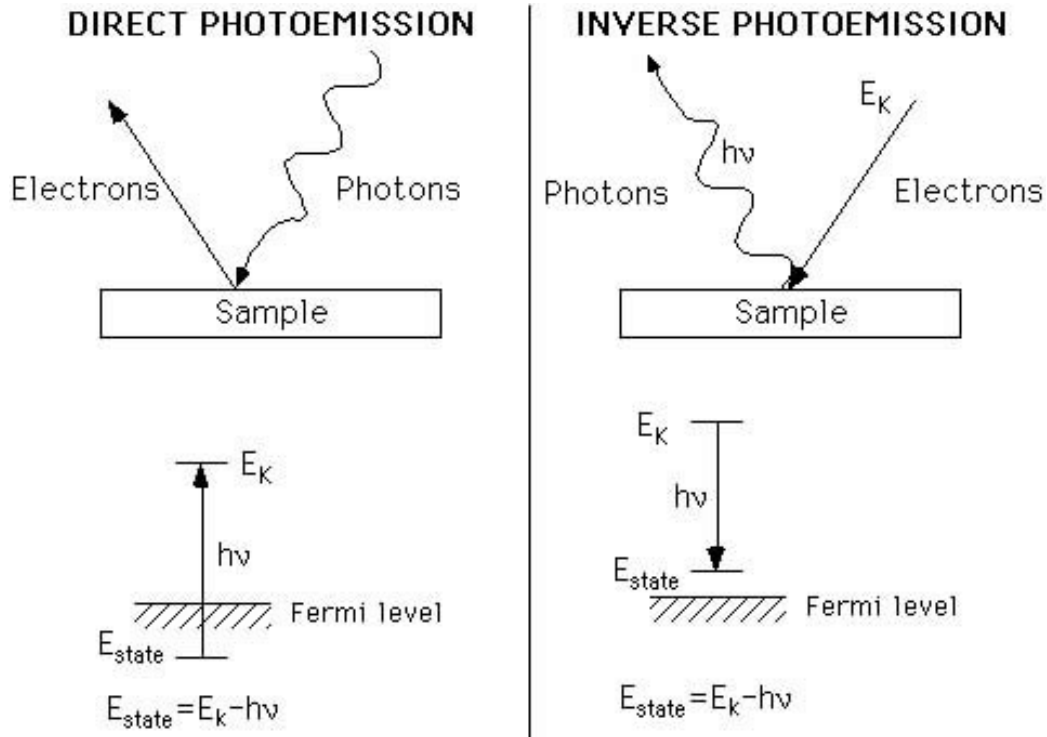


Figure 1: Schéma de la photoémission et de la photoémission inverse [1]

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 partic-

ules 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:

$$\langle \Psi_0 | T \Psi_H(r_1, t_1) \Psi_H^\dagger(r_2, t_2) | \Psi_0 \rangle = G(\vec{r}_1 t_1, \vec{r}_2 t_2) \quad (3)$$

Ψ_H^\dagger et Ψ_0 correspondent respectivement une "destruction" et une "construction" d'un électron Avec T la "time-ordering function" définie comme suit :

$$TA(r_1)B(r_2) := \theta(t_1 - t_2)A(r_1)B(r_2) \pm \theta(t_2 - t_1)B(r_2)A(r_1) \quad (4)$$

Avec θ la fonction de Heaviside définie comme suit :

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (5)$$

Or les opérateurs Ψ de l'équation (3) étant trop compliqués à calculer dans des systèmes réels il est nécessaires de simplifier la fonction de Green. Nous allons donc essayer de la simplifier tout en essayant de conserver un maximum de précision dans le reste de ce rapport.

2 Dyson

2.1 Introduction à l'équation de Dyson

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

$$G = G_0 + G_0 \Sigma[G] G \quad (6)$$

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 :

$$\Sigma[G] = \Sigma_{Hartree}[G] + \Sigma_{XC}[G] \quad (7)$$

$$\Sigma_{Hartree}[G] = \int \rho(r) \frac{1}{|r - r'|} dr' \quad (8)$$

avec v_c qui correspond au potentiel coulombien, $\rho(r)$ correspond a la densité électronique, et $r - r'$ qui correspond l'interaction coulombienne.

$$v_c = \frac{1}{|r - r'|} \quad (9)$$

$$\Sigma_{XC} = G\Gamma[G]v_c \quad (10)$$

$$\Gamma[G] = 1 + G^2 \frac{d\Sigma_{XC}[G]}{dG} \Gamma[G] \quad (11)$$

Cependant ces équations dependant de fonctionnelles de G elles sont trop compliquées à résoudre. Nous allons donc étudier le système en dimension spatio-temporelle nulle, c'est à dire dans un point, et renommer les variables comme suit pour plus de clarté.

$$\Sigma \longrightarrow S \quad (12)$$

$$G \longrightarrow y \quad (13)$$

$$\Gamma \longrightarrow g \quad (14)$$

$$v_c \longrightarrow u \quad (15)$$

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

$$y = y_0 + y_0 S(y) y \quad (16)$$

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

On définit :

$$g^0(y) = 1 \quad (17)$$

D'où:

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \quad (18)$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \quad (19)$$

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} u y g^0(y) = \frac{1}{2} u y \quad (20)$$

16 devient donc :

$$y = y_0 + y_0 \left(\frac{-1}{2} u y \right) y \quad (21)$$

$$y = y_0 - y_0 \frac{1}{2} u y^2 \quad (22)$$

Il suffit donc de résoudre une équation du degré 2.

$$\Delta = 1 + 2u y_0^2 \quad (23)$$

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

$$y_1 = \frac{1 + \sqrt{1 + 2u y_0^2}}{-u y_0} \quad (24)$$

Et

$$y_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 2u y_0^2}}{-u y_0} \quad (25)$$

On peut réécrire les solutions précédentes de la manière suivante:

$$y_1/y_0 = Y_1 = \frac{-1 - \sqrt{1 + 2V}}{V} \quad (26)$$

Et

$$y_2/y_0 = Y_2 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2V}}{V} \quad (27)$$

Avec $V = u y_0^2$. 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 $a = \frac{1}{2}$, lorsque $x \rightarrow 0$.

$$(1 + x)^a = 1 + ax \quad (28)$$

On obtient donc

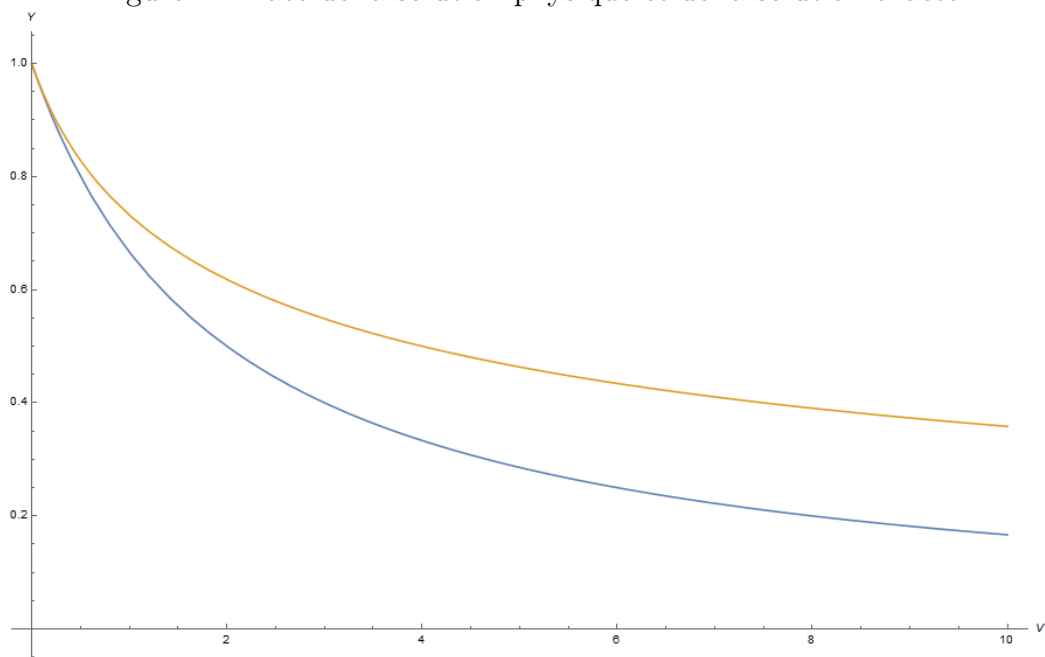
$$Y_1 = \frac{-1 - 1 - \frac{1}{2}2V}{V} = \frac{-2 - V}{V} \quad (29)$$

$$Y_2 = \frac{-1 + 1 + \frac{1}{2}2V}{V} = \frac{V}{V} = 1 \quad (30)$$

Or, lorsque l'on fait tendre le potentiel Coulombien 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

Figure 2: Tracé de la solution physique et de la solution exacte



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

On considère dans cette section que

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \quad (31)$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \quad (32)$$

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

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uyg(y) \quad (33)$$

Avec

$$g^1(y) = 1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy} \quad (34)$$

On combine les équations 33 et 34 :

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy(1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy}) \quad (35)$$

$$\frac{dS_{XC}(y)}{dy} = \frac{d(\frac{1}{2}uy)}{y} = \frac{1}{2}u \quad (36)$$

On combine maintenant les équations 35 et 36.

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \quad (37)$$

On obtient donc avec 31:

$$S(y) = -uy + \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \quad (38)$$

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

$$y = -\frac{1}{2}uy_0y^2 + \frac{1}{4}u^2y_0y^4 + y_0 \quad (39)$$

$$\frac{1}{4}u^2y_0y^4 - \frac{1}{2}uy_0y^2 - y + y_0 = 0 \quad (40)$$

On divise l'équation précédente par

$$y_0$$

On obtient :

$$-\frac{1}{2}y^2u + \frac{1}{4}u^2y^4 - \frac{y}{y_0} + 1 = 0 \quad (41)$$

Où:

$$-\frac{1}{2}y_0^2\frac{y^2}{y_0^2}u + \frac{1}{4}u^2y_0^4\frac{y^4}{y_0^4} - \frac{y}{y_0} + 1 = 0 \quad (42)$$

Posons

$$Y = \frac{y}{y_0}$$

et

$$V = uy_0^2$$

On obtient

$$-\frac{1}{2}VY^2 + \frac{1}{4}V^2Y^4 - Y + 1 = 0 \quad (43)$$

Il faut donc maintenant résoudre 43

3 Résolution de l'équation de Dyson

3.1 Résolution avec la méthode générale

Afin de résoudre (44) nous allons utiliser la méthode générale [3].

$$\frac{1}{4}V^2Y^4 - \frac{1}{2}VY^2 - Y + 1 = 0 \quad (44)$$

Avec

$$V = uy_0^2 \quad (45)$$

Et

$$Y = \frac{y}{y_0} \quad (46)$$

L'équation 44 peut s'écrire :

$$ay^4 + by^3 + cy^2 + dy + e = 0 \quad (47)$$

Avec $a = \frac{1}{4}V^2, b = 0, c = -\frac{1}{2}V, d = -1, e = 1$.

On va donc calculer le discriminant Δ afin d'identifier la forme des solutions.

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

$$\Delta = 256a^3e^3 - 128a^2c^2e^2 + 144a^2cd^2e - 27a^2d^4 + 16ac^4e - 4ac^3d^2 \quad (48)$$

$$\Delta = 2V^6 - 5V^5 - \frac{27}{16}V^4 + \frac{1}{8}V^6 \quad (49)$$

$$P = 8ac - 3b^2 = -V^3 \quad (50)$$

$$\Delta_0 = c^2 - 3bd + 12ae = \frac{13}{4}V^2 \quad (51)$$

$$D = 64a^3e - 16a^2c^2 + 16ab^2c - 16a^2bd - 3b^4 \quad (52)$$

$$D = V^6 \quad (53)$$

$\Delta < 0$ et d'après 50 et 53 on à $D > 0$ et $P < 0$. On en déduit donc qu'il y a deux racines réelles et deux racines complexes

$$p = \frac{8ac - 3b^2}{8a^2} = \frac{-2}{V} \quad (54)$$

$$q = \frac{b^3 - 4abc + 8a^2d}{8a^3} = \frac{-4}{V^2} \quad (55)$$

On obtient ensuite

$$S = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-2}{3}p + \frac{1}{3}(Q + \frac{\Delta_0}{Q})} \quad (56)$$

Où :

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3}}{2}} \quad (57)$$

Avec :

$$\Delta_1 = 2c^3 - 9bcd + 27b^2e + 27ad^2 - 72ace = \frac{V^2}{4}(-V + 27 + 36V) \quad (58)$$

$$\Delta_1 = \frac{V^2}{4}(35V + 27) \quad (59)$$

Or

$$\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3 = -27\Delta \quad (60)$$

On peut donc écrire 57

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{-27\Delta}}{2}} \quad (61)$$

$$Q = \frac{1}{\sqrt[3]{2}} \sqrt[3]{V^2 \left(\frac{V^6}{16} (35V^2 + 70 * 27 * V + 27^2) + \sqrt{-27(2V^2 - 5V - \frac{27}{16} + \frac{1}{8}V^2)} \right)} \quad (62)$$

$$S = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4}{3V} + \frac{1}{3} \left(Q + \frac{\Delta_0}{Q} \right)} \quad (63)$$

Finalement on obtient les différentes racines :

$$y_{1,2,3,4} = \pm S \pm \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 - 2p + \frac{q}{S}} \quad (64)$$

$$y_{1,2,3,4} = \pm S \pm \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \quad (65)$$

$$\begin{cases} y_1 = -S - \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\ y_2 = -S + \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\ y_3 = +S - \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\ y_4 = +S + \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \end{cases} \quad (66)$$

3.2 Résolution avec Mathematica

Dans cette partie nous allons nous étudier la fonction de Green à l'aide du logiciel de calcul formel Mathematica. Tout d'abord nous pouvons vérifier les racines obtenues précédemment pour l'équation 44. Nous obtenons ainsi

les résultats suivants :

$$\begin{aligned}
Y_{1,2,3,4} = & \pm \frac{1}{2} \left(\frac{4}{3V} + \frac{26}{3(27V^2 + 35V^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{27V^4 + 70V^5 - 36V^6})^{1/3}} \right. \\
& \left. + \frac{2(27V^2 + 35V^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{27V^4 + 70V^5 - 36V^6})^{1/3}}{3V^2} \right)^{\frac{1}{2}} \\
& \pm \frac{1}{2} \left(\frac{8}{3V} - \frac{26}{3(27V^2 + 35V^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{27V^4 + 70V^5 - 36V^6})^{1/3}} \right. \\
& \left. - \frac{2(27V^2 + 35V^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{27V^4 + 70V^5 - 36V^6})^{1/3}}{3V^2} \right)^{\frac{1}{2}} \\
& \left. V^2 \sqrt{\frac{4}{3V} + \frac{26}{3(27V^2 + 35V^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{27V^4 + 70V^5 - 36V^6})^{1/3}} + \frac{2(27V^2 + 35V^3 + 3\sqrt{3}\sqrt{27V^4 + 70V^5 - 36V^6})^{1/3}}{3V^2}} \right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \quad (67)$$

Ces résultats correspondent bien à ceux obtenus précédemment nous allons donc chercher à obtenir la (ou les) solution(s) physiques. Nous allons procéder de la même manière que avec $g^0(y)$. En effet nos racines correspondent à $Y = \frac{y}{y_0}$ donc lorsque le potentiel coulombien tend vers 0 alors on devrait avoir $Y \rightarrow 1$. En calculant les limites à l'aide de Mathematica nous obtenons les résultats suivant.

$$\lim_{V \rightarrow 0} Y_1 = -\infty - \infty i \quad (68)$$

$$\lim_{V \rightarrow 0} Y_2 = -\infty + \infty i \quad (69)$$

$$\lim_{V \rightarrow 0} Y_3 = 1 \quad (70)$$

$$\lim_{V \rightarrow 0} Y_4 = +\infty \quad (71)$$

On a donc deux solutions complexes et deux solutions réelles comme on avait pu le déterminer en calculant Δ , D et P , ce ne seront donc pas des solutions physiques à dl'équation de Dyson. Parmi les solutions réelles on voit que Y_3 converge vers 1, c'est donc la solution physique du système. Afin d'étudier

Figure 3: Tracé des quatre solutions, $Y_N = f_N(V)$

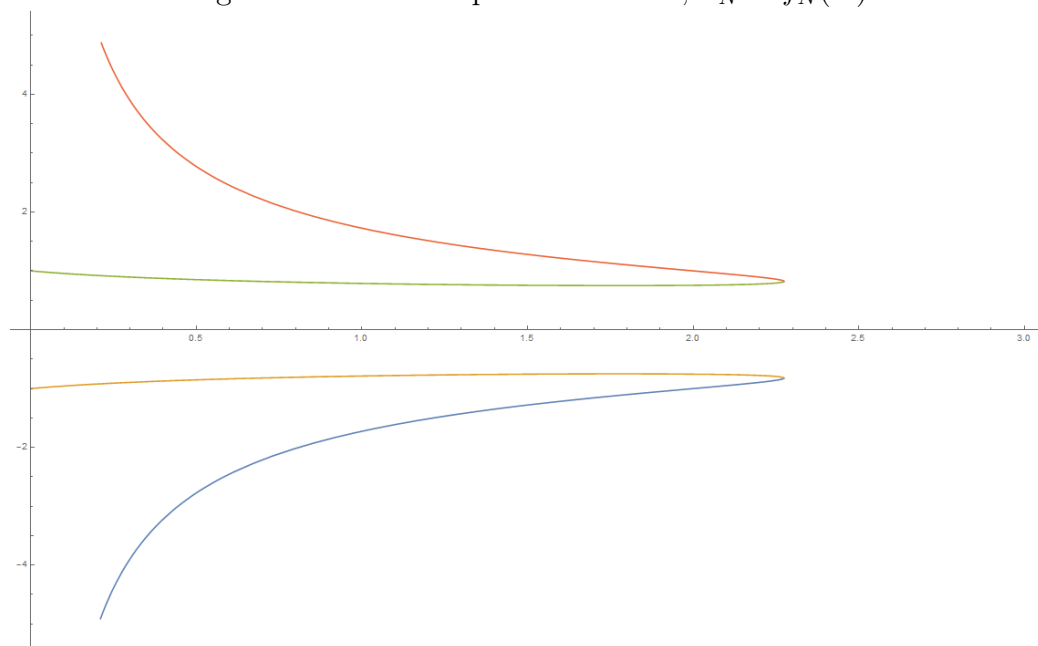
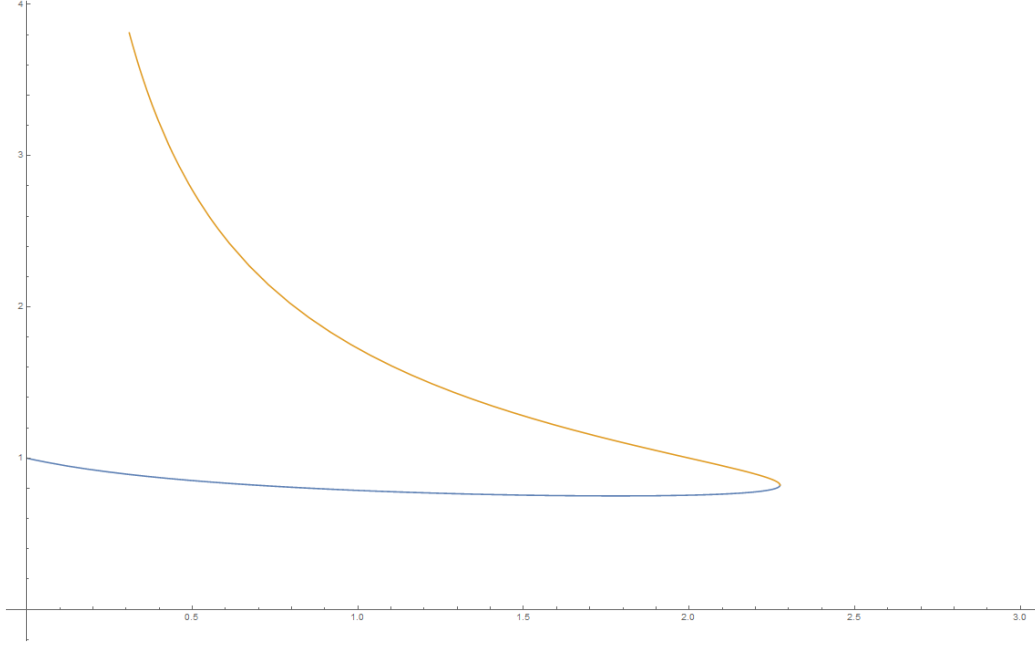


Figure 4: Tracé des deux solutions réelles, $Y_N = f_N(V)$



les résultats de manière qualitative (Figure 3) nous allons maintenant étudier les représentations graphique des quatre solutions.

On a S_1 en bleu, S_2 en orange, S_3 en vert et S_4 en rouge (Figure 3). On observe que les solutions complexes et réelles sont symétriques par rapport à l'axe des abscisses.

Nous allons maintenant nous intéresser plus particulièrement aux solutions réelles (Figure 4).

Nous pouvons ainsi constater que la solution physique est quasiment constante et avec une pente faible, alors que la solution non physique a une pente plus importante et diverge en $+\infty$ lorsque $V \rightarrow 0$.

4 Conclusion

En nous intéressant à la fonction de Green dans un point nous avons résolu l'équation de Dyson par méthode auto-cohérente. Néanmoins, cette méthode présente de nombreux inconvénients car comme nous l'avons remarqué nous

ne faisons que nous rapprocher de la solution exacte de l'équation de Dyson en faisant plusieurs itérations, l'équation augmentant de degré à chaque itération. Le problème est qu'il existe plusieurs solutions et qu'il peut être difficile de déterminer la solution physique. Il apparaît donc nécessaire d'utiliser d'autres méthodes afin d'étudier la fonction de Green.

References

- [1] Mathéo Gatti. “Thèse”. PhD thesis.
- [2] Trancart Nicolas. “Calcul de spectre de photoémission:approximation pour la fonction de Green”. MA thesis.
- [3] “Quartic function, https://en.wikipedia.org/wiki/Quartic_function”. In: *Wikipedia* ().
- [4] Cyril SAUSSOL and Arjan Berger. “Calcul analytique de l'équation temporelle de l'équation de Dyson de la fonction de Green un corps”. MA thesis.
- [5] Adrian Stan et al. “Unphysical and physical solutions in many-body theories: from weak to strong correlation”. In: *New Journal of Physics* (2015).
- [6] Walter Tarantino et al. “The self-consistent Dyson equation and self-energy functionals: failure or new opportunities?” In: ().
- [7] Jianqiang Zhou. “Progress in the theoretical description of photoemission in small systems : a model study”. MA thesis. ens de Cachan.