Fonction de Green

DAVY Leo, KAOUAH Mohammed, ABRIBAT Clement

May 18, 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

$$V = u y_0^2 \tag{13}$$

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

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

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

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

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

On combine les equations 16 et 17 :

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

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

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

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

On obtient donc avec 14:

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

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 Afin de rsoudre cette quation de degr 4 nous allons utiliser la méthode de Lagrange.

3 Résolution de l'équation de Dyson

Donc 25 est de la forme :

$$y^4 + ay^2 + by + c \tag{26}$$

Avec

$$a = -U$$

et

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

et

$$c = u^2$$

On pose d, e et f les solutions de l'équation suivante :

$$y^3 - ay^2 - 4cy - b^2 + 4ac = 0 \tag{27}$$

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

$$y = z - U/3$$

On obtient donc l'équation :

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

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

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

On peut écrire 30 sous la forme :

$$z^3 + pz + q = 0 \tag{31}$$

Avec

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

et

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

On peut donc poser :

$$z^2 + 27qz - 27p^3 = 0 \tag{32}$$

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

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

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

On obtient donc :

$$z_+ = \frac{U^3 70 + \frac{27U^2}{y_0} + \sqrt{\Delta}}{2} \tag{34}$$

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

On a aussi

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

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

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

$$\left\{ \begin{array}{r} d = \frac{1}{3}(k + l + U) \\ e = \frac{1}{3}(kj^2 + lj + U) \\ f = \frac{1}{3}(kj + lj^2 + U) \end{array} \right. \tag{38}$$

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

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

Or

$$e^{i4\pi} = e^{i2\pi} = 0 \tag{41}$$

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

On a

$$\rho_1 = \sqrt{-e - f} = \sqrt{-2e} \tag{43}$$

$$\rho_2 = \sqrt{-d - e} \tag{44}$$

$$\rho_3 = \sqrt{-d - f} = \sqrt{-d - e} = \rho_2 \tag{45}$$

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

$$\rho_2 = \tag{47}$$