Fonction de Green

DAVY Leo, KAOUAH Mohammed, ABRIBAT Clement

May 22, 2017

1 Introduction l'equation de Dyson

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

$$G = G_0 + G_0\Sigma[G]G \tag{1}$$

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 :

$$\Sigma[G] = \Sigma_{Hartree}[G] + \Sigma_{XC}[G] \tag{2}$$

$$\Sigma_{Hartree}[G] = \int \rho(r)\frac{1}{\mid r - r' \mid}\mathrm{d}r' \tag{3}$$

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

$$v_c = \frac{1}{\mid r - r' \mid} \tag{4}$$

$$\Sigma_{XC} = G\Gamma[G]v_c \tag{5}$$

$$\Gamma[G] = 1 + G^2\frac{\mathrm{d}\Sigma_{XC}[G]}{\mathrm{d}G}\Gamma[G] \tag{6}$$

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 et renommer les variables comme suit pour plus de clarté.

$$\Sigma \longrightarrow S \tag{7}$$

$$G \longrightarrow y \tag{8}$$

$$\Gamma \longrightarrow g \tag{9}$$

$$v_c \longrightarrow u \tag{10}$$

2 Dyson

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

$$y = y_0 + y_0 S(y) y \tag{11}$$

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

On définit :

$$g^0(y) = 1 \tag{12}$$

D'où:

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \tag{13}$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \tag{14}$$

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} uyg^0(y) = \frac{1}{2} uy \tag{15}$$

11 devient donc :

$$y = y_0 + y_0 (\frac{-1}{2} uy) y \tag{16}$$

$$y = y_0 - y_0 \frac{1}{2} uy^2 \tag{17}$$

Il suffit donc de résoudre une équation du degré 2.

$$\Delta = 1 + 2uy_0^2 \tag{18}$$

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

$$y_1 = \frac{1 + \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \tag{19}$$

Et

$$y_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 2uy_0^2}}{-uy_0} \tag{20}$$

On peut réécrire les solutions précedentes de la manièresuivante:

$$y_1/y_0 = Y_1 = \frac{-1-\sqrt{1+2V}}{V} \tag{21}$$

Et

$$y_2/y_0 = Y_2 = \frac{-1+\sqrt{1+2V}}{V} \tag{22}$$

Avec $V = uy_0^2$. Cependant une seul de ces solutions correspond à une solution physique. Afin de l'identifier on fait tendre l'intéraction Coulombienne vers 0, donc $V \to 0$ et on fait un développement limité à l'ordre 1 de la racine carrée. Ce qui correspond au développementlimité suivant avec a = $\frac{1}{2}$

$$(1+x)^a = 1 + ax \tag{23}$$

On obtient donc

$$Y_1 = \frac{-1-1-\frac{1}{2}2V}{V} = \frac{-2-V}{V} \tag{24}$$

$$Y_2 = \frac{-1+1+\frac{1}{2}2V}{V} = \frac{V}{V} = 1 \tag{25}$$

Or, lorsque l'on fait tendre l'intéraction Coulombiennevers 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

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

On considère dans cette section que

$$S(y) = S_{XC}(y) + S_{Hartree}(y) \tag{26}$$

$$S_{Hartree}(y) = -uy \tag{27}$$

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

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uyg(y) \tag{28}$$

Avec

$$g^1(y) = 1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy} \tag{29}$$

On combine les équations 28 et 29 :

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} uy(1 + y^2 \frac{dS_{XC}(y)}{dy}) \tag{30}$$

$$\frac{dS_{XC}(y)}{dy} = \frac{d(\frac{1}{2}uy)}{y} = \frac{1}{2}u \tag{31}$$

Or $g(y_0) = 1$,donc on combine maintenant les équations 30 et 31.

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \tag{32}$$

On obtient donc avec 26:

$$S(y) = -uy + \frac{1}{2}uy + \frac{1}{4}u^2y^3 \tag{33}$$

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

$$y = -\frac{1}{2}uy_0y^2 + \frac{1}{4}u^2y_0y^4 + y_0 \tag{34}$$

$$\frac{1}{4}u^2y_0y^4 - \frac{1}{2}uy_0y^2 - y + y_0 = 0 \tag{35}$$

On multiplie l'équation précedente par

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

On obtient :

$$y^4 - \frac{2}{u}y^2 - \frac{4y}{y_0u^2} + \frac{4}{u^2} = 0 \tag{36}$$

Posons

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

$$y^4 - Uy^2 - U^2\frac{y}{y_0} + U^2 = 0 \tag{37}$$

Il faut donc maintenant résoudre 37 Afin de rsoudre cette équation de degré 4 nous allons utiliser la méthode de Lagrange.

3 Résolution de l'équation de Dyson

3.1 Résolution avec la méthode générale

L'équation 37 peut s'écrire :

$$ay^4 + by^3 + cy^2 + dy + e = 0 \tag{38}$$

Avec $a = 1$,$b = 0$, $c = -U$, $d = \frac{-U^2}{y_0}$, $e = U^2$. On va donc calculer Δ afin d'identifier la forme des solutions.

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

$$\Delta = 256a^3e^3 - 128a^2c^2e^2 + 144a^2cd^2e - 27a^2d^4 + 16ac^4e - 4ac^3d^2 \tag{39}$$

$$\Delta = 256U^6 - 128U^6 - \frac{144U^7}{y_0^2} - 27\frac{U^8}{y_0^4} + 16U^6 + 4\frac{U^7}{y_0^2} \tag{40}$$

$$\Delta = U^6(144 - \frac{144U}{y_0^2} - 27\frac{U^2}{y_0^4} + 4\frac{U}{y_0^2}) \tag{41}$$

$$P = 8ac - 3b^2 = -8c = 8U \tag{42}$$

$$\Delta_0 = c^2 - 3bd + 12ae = U^2 + 12U^2 = 13U^2 \tag{43}$$

$$D = 64a^3e - 16a^2c^2 + 16ab^2c - 16a^2bd - 3b^4 \tag{44}$$

$$D = 64U^2 - 16U^2 = 48U^2 \tag{45}$$

On fait l'hypothèse que $\Delta > 0$ et d'après 42 et 45 on à $D > 0$ et $P > 0$. On en déduit donc qu'il y a deux paires de racines complexes conjuguées non réelles.

$$p = \frac{8ac - 3b^2}{8a^2} = c = -U \tag{46}$$

$$q = \frac{b^3 - 4abc + 8a^2d}{8a^3} = d = \frac{-U^2}{y_0} \tag{47}$$

On obtient ensuite

$$S = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{-2}{3}p + \frac{1}{3}(Q + \frac{\Delta_0}{Q})} \tag{48}$$

Où :

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3}}{2}} \tag{49}$$

Avec :

$$\Delta_1 = 2c^3 - 9bcd + 27b^2e + 27ad^2 - 72ace = -2U^3 + 27\frac{U^4}{y_0^2} + 72U^3 \tag{50}$$

Or

$$\Delta_1^2 - 4\Delta_0^3 = -27\Delta \tag{51}$$

On peut donc écrire 49

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + \sqrt{-27\Delta}}{2}} \tag{52}$$

$$Q = \sqrt[3]{\frac{\Delta_1 + U^3\sqrt{-27 * (144 - \frac{144U}{y_0^2} - 27\frac{U^2}{y_0^4} + 4\frac{U}{y_0^2})}}{2}} \tag{53}$$

$$Q = U\sqrt[3]{\frac{-2U + 27\frac{U}{y_0^2} + 72 + \sqrt{-27 * (144 - \frac{140U}{y_0^2} - 27\frac{U^2}{y_0^4})}}{2}} \tag{54}$$

$$S = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2U}{3} + \frac{1}{3}(Q + \frac{\Delta_0}{Q})} \tag{55}$$

Finalement on obtient les différentes racines :

$$y_{1,2,3,4} = \pm S \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 - 2p + \frac{q}{S}} \tag{56}$$

$$y_{1,2,3,4} = \pm S \pm \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \tag{57}$$

$$\begin{cases} y_1 = -S - \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \\ y_2 = -S + \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \\ y_3 = +S - \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \\ y_4 = +S + \frac{1}{2}\sqrt{-4S^2 + 2U - \frac{U^2}{Sy_0}} \end{cases} \tag{58}$$

3.2 Résolution avec la méthode de Lagrange

Donc 37 est de la forme :

$$y^4 + ay^2 + by + c \tag{59}$$

Avec

$$a = -U$$

et

$$b = -\frac{U^2}{y_0}$$

et

$$c = u^2$$

et on notera $\alpha, \beta, \gamma et \delta$ ses solutions. On pose d, e et f les solutions de l'équation suivante :

$$y^3 - ay^2 - 4cy - b^2 + 4ac = 0 \tag{60}$$

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

$$y = z - U/3$$

On obtient donc l'équation :

$$(z - \frac{U}{3})^3 + U(z - \frac{U}{3})^2 - 4U^2(z - \frac{U}{3}) + \frac{U^2}{y_0} - 4U^3 = 0 \tag{61}$$

$$z^3 - z^2U + zU^2 - \frac{U^3}{27} + Uz^2 - 2\frac{zU^2}{3} + \frac{U^3}{9} - 4U^2z + \frac{4}{3}U^3 + \frac{U^2}{y_0} - 4U^3 = 0 \tag{62}$$

$$z^3 - z\frac{11}{3}U^2 - u^3\frac{70}{27} + \frac{U^2}{y_0} = 0 \tag{63}$$

On peut écrire 63 sous la forme :

$$z^3 + pz + q = 0 \tag{64}$$

Avec

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

et

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

On peut donc poser :

$$z^2 + 27qz - 27p^3 = 0 \tag{65}$$

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

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

$$\Delta = \frac{U^5 * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U^5 + 27^2U^4}{y_0^2} - 4 * 11^3U^6 \tag{66}$$

On obtient donc :

$$z_+ = \frac{U^3 70 + \frac{27U^2}{y_0} + \sqrt{\Delta}}{2} \tag{67}$$

$$z_- = \frac{U^3 70 + \frac{27U^2}{y_0} - \sqrt{\Delta}}{2} \tag{68}$$

On a aussi

$$\sqrt{\Delta} = \sqrt{\frac{U^5 * 70^2 * y_0^2 + 140 * 27U^5 + 27^2U^4}{y_0^2} - 4 * 11^3U^6} \tag{69}$$

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

On pose maintenant k (respectivement l) comme étant la racine cubique de z_+ (respectivement z_-). Avec $j = e^{i\frac{2\pi}{3}}$

$$\left\{\begin{array}{r} d = \frac{1}{3}(k + l + U) \\ e = \frac{1}{3}(kj^2 + lj + U) \\ f = \frac{1}{3}(kj + lj^2 + U) \end{array}\right. \tag{71}$$

$$\left\{\begin{array}{r} d = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})} + 1) \\ e = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})}e^{i\frac{4\pi}{3}} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})}e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}}) \\ f = \frac{U}{3}(\sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 + \sqrt{A})}e^{i\frac{2\pi}{3}} + \sqrt[3]{35 + \frac{u}{2y_0}(27 - \sqrt{A})}e^{i\frac{4\pi}{3}} + e^{i\frac{2\pi}{3}} + e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{array}\right. \tag{72}$$

$$\left\{\begin{array}{r} d=\frac{U}{3}(\sqrt[3]{35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A})}+\sqrt[3]{35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A})}+1) \\ e=\frac{U}{3}(((35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A}))e^{i4\pi})^{\frac{1}{3}}+((35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A})))e^{i2\pi})^{\frac{1}{3}}+e^{i\frac{4\pi}{3}}+e^{i\frac{2\pi}{3}}) \\ f=\frac{U}{3}(((35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A}))e^{i2\pi})^{\frac{1}{3}}+((35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A}))e^{i4\pi})^{\frac{1}{3}}+e^{i\frac{2\pi}{3}}+e^{i\frac{4\pi}{3}}) \end{array}\right. \tag{73}$$

Or

$$e^{i4\pi}=e^{i2\pi}=1 \tag{74}$$

Et

$$j^2+j=e^{i\frac{4\pi}{3}}+e^{i\frac{2\pi}{3}}=-1 \tag{75}$$

$$\left\{\begin{array}{r} d=\frac{U}{3}(\sqrt[3]{35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A})}+\sqrt[3]{35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A})}+1) \\ e=f=\frac{U}{3}(\sqrt[3]{(35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A}))}+\sqrt[3]{(35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A}))}-1) \end{array}\right. \tag{76}$$

Par ailleurs, on a :

$$\left\{\begin{array}{r} \alpha+\beta+\gamma+\delta=0 \\ \alpha\beta+\gamma\delta=d \\ \alpha\gamma+\beta\delta=e \\ \alpha\delta++\beta\gamma=f \end{array}\right. \Longleftrightarrow \left\{\begin{array}{r} \alpha+\beta+\gamma+\delta=0 \\ (\alpha+\beta)(\gamma+\delta)=e+f \\ (\alpha+\gamma)(\beta+\delta)=d+f \\ (\alpha+\delta)(\beta+\gamma)=d+e \end{array}\right. \tag{77}$$

On déduit ensuite des équations de ce système :
$\alpha+\beta=\rho_1$, $\gamma+\delta=-\rho_1$ avec $\rho_1=\sqrt{-e-f}$
$\alpha+\delta=\rho_2$, $\beta+\gamma=-\rho_2$ avec $\rho_2=\sqrt{-d-e}$
$\alpha+\gamma=\rho_3$, $\beta+\delta=-\rho_3$ avec $\rho_3=\sqrt{-d-f}$ On a donc :

$$\rho_1=\sqrt{-e-f}=\sqrt{-2e}=\sqrt{\frac{-2U}{3}(\sqrt[3]{(35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A}))}+\sqrt[3]{(35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A}))}-1)} \tag{78}$$

$$\rho_2=\sqrt{-d-e}=\sqrt{\frac{-2U}{3}(\sqrt[3]{(35+\frac{u}{2y_0}(27+\sqrt{A}))}+\sqrt[3]{(35+\frac{u}{2y_0}(27-\sqrt{A}))})} \tag{79}$$

$$\rho_3=\sqrt{-d-f}=\sqrt{-d-e}=\rho_2 \tag{80}$$

On déduit maintenant:

$$\alpha=\frac{1}{2}(\rho_1+\rho_2+\rho_3)=\frac{1}{2}(\rho_1+2\rho_2) \tag{81}$$

$$\beta = \frac{1}{2}(\rho_1 - \rho_2 - \rho_3) = \frac{1}{2}(\rho_1 - 2\rho_2) \tag{82}$$

$$\gamma = \frac{1}{2}(-\rho_1 - \rho_2 + \rho_3) = \frac{1}{2}(-\rho_1) \tag{83}$$

$$\delta = \frac{1}{2}(-\rho_1 + \rho_2 - \rho_3) = \gamma \tag{84}$$

On a donc $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ qui sont les solutions de 37.