

Fonction de Green et équation de Dyson

ABRIBAT Clément DAVY Léo KAOUAH Mohamed

L1 Parcours spécial

Soutenance Projet, 2017

1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- Photoémission et photoémission inverse
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- Résolution dans une première approximation
- Résolution dans une seconde approximation

1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- Photoémission et photoémission inverse
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- Résolution dans une première approximation
- Résolution dans une seconde approximation

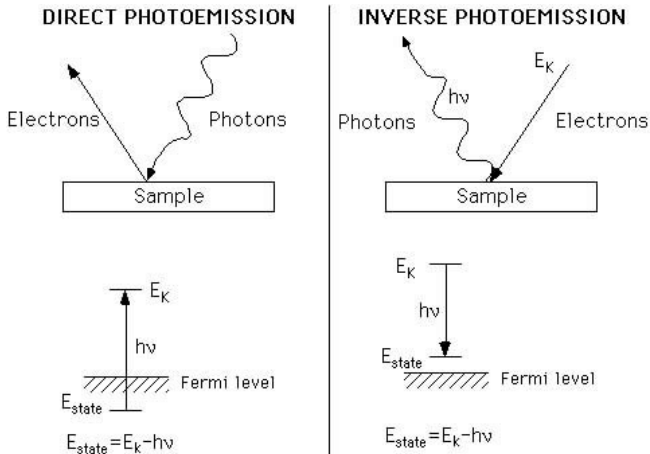
1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- **Photoémission et photoémission inverse**
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- Résolution dans une première approximation
- Résolution dans une seconde approximation

Figure: Schéma photoémission et photoémission inverse



1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- Photoémission et photoémission inverse
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- Résolution dans une première approximation
- Résolution dans une seconde approximation

Fonction d'onde avec N corps :

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

$$\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i) \quad (2)$$

Dans les solides étudiés il y a environ 10^{23} corps.

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

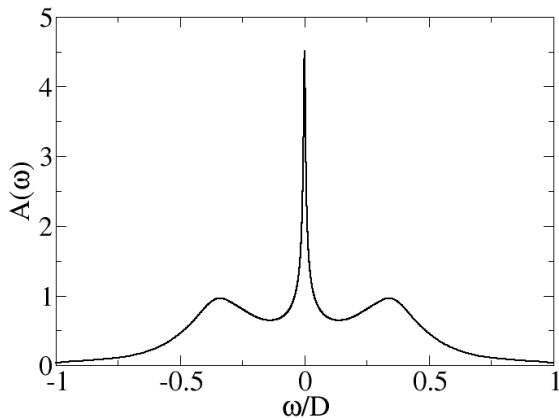
Ψ_H^\dagger et Ψ_0 correspondent respectivement une "destruction" et une "construction" d'un électron Avec T la "time-ordering function" définie comme suit :

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

Avec θ la fonction de Heaviside définie comme suit :

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

Figure: Spectre obtenu après résolution de l'équation de Dyson



$$A = \frac{1}{\pi} \text{Im}(G) \quad (6)$$

1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- Photoémission et photoémission inverse
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- Résolution dans une première approximation
- Résolution dans une seconde approximation

$$G = G_0 + G_0 \Sigma[G] G \quad (7)$$

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 :

$$\Sigma[G] = \Sigma_{Hartree}[G] + \Sigma_{XC}[G] \quad (8)$$

$$\Sigma_{Hartree}[G] = \int \rho(r) \frac{1}{|r - r'|} dr' \quad (9)$$

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

$$v_c = \frac{1}{|r - r'|} \quad (10)$$

$$\Sigma_{XC} = G\Gamma[G]v_c \quad (11)$$

$$\Gamma[G] = 1 + G^2 \frac{d\Sigma_{XC}[G]}{dG} \Gamma[G] \quad (12)$$

$$\Sigma \longrightarrow S \quad (13)$$

$$G \longrightarrow y \quad (14)$$

$$\Gamma \longrightarrow g \quad (15)$$

$$v_c \longrightarrow u \quad (16)$$

L'équation de Dyson devient donc

$$y = y_0 + y_0 S(y) y \quad (17)$$

1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- Photoémission et photoémission inverse
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- **Résolution dans une première approximation**
- Résolution dans une seconde approximation

Étude avec $g^0 = 1$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \quad (18)$$

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uyg^0(y) = \frac{1}{2}uy \quad (19)$$

$$y = y_0 + y_0\left(\frac{-1}{2}uy\right)y \quad (20)$$

$$y = y_0 - y_0\frac{1}{2}uy^2 \quad (21)$$

$$\Delta = 1 + 2uy_0^2 \quad (22)$$

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

$$y_1 = \frac{1 + \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \quad (23)$$

Et

$$y_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \quad (24)$$

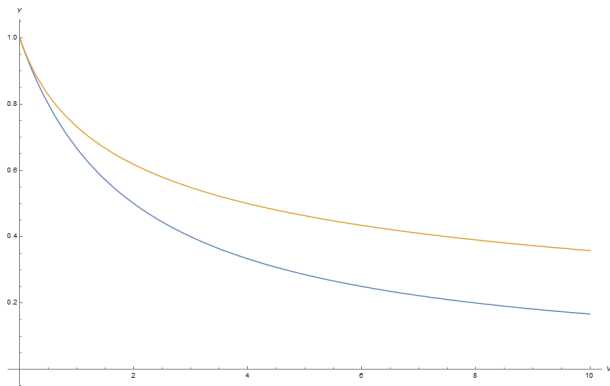
On peut réécrire les solutions précédentes de la manière suivante:

$$y_1/y_0 = Y_1^0 = \frac{-1 - \sqrt{1 + 2V}}{V} \quad (25)$$

Et

$$y_2/y_0 = Y_2^0 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 2V}}{V} \quad (26)$$

Figure: Comparaison entre la solution exacte (bleu) et Y_2^0 (orange)



1 Intérêt de la fonction de Green

- Spectroscopie
- Photoémission et photoémission inverse
- Étude avec Ψ

2 Résolution

- Présentation de l'équation de Dyson
- Résolution dans une première approximation
- Résolution dans une seconde approximation

$$g^1(y) = 1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy} \quad (27)$$

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy(1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy}) \quad (28)$$

$$\frac{dS_{XC}(y)}{dy} = \frac{d(\frac{1}{2}uy)}{y} = \frac{1}{2}u \quad (29)$$

On combine maintenant les équations 28 et 29.

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \quad (30)$$

$$\frac{1}{4}u^2y_0y^4 - \frac{1}{2}uy_0y^2 - y + y_0 = 0 \quad (31)$$

$$-\frac{1}{2}VY^2 + \frac{1}{4}V^2Y^4 - Y + 1 = 0 \quad (32)$$

$$ay^4 + by^3 + cy^2 + dy + e = 0 \quad (33)$$

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

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

$$\Delta = 256a^3e^3 - 128a^2c^2e^2 + 144a^2cd^2e - 27a^2d^4 + 16ac^4e - 4ac^3d^2 \quad (34)$$

$$\Delta = 2V^6 - 5V^5 - \frac{27}{16}V^4 + \frac{1}{8}V^6 \quad (35)$$

$$P = 8ac - 3b^2 = -V^3 \quad (36)$$

$$D = 64a^3e - 16a^2c^2 + 16ab^2c - 16a^2bd - 3b^4 \quad (37)$$

$$D = V^6 \quad (38)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_1^1 = -S - \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\ Y_2^1 = -S + \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\ Y_3^1 = +S - \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\ Y_4^1 = +S + \frac{1}{2} \sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \end{array} \right. \quad (39)$$

Figure: Tracé des deux solutions réelles, $Y_N^1 = f_N(V)$

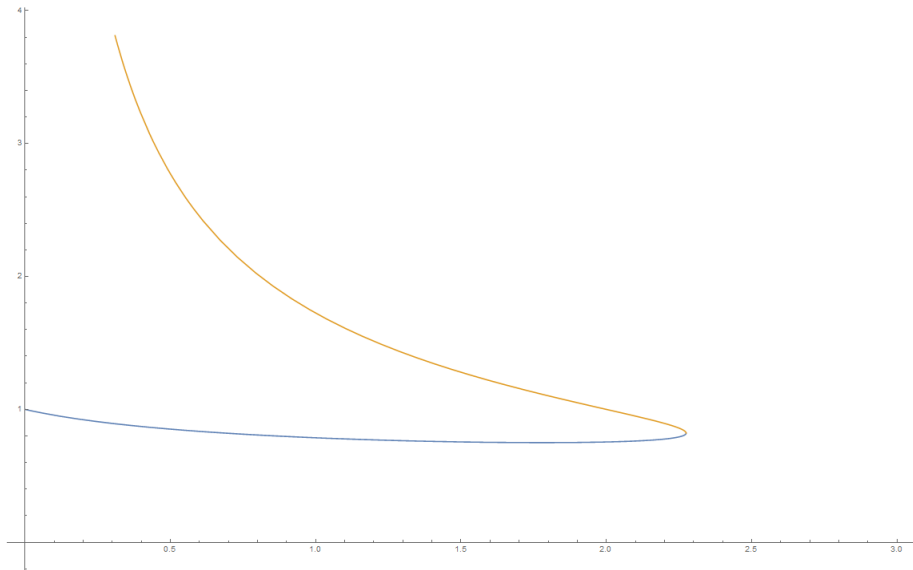
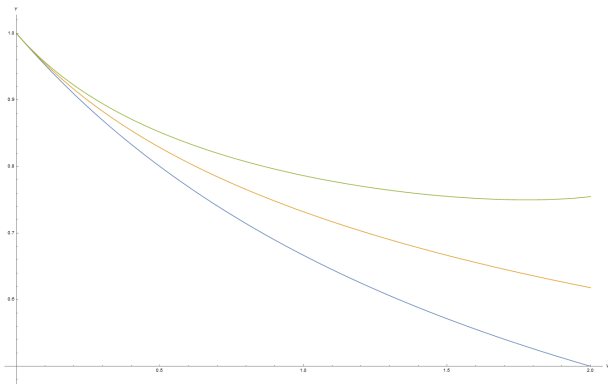




Figure: Comparaison entre la solution exacte (bleu), Y_2^0 (orange) et Y_3^1 (vert)



For Further Reading I

-  A. Author.
Handbook of Everything.
Some Press, 1990.
-  S. Someone.
On this and that.
Journal of This and That, 2(1):50–100, 2000.