Fonction de Green et équation de Dyson

ABRIBAT Clément DAVY Léo KAOUAH Mohamed

L1 Parcours spécial

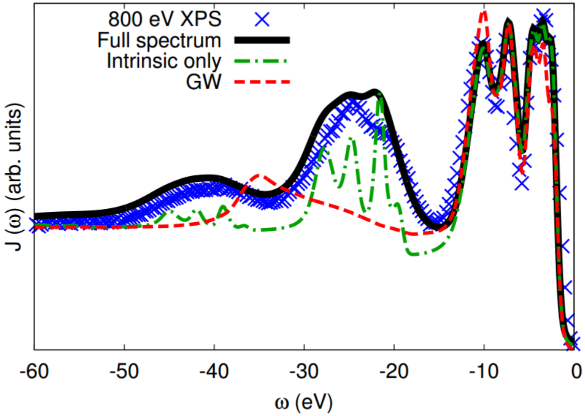
Soutenance Projet, 2017

Outline

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

Plan

Figure: Spectroscopie comparant les prédictions théoriques avec la fonction de Green et l'expérience

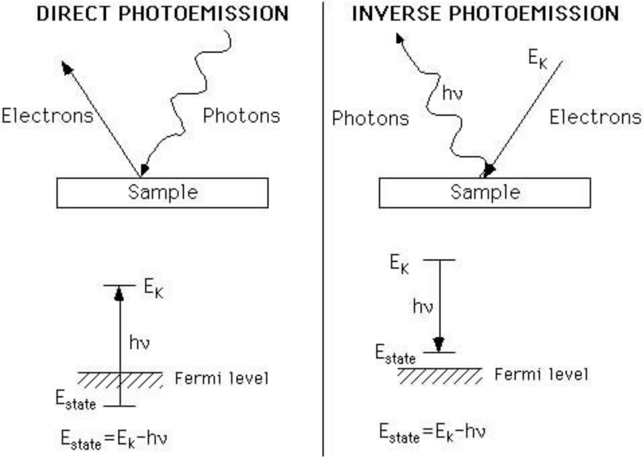


Plan

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 photoemission et photoemission inverse



Plan

Fonction d'onde avec N corps :

$$\Psi(\vec{r_1}, \vec{r_2}, ..., \vec{r_N}) \tag{1}$$

$$\vec{r_i} = (x_i, y_i, z_i) \tag{2}$$

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

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

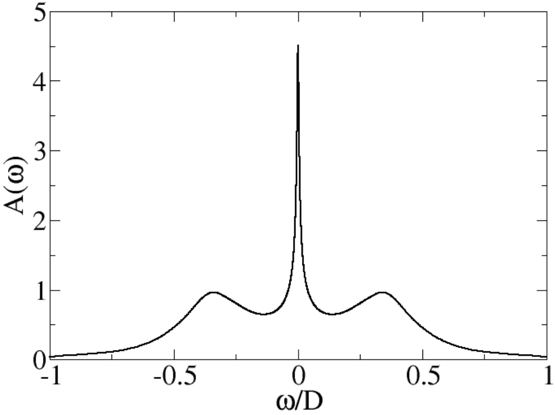
$\Psi_H^\dagger$ et Ψ_0 correspondent respectivement une "destruction" et une "construction" d'un électron Avec T la "time-ordering function" définie comme suit :

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

Avec θ la fonction de Heaviside définie comme suit :

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

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



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

Plan

$$G = G_0 + G_0\Sigma[G]G \tag{7}$$

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

$$\Sigma[G] = \Sigma_{Hartree}[G] + \Sigma_{XC}[G] \tag{8}$$

$$\Sigma_{Hartree}[G] = \int \rho(r) \frac{1}{\mid r - r' \mid} \mathrm{d}r' \tag{9}$$

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

$$v_c = \frac{1}{\mid r - r' \mid} \tag{10}$$

$$\Sigma_{XC} = G\Gamma[G]v_c \tag{11}$$

$$\Gamma[G] = 1 + G^2 \frac{\mathrm{d}\Sigma_{XC}[G]}{\mathrm{d}G}\Gamma[G] \tag{12}$$

$$\Sigma \longrightarrow S \tag{13}$$

$$G \longrightarrow y \tag{14}$$

$$\Gamma \longrightarrow g \tag{15}$$

$$v_c \longrightarrow u \tag{16}$$

L'équation de Dyson devient donc

$$y = y_0 + y_0 S(y) y \tag{17}$$

Plan

Étude avec $g^0 = 1$

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

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

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

$$y = y_0 - y_0\frac{1}{2}uy^2 \tag{21}$$

$$\Delta = 1 + 2uy_0^2 \tag{22}$$

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

$$y_1 = \frac{1 + \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \tag{23}$$

Et

$$y_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \tag{24}$$

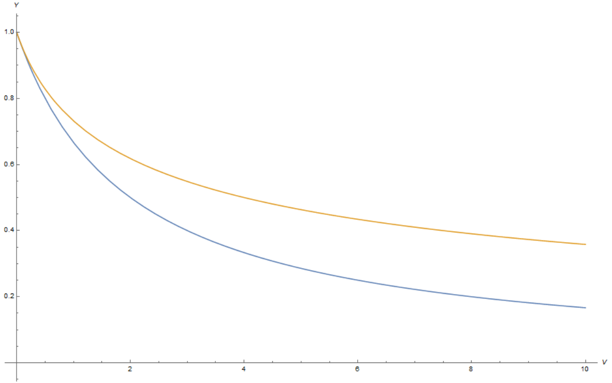
On peut réécrire les solutions précedentes de la manièresuivante:

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

Et

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

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



Plan

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

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

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

On combine maintenant les équations 28 et 29.

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

$$\frac{1}{4}u^2 y_0 y^4 - \frac{1}{2}u y_0 y^2 - y + y_0 = 0 \tag{31}$$

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

$$ay^4 + by^3 + cy^2 + dy + e = 0 \tag{33}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$
\begin{cases}
Y_1^1 = -S - \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\
Y_2^1 = -S + \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\
Y_3^1 = +S - \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}} \\
Y_4^1 = +S + \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + \frac{4}{V} - \frac{4}{V^2 S}}
\end{cases}
\tag{39}
$$

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

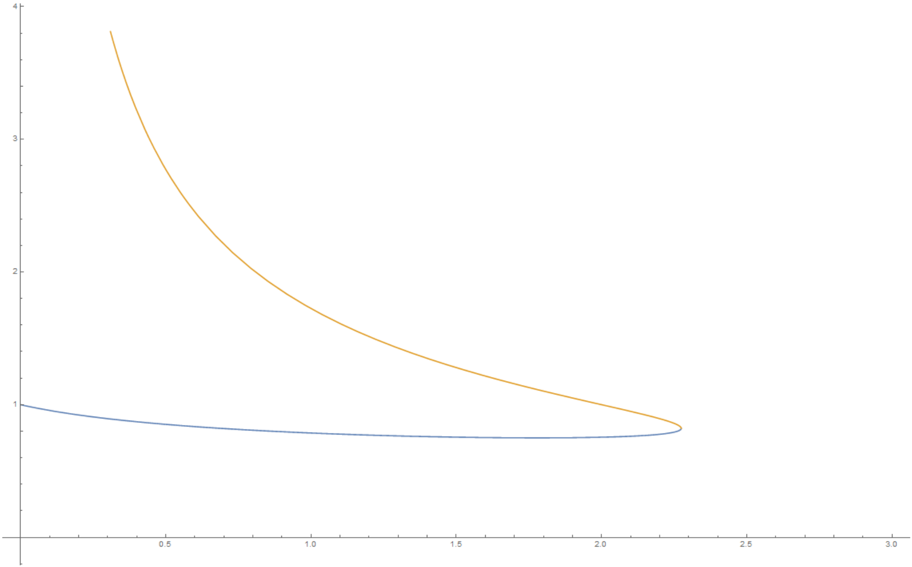


Figure: Comparaison entre la solution exacte (bleu), Y_2^0 (orange) et Y_3^1 (vert)