APPENDICE IV

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 $G_T(\frac{E_{oF}}{\Delta})$ définie par l'expression :

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

Pour résoudre cette intégrale, on écrit :

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

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

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

avec $\omega = \pm\ (n+\frac{1}{2})\ \frac{2\pi kT}{\Delta}$ (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 gemma $\Gamma(z)$:

$$\psi(z) = \frac{d\,[\mathrm{Log}\,\Gamma(z)]}{dz} \tag{114}$$

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

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