

Fonction de Green

DAVY Leo, KAOUAH Mohammed, ABRIBAT Clement

May 18, 2017

1 Introduction l'équation de Dyson

La fonction de Green peut etre ecrite a l'aide de l'équation de Dyson.

$$G = G_0 + G_0 \Sigma[G] G \quad (1)$$

Avec G la fonction de Green qui represente le systme, G_0 le systeme a l'etat initial qui est mesure, et Σ une fonctionnelle qui correspond a l'energie propre du systeme. Σ s'ecrit :

$$\Sigma[G] = \Sigma_{Hartree}[G] + \Sigma_{XC}[G] \quad (2)$$

$$\Sigma_{Hartree}[G] = \int \rho(r) \frac{1}{|r - r'|} dr' \quad (3)$$

avec v_c qui correspond a l'interaction Coulombienne, $\rho(r)$ correspond a la densite electronique, et r et r' qui correspondent aux positions des particules en interaction.

$$v_c = \frac{1}{|r - r'|} \quad (4)$$

$$\Sigma_{XC} = G \Gamma[G] v_c \quad (5)$$

$$\Gamma[G] = 1 + G^2 \frac{d\Sigma_{XC}[G]}{dG} \Gamma[G] \quad (6)$$

Cependant ces equations dependant de fonctionnelles de G elles sont trop compliquees a resoudre. Nous allons donc etudier le systeme en dimension spatio-temporelle nulle et renommer les variables comme suit pour plus de clarte.

$$\Sigma \longrightarrow S \quad (7)$$

$$G \longrightarrow y \quad (8)$$

$$\Gamma \longrightarrow g \quad (9)$$

$$v_c \longrightarrow u \quad (10)$$

2 Dyson

$$y = y_0 + y_0 S(y) y \quad (11)$$

Et la solution

$$Y = \frac{1}{V} \sqrt{1 + 2V} \quad (12)$$

avec

$$V = uy_0^2 \quad (13)$$

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \quad (14)$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \quad (15)$$

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

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} uy g(y) \quad (16)$$

$$g(y) = 1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy} g(y_0) \quad (17)$$

On combine les equations 16 et 17 :

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} uy (1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy} g(y_0)) \quad (18)$$

$$\frac{dS_{XC}(y)}{dy} = \frac{d(\frac{1}{2} uy g(y_0))}{y} = \frac{1}{2} u g(y_0) \quad (19)$$

Or $g(y_0) = 1$,donc on combine maintenant les equations 18 et 19.

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} uy + \frac{1}{4} u^2 y^3 \quad (20)$$

On obtient donc avec 14:

$$S(y) = -uy + \frac{1}{2} uy + \frac{1}{4} u^2 y^3 \quad (21)$$

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

$$y = -\frac{1}{2}uy_0y^2 + \frac{1}{4}u^2y_0y^4 + y_0 \quad (22)$$

$$\frac{1}{4}u^2y_0y^4 - \frac{1}{2}uy_0y^2 - y + y_0 = 0 \quad (23)$$

On multiplie l'équation précédente par

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

On obtient :

$$y^4 - \frac{2}{u}y^2 - \frac{4y}{y_0u^2} + \frac{4}{u^2} = 0 \quad (24)$$

Posons

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

$$y^4 - Uy^2 - U^2\frac{y}{y_0} + U^2 = 0 \quad (25)$$

Il faut donc maintenant résoudre 25 Afin de résoudre cette équation de degré 4 nous allons utiliser la méthode de Lagrange.

3 Résolution de l'équation de Dyson

Donc 25 est de la forme :

$$y^4 + ay^2 + by + c \quad (26)$$

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 :

$$y^3 - ay^2 - 4cy - b^2 + 4ac = 0 \quad (27)$$

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

$$y = z - U/3$$

On obtient donc l'équation :

$$(z - \frac{U}{3})^3 + U(z - \frac{U}{3})^2 - 4U^2(z - \frac{U}{3}) + \frac{U^2}{y_0} - 4U^3 = 0 \quad (28)$$

$$z^3 - z^2U + zU^2 - \frac{U^3}{27} + Uz^2 - 2\frac{zU^2}{3} + \frac{U^3}{9} - 4U^2z + \frac{4}{3}U^3 + \frac{U^2}{y_0} - 4U^3 = 0 \quad (29)$$

$$z^3 - z\frac{11}{3}U^2 - u^3\frac{70}{27} + \frac{U^2}{y_0} = 0 \quad (30)$$

On peut écrire 30 sous la forme :

$$z^3 + pz + q = 0 \quad (31)$$

Avec

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

et

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

On peut donc poser :

$$z^2 + 27qz - 27p^3 = 0 \quad (32)$$

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

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

$$\Delta = \frac{U^5 * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U^5 + 27^2U^4}{y_0^2} - 4 * 11^3U^6 \quad (33)$$

On obtient donc :

$$z_+ = \frac{U^370 + \frac{27U^2}{y_0} + \sqrt{\Delta}}{2} \quad (34)$$

$$z_- = \frac{U^3 70 + \frac{27U^2}{y_0} - \sqrt{\Delta}}{2} \quad (35)$$

On a aussi

$$\sqrt{\Delta} = \sqrt{\frac{U^5 * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U^5 + 27^2 U^4}{y_0^2} - 4 * 11^3 U^6} \quad (36)$$

$$\sqrt{\Delta} = \frac{U^2}{y_0} \sqrt{U * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U + 27^2 - 4 * 11^3 * U^2 * y_0^2} = \frac{U^2}{y_0} \sqrt{A} \quad (37)$$

On pose maintenant k (respectivement l) comme étant la racine cubique de z_+ (respectivement z_-).

$$\begin{cases} d = \frac{1}{3}(k + l + U) \\ e = \frac{1}{3}(kj^2 + lj + U) \\ f = \frac{1}{3}(kj + lj^2 + U) \end{cases} \quad (38)$$

$$\begin{cases} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})}e^{i\frac{4\pi}{3}} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})}e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}}) \\ f = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})}e^{i\frac{2\pi}{3}} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})}e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{cases} \quad (39)$$

$$\begin{cases} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = \frac{U}{3}(((35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))e^{i4\pi})^{\frac{1}{3}} + ((35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A}))e^{i2\pi})^{\frac{1}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}}) \\ f = \frac{U}{3}(((35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A}))e^{i2\pi})^{\frac{1}{3}} + ((35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A}))e^{i4\pi})^{\frac{1}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{cases} \quad (40)$$

Or

$$e^{i4\pi} = e^{i2\pi} = 0 \quad (41)$$

$$\begin{cases} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = f = \frac{U}{3}(e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{cases} \quad (42)$$

On a

$$\rho_1 = \sqrt{-e - f} = \sqrt{-2e} \quad (43)$$

$$\rho_2 = \sqrt{-d - e} \quad (44)$$

$$\rho_3 = \sqrt{-d-f} = \sqrt{-d-e} = \rho_2 \quad (45)$$

$$\rho_1 = \sqrt{-\frac{2U}{3}(j^2+j)} = \sqrt{\frac{2U}{3}} \quad (46)$$

$$\delta = \frac{1}{2}(-\rho_1) = -\sqrt{\frac{2U}{3}} \quad (47)$$