Fonction de Green

DAVY Leo, KAOUAH Mohammed, ABRIBAT Clement

May 5, 2017

1 Introduction l'equation de Dyson

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

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

Avec G la fonction de Green qui reprsente 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 :

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

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

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

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

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

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

Cependant ces 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.

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

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

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

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

2 Dyson

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

Et la solution

$$Y = \frac{1}{V}\sqrt{1+2V} \tag{12}$$

avec

$$V = uy_0^2 \tag{13}$$

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

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

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

$$S_{XC}(y) = \frac{1}{2} uyg(y) \tag{16}$$

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

On combine les equations 16 et 17 :

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

$$\frac{dS_{XC}(y)}{dy} = \frac{d(\frac{1}{2}uyg(y_0))}{y} = \frac{1}{2} ug(y_0) \tag{19}$$

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

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

On obtient donc avec 14:

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

Finalement, on obtient l'equation suivante que l'on va chercher simplifier afin de la resoudre.

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

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

On multiplie l'equation prcedente par

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

On obtient :

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

Posons

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

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

Il faut donc maintenant resoudre 25