Heiko Dumlich 18. Dezember 2006

8 Übungsblatt Festkörperphysik

8.1 (Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials)

Es ist zu zeigen, dass das chemische Potential eines zweidimensionalen Elektronengases durch:

$$\mu(T) = k_B T \, \ln\left(2\exp\left(\frac{\pi n \hbar^2}{m k_B T}\right) - 1\right),$$

gegeben ist, wobei n die (Flächen)-Dichte der Elektronen beschreibt. Hierzu bestimmen wir zuerst die Zustandsdichte:

$$D(E) = \frac{L^2 m}{(\pi \hbar^2)},$$

wobei L^2 die Fläche des Elektronengases sei. Dies können wir zeigen, wobei wir uns in zwei Raumdimensionen befinden, daher existiert ein Zustand auf der reziproken Fläche $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$ im k-Raum. Die Anzahl der Zustände $N(k)$ in einem Kreis mit Radius k ergibt sich somit zu: $N(k) = 2 \cdot \frac{\pi k^2}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \frac{L^2}{2\pi} k^2$, wobei der Faktor 2 für den Spin beachtet wurde. Für die Energie gilt nun $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Leftrightarrow k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, dies können wir einsetzen und erhalten:

$$N(E) = \frac{L^2}{2\pi} \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{L^2 m}{\pi \hbar^2} E,$$

Die Zustandsdichte ergibt sich nun durch Ableitung nach E :

$$D(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{L^2 m}{\pi \hbar^2}.$$

Wie wir sofort erkennen ist diese unabhängig von der Energie E.

Die Anzahl der Zustände N erhalten wir, wenn wir über die Dichte dieser integrieren $\left(D(E) = \frac{dN(E)}{dE} \rightarrow \int D(E)\, dE = N(E)\right)$. Da wir das chemische Potential erhalten wollen, definieren wir N so, dass das Integral von 0 bis zu $E = \mu(T)$ der gesamten Elektronenanzahl entspricht. Somit gilt also, da wir jetzt eine Temperaturabhängigkeit besitzen und uns über der Fermi-Energie/Fermi-Temperatur befinden:

$$N = \int_0^{E=\mu(T)} dE\, D(E)\, f(E,T),$$

mit der Fermi-Dirac-Verteilung $f(E,T) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}}+1} = \frac{e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}}{1+e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}}$ und der oben hergeleiteten Zustandsdichte $D(E) = \frac{L^2 m}{(\pi \hbar^2)}$. Setzen wir die Terme ein und nutzen aus das

$n = \frac{N}{L^2}$ gilt, da die Flächendichte der Elektronen gerade der Gesamtzahl an Elektronen pro Gesamtfläche entspricht, erhalten wir:

$$\frac{n\pi\hbar^2}{m} = \int_0^{E=\mu(T)} dE \, \frac{e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}}{1+e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}},$$

Wir können das Integral lösen, wenn wir $x = -\frac{(E-\mu)}{kT}$ substituieren und mit $\frac{dx}{dE} = -\frac{1}{kT}$, also $-kT\,dx = dE$ erhalten wir:

$$\int_0^{E=\mu(T)} dE \, \frac{e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}}{1+e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}}} = -kT \int_{\frac{\mu(T)}{kT}}^{0} dx \, \frac{e^x}{e^x+1} = kT \int_0^{\frac{\mu(T)}{kT}} dx \, \frac{e^x}{e^x+1},$$

wobei $\frac{d}{dx}\left(e^x+1\right) = e^x$, also wir die Ableitung einer Funktion durch die Funktion im Integral stehen haben. Die Integralform ist mit $\int_a^b dx \, \frac{f'(x)}{f(x)} = \left[\ln\left\{f\left(x\right)\right\}\right]_a^b$ gegeben. Dieses Integral ergibt also:

$$\int_0^{E=\mu(T)} dE \, \frac{1}{e^{\frac{-E}{kT}}+1} = kT\left[\ln\left(e^x+1\right)\right]_0^{\frac{\mu(T)}{kT}} = kT\left[\ln\left(e^{\frac{\mu(T)}{kT}}+1\right) - \ln\left(2\right)\right].$$

Einsetzen des Integrals liefert also, wobei wir in den folgenden Schritten die Logarithmengesetze verwenden:

$$\begin{aligned} \frac{n\pi\hbar^2}{m} &= kT\left[\ln\left(e^{\frac{\mu}{kT}}+1\right) - \ln\left(2\right)\right] \\ \frac{n\pi\hbar^2}{mkT} &= \ln\left(\frac{e^{\frac{\mu}{kT}}+1}{2}\right) \\ 2\exp\left(\frac{n\pi\hbar^2}{mkT}\right) - 1 &= e^{\frac{\mu}{kT}} \end{aligned}$$

Wir müssen nur noch logarithmieren und mit kT multiplizieren und wir erhalten das gesuchte Ergebnis:

$$\mu\left(T\right) = k_BT\,\ln\left(2\exp\left(\frac{\pi n\hbar^2}{mk_BT}\right) - 1\right).$$

8.2 (Landau-Niveaus)

Die Landau-Niveaus beschreiben diskrete äquidistante Niveaus im statischen Magnetfeld der Energie $E\left(k\right)$ der freien Elektronen. Wir betrachten das Vektorpotential eines homogenen Magnetfeldes $\vec{B} = B\vec{e}_z$, dieses ist $\vec{A} = -By\vec{e}_x$. Der Hamiltonoperator eines freien Elektron ohne Spin lautet dann: $H = \frac{\left[\vec{p}+e\vec{A}\right]^2}{2m}$. Die Eigenfunktion soll die folgende Form haben:

$$\psi = \chi\left(y\right)e^{i\left(k_xx+k_zz\right)}.$$

(a)

Es ist zu zeigen, dass $\chi(y)$ der folgenden Differentialgleichung genügt:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dy^2}+\left[E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega_c^2(y-y_0)^2\right]\chi=0,\quad y_0=-\tfrac{\hbar k_x}{eB},\quad \omega_c=\frac{eB}{m}.$$

Wir betrachten hierzu den Hamiltonian, der über $H=\frac{\left[\vec{p}+e\vec{A}\right]^2}{2m}$ definiert ist und sich zu:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-eyB\right]^2,$$

ergibt, wenn wir die gegebenen Angaben einsetzen, wobei wir uns in der Ortsdarstellung befinden, also der Impulsoperator mit $\vec{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla$ gegeben ist, erhalten wir:

$$\begin{aligned} H &= \frac{\left[\vec{p}+e\vec{A}\right]^2}{2m}=\frac{\left[\vec{p}^2+e\vec{p}\cdot\vec{A}+e\vec{A}\cdot\vec{p}+e^2\vec{A}^2\right]}{2m}\\ &= \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\nabla^2+\underbrace{e\frac{\hbar}{i}\nabla\cdot(-By\vec{e}_x)}_{=0}+\frac{\hbar}{i}e(-By)\,\vec{e}_x\cdot\nabla+e^2B^2y^2\right], \end{aligned}$$

Dies können wir, wenn wir die Nablaoperatoren ausführen, umschreiben zu:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{\hbar}{i}e(-By)\frac{\partial}{\partial x}+e^2B^2y^2\right]\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2m}\left[\left(-\hbar^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\hbar}{i}e(-By)\frac{\partial}{\partial x}+e^2B^2y^2\right], \end{aligned}$$

da jedoch $\left(-\hbar^2\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\hbar}{i}e(-By)\frac{\partial}{\partial x}+e^2B^2y^2=\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-eyB\right]^2$ ist, ist der Hamiltonian tatsächlich von der Form, die oben angegeben wurde.

Für die Schrödingergleichung folgt also:

$$\begin{aligned} H\psi &= E\psi\\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}-eyB\right]^2\right)\chi(y)\,e^{i(k_xx+k_zz)} &= E\chi(y)\,e^{i(k_xx+k_zz)}, \end{aligned}$$

wobei wir nun die Differentialoperator (Ableitungen) ausführen können:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\left[-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{\hbar}{i}e\left(-By\right)\frac{\partial}{\partial x}+e^2B^2y^2\right]\chi\left(y\right)e^{i(k_xx+k_zz)} &= E\psi. \\
\frac{1}{2m}\left[\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\hbar^2\left(k_x^2+k_z^2\right)-\hbar eByk_x+e^2B^2y^2-2mE\right]\chi\left(y\right)e^{i(k_xx+k_zz)} &= 0. \\
\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi\left(y\right)}{\partial y^2}+\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_z^2\right)-\frac{\hbar k_x}{2m}eBy+\frac{e^2B^2}{2m}y^2-E\right]\chi\left(y\right) &= 0.
\end{aligned}
$$

Wir können nun noch die Definitionen $y_0=-\frac{\hbar k_x}{eB}$ und $\omega_c=\frac{eB}{m}$ einsetzen und mit Minus eins multiplizieren und erhalten:

$$
\begin{aligned}
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi\left(y\right)}{\partial y^2}+\left[E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\frac{\hbar^2k_x^2}{2m}-\frac{y_0}{2}eB\omega_cy-\frac{1}{2}m\omega_c^2y^2\right]\chi\left(y\right) &= 0 \\
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi\left(y\right)}{\partial y^2}+\left[E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\left(\frac{y_0^2}{2}m\omega_c^2-\frac{1}{2}m\omega_c^2y_0y-\frac{1}{2}m\omega_c^2y^2\right)\right]\chi\left(y\right) &= 0 \\
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi\left(y\right)}{\partial y^2}+\left[E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega_c^2\left(y_0^2-y_0y-y^2\right)\right]\chi\left(y\right) &= 0,
\end{aligned}
$$

Somit genügt also $\chi\left(y\right)$ der folgenden Differentialgleichung:

$$
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi\left(y\right)}{\partial y^2}+\left[E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega_c^2\left(y-y_0\right)^2\right]\chi\left(y\right)=0.
$$

(b)

Es ist zu zeigen, dass die DGL aus Aufgabenteil a) als Schrödingergleichung des Harmonischen Oszillators identifiziert werden kann. Für den Hamiltonian des ein-dimensionalen Harmonischen Oszillators gilt:

$$
H_{osz}=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x-x_0\right)^2,
$$

wobei dieser um x_0 anstatt um 0 oszilliert. Die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$. Betrachten wir unseren Term aus Aufgabenteil a):

$$
\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi\left(y\right)}{\partial y^2}+\left[E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega_c^2\left(y-y_0\right)^2\right]\chi\left(y\right)=0,
$$

wobei wir umstellen können und ausnutzen das die Darstellung im Ortsraum ist, somit also $p^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ für den Impulsoperator gilt:

$$
\left[\underbrace{\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega_c^2\left(y-y_0\right)^2}_{H_{osz}}+\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\right]\chi\left(y\right)=E\chi\left(y\right).
$$

Wir erkennen also sofort den Hamiltonian des harmonischen Oszillators. Die Energieeigenwerte ergeben sich somit mit:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}.$$

(Das folgt daraus, dass der Hamiltonian angewandt werden kann und den ersten Term liefert, während der zweite Term $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ keine weitere Berechnung erfährt und als Konstante in der Rechnung und im Ergebnis für E_n verbleibt.)

8.3 (Energielücke in eindimensionalen periodischen Strukturen)

Es sei ein eindimensionales, lineares Gitter (mit Gitterkonstante a) gegeben, das mit freien Elektronen gefüllt sei. Die Elektronen mit Wellenvektor auf dem Rand der ersten Brillouin-Zone erfahren eine Bragg-Reflexion, so dass sich stehende Wellen $\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right)$ für $k = \pm\frac{\pi}{a}$ bilden. Auf Grund der unterschiedlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte haben die beiden Wellenfunktionen in einem periodischen Kristallpotential der Form: $U(x) = U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$ nicht mehr dieselbe Energie, so dass an dieser Stelle des k-Raumes die Energieentartung aufgehoben wird und eine Energielücke entsteht: $E \rightarrow E_\pm$. Es ist zu zeigen, dass die Größe der Energieaufspaltung $\Delta E = E_+ - E_-$ gleich der Fourier-Komponente des Kristallpotentials $U(x)$ ist.

Es gilt:

$$E_\pm = \langle \psi_\pm^* | \hat{H} | \psi_\pm \rangle = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \psi_\pm^* \hat{H} \psi_\pm,$$

mit dem Hamiltonian:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}).$$

Wir können dies einsetzen und erhalten in Ortsdarstellung:

$$E_\pm = \int dx\, \frac{1}{2}\left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U_0\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right),$$

wir können das Integral aufspalten:

$$\begin{aligned} E_\pm &= \underbrace{\int dx\, \frac{1}{2}\left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right)}_{I_\pm} \\ &+ \underbrace{\int dx\, \frac{1}{2}\left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right) U_0\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right)}_{II_+, II_-}. \end{aligned}$$

Berechnung des ersten Integrals liefert:

$$
\begin{aligned}
I_{\pm} &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left(-\frac{\hbar^2}{4m}\right)\left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right)\left(-\frac{\pi^2}{a^2}\right)\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{4m}\frac{\pi^2}{a^2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \ (\mp)\left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right)^2
\end{aligned}
$$

Ausnutzen der Eulerschen Identität führt auf $\cos(x) = \frac{e^{ix}+e^{-ix}}{2}$, dies können wir einsetzen:

$$
\begin{aligned}
I_{+} &= \frac{\hbar^2}{4m}\frac{\pi^2}{a^2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \, 4\cdot\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi^2}{a^2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \ \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)
\end{aligned}
$$

Dieses Integral können wir lösen:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \ \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left(1-\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right) \\
&= a - \underbrace{\left[-\frac{a}{\pi}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}}_{=0} - \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \ \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right), \\
\Rightarrow \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \ \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) &= \frac{a}{2}.
\end{aligned}
$$

Einsetzen in I_+ liefert:

$$
I_{+} = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi^2}{a^2}\frac{a}{2} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a}.
$$

Die eulersche Identität liefert zudem $2i\sin(x) = e^{ix} - e^{-ix}$ und $-2i\sin(x) = e^{-ix} - e^{ix}$ einsetzen in I_- :

$$
\begin{aligned}
I_{-} &= \frac{\hbar^2}{4m}\frac{\pi^2}{a^2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \, 4\cdot\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \\
&= \frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi^2}{a^2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \ \cdot\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right).
\end{aligned}
$$

Das Integral liefert:

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \cdot \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \cdot \left(1 - \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right) = a - \underbrace{\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \cdot \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)}_{\frac{a}{2}} = \frac{a}{2}.$$

Dies setzen wir wieder in I_- ein und wir erhalten:

$$I_- = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\pi^2}{a^2}\frac{a}{2} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a}.$$

Somit wissen wir nun bereits, dass $\Delta E = E_+ - E_-$ nur noch von $U(x)$ abhängen kann, da die Terme $\frac{p^2}{2m}$ sich gegenseitig wegheben.
Die Berechnung des zweiten Integrals liefert:

$$II_+ = \frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right) + \exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right)^2 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right),$$

wobei wir nutzen können, dass $\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) + \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right)^2 = \exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right) + 2 + \exp\left(-i\frac{2\pi x}{a}\right)$ und $\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = \frac{\exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi x}{a}\right)}{2}$ gilt. Somit folgt:

$$\begin{aligned}
II_+ &= \frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left[2 + \left(\exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\right] \cdot \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \\
&= \frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left[2\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \left(\exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right) + \exp\left(-i\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] \\
&= \frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left[2\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + 2\cos^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] \\
&= U_0\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \cos^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]
\end{aligned}$$

Bei dem ersten Teilintegral sieht man sehr schnell das es verschwindet, da der Sinus an der Stelle $\pm\pi$ verschwindet:

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = \left[\frac{a}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} = \left[\underbrace{\frac{a}{2\pi}\sin(\pi)}_{=0} - \underbrace{\frac{a}{2\pi}\sin(-\pi)}_{=0}\right] = 0.$$

Das zweite Teilintegral ist sehr ähnlich zu den bereits oben berechneten, jedoch führen wir es explizit aus um zu zeigen das es das identische Ergebnis liefert (um einen möglichen Punktabzug zu verhindern):

$$
\begin{aligned}
\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \cos^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx \left(1-\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right) \\
&= a - \underbrace{\left[-\frac{a}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}}_{=0} - \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \cos^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \\
\Rightarrow \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \cos^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) &= \frac{a}{2}.
\end{aligned}
$$

Diesmal verschwindet der mittlere Term jedoch, weil der Sinus die 0 liefert im Gegensatz zu oben, wo der Kosinus die 0 geliefert hat. Die Ergebnisse für die Teilintegrale können wir einsetzen:

$$
II_+ = U_0\left[0+\frac{a}{2}\right] = U_0\frac{a}{2}.
$$

Betrachten wir nun II_- :

$$
\begin{aligned}
II_- &= \frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, (-)\cdot\left(\exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)-\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right)\right)^2\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \\
&= -\frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \left(\exp\left(-2i\frac{\pi x}{a}\right)-2+\exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right)\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \\
&= -\frac{U_0}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \left[\left(\exp\left(i\frac{2\pi x}{a}\right)+\exp\left(-2i\frac{\pi x}{a}\right)\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)-2\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] \\
&= -U_0\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx\, \left[\underbrace{\cos^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)}_{\Rightarrow\frac{a}{2}}-\underbrace{\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)}_{\Rightarrow 0}\right] \\
&= -U_0\frac{a}{2}.
\end{aligned}
$$

Somit ergibt sich für den Gap $\Delta E = E_+ - E_- = II_+ - II_- = U_0 a$.
Allgemein gilt für die Fourier-Entwicklung des Potentials:

$$
U(x) = \sum_G U_G \exp(iGx),
$$

in unserem Fall ist die Fourierkomponente also nur:

$$
U_G = U_0.
$$

Unser Ergebnis lieferte $U_0 a$, wobei wir die Wellenfunktionen $\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right)$ benutzt haben. Vermutlich ist die Normierung der Wellenfunktion in der Aufgabenstellung fehlerhaft und diese müsste:

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2a}}\left(\exp\left(i\frac{\pi x}{a}\right) \pm \exp\left(-i\frac{\pi x}{a}\right)\right),$$

lauten, für diesen Fall würden wir die Energie-Lücke mit $\Delta E = U_0$ erhalten und somit würde diese der Fourier-Komponente entsprechen.