A P P E N D I C E I V

CALCUL DE LA FONCTION $\phi_T(n)$ POUR LE TRAITEMENT A TEMPERATURE FINIE

La fonction $\phi_T(n)$ est la fonction inverse de la fonction $G_T\left(\frac{E_{oF}}{\Delta}\right)$ définie par l'expression :

$$n = G_T\left(\frac{E_{oF}}{\Delta}\right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{1+x^2} \frac{1}{1 + \exp \frac{\Delta}{kT} \left(x + \frac{E_{oF}}{\Delta}\right)} \quad (111)$$

Pour résoudre cette intégrale, on écrit :

$$\frac{1}{1 + \exp \frac{\Delta}{kT} \left(x + \frac{E_{oF}}{\Delta}\right)} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{th} \left[-\frac{\Delta}{2kT} \left(x + \frac{E_{oF}}{\Delta}\right) \right] \quad (112)$$

et on développe la tangente hyperbolique par rapport à ses poles imaginaires :

$$\operatorname{th} \left[-\frac{\Delta}{2kT} \left(x + \frac{E_{oF}}{\Delta}\right) \right] = \frac{2kT}{\Delta} \sum_{\omega} \frac{1}{i\omega - x - \frac{E_{oF}}{\Delta}} \quad (113)$$

avec $\omega = \pm \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi kT}{\Delta}$ (où n est entier)

On intègre dans le plan complexe à l'intérieur d'un demi-cercle infini dans le demi-plan supérieur et on exprime l'intégrale (111) en fonction de la fonction digamma $\psi(z)$ qui est la dérivée logarithmique de la fonction gamma $\Gamma(z)$:

$$\psi(z) = \frac{d(\operatorname{Log} \Gamma(z))}{dz} \quad (114)$$

Le développement en série de $\psi(z)$ est :

$$\psi(1+z) = -\gamma + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z}{n(n+z)} \quad (115)$$