



Soutenance de thèse

Mardi 22 septembre 2015

Amphi Becquerel - 10h00

Igor RESHETNYAK

Computing optical properties and photo-emission spectra : a new starting point

The Bethe-Salpeter Equation (BSE) for the two-particle Green's function, based on the GW approximation to the self-energy, is a well established approach for accounting for excitonic effects in theoretical spectroscopy. However, in its current formulation it is both computationally heavy and displays cancellation effects not accounted for analytically. In this work, on the one hand, we study the possibility of deriving alternative equations for the two-particle Green's function and modifying the standard Bethe-Salpeter equation using insight from the Time-dependent Density Functional Theory in the Adiabatic Local Density Approximation (TDLDA). Furthermore, we compare these various new and old approaches to theoretical spectroscopy and discuss the importance of different ingredients contained in them. On the other hand we extend the ab-initio description of the spectral function to account for the interaction of quasiparticles and excitons, which allowed the description of photo-emission. This is achieved through the extension of the standard Bethe-Salpeter Equation and allows one to reproduce the available Coherent Inelastic X-ray Scattering results and make theoretical prediction for new ones. Moreover, we demonstrate the existence of exciton satellites, alongside the plasmon ones, in Photo-Emission Spectra of wide gap insulators.

Calcul des propriétés optiques et des spectres de photo-émission : un nouveau point de départ

L'équation de Bethe-Salpeter (BSE) pour la fonction de Green à deux particules, basée sur l'approximation GW pour la self-énergie, est une approche bien établie, qui permet de prendre en compte les effets excitoniques en spectroscopie théorique. Néanmoins, dans sa formulation actuelle elle est d'une part lourde du point de vue calculatoire et présente, d'autre part, des annulations, qui ne sont pas prises en compte analytiquement. Dans cette thèse, nous avons étudié, dans un premier temps, la possibilité de démontrer des équations alternatives pour la fonction de Green à deux particules et ainsi de modifier l'équation de Bethe-Salpeter, en particulier en utilisant des informations issues de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité Dépendante du Temps (TDDFT) dans l'Approximation de la Densité Locale Adiabatique (ALDA). Nous avons aussi comparé différentes approches anciennes et nouvelles à la spectroscopie théorique et discuté l'importance des différents ingrédients qu'elle contiennent. Dans un second temps, nous avons étendu le formalisme existant afin de prendre en compte l'interaction des quasiparticules et des excitons dans la description ab-initio de la fonction spectrale qui décrit par exemple la photo-émission. Nous avons pu le faire grâce à l'extension de l'équation de Bethe-Salpeter et cela nous a permis de reproduire les résultats expérimentaux de Coherent Inelastic X-ray Scattering (CIXS) et même de prédire et de suggérer de nouvelles expériences. Finalement, nous avons pu mettre en évidence l'existence des satellites excitoniques, au côté des satellites plasmoniques dans les spectres de photo-émission d'isolants.