

## C6.5 Paradoxul Stării Solide

Pentru starea solidă bariera de potențial (infinită) este o aproximație validă pentru comportamentul electronic staționar; această situație este echivalentă cu starea în care electronul există “liber” în interiorul barierei implicând pentru funcția de undă asociată forma trigonometrică 1D

$$\psi_k(A, x) = A \sin(kx)$$

asociată cu Hamiltonianul electronic liber

$$\hat{H}_k = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \partial_x^2$$

Din condiția de normalizare

$$1 = \int_0^a \psi_k^* \psi_k dx = A^2 \int_0^a \sin^2(kx) dx = \frac{A^2}{2} \int_0^a [1 - \cos(2kx)] dx = \frac{A^2}{2} \left[ a - \frac{1}{2k} \sin(2ka) \right]$$

rezultă constanta  $A$  de forma

$$A = \sqrt{\frac{2}{a - \frac{1}{2k} \sin(2ka)}} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{1}{1 - \frac{\sin(2ka)}{2ka}}}$$

Pe de altă parte, energia calculată cu expresia constantei  $A$ , rezultă:

$$E_k = \int_0^a \psi_k^* \hat{H}_k \psi_k dx = A^2 k^2 \frac{\hbar^2}{2m_0} \int_0^a \sin^2(kx) dx = A^2 k^2 \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{2} \left[ a - \frac{1}{2k} \sin(2ka) \right] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

Prin variație

$$0 = \partial_k E_k = k \frac{\hbar^2}{m_0}$$

produce soluția

$$k = 0$$

ceea ce corespunde cu valoarea infinită a amplitudinii funcției de undă

$$\lim_{k \rightarrow 0} A = \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{1}{1 - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin(2ka)}{2ka}}} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{1}{1-1}} = \infty$$

precum și la “straniul” cuplu de eigen-soluții

$$\begin{cases} \psi_{k=0}(x) = \infty \cdot 0 = ? \\ E_{k=0} = 0 \end{cases}$$

ceea ce ne spune că electronii în starea fundamentală sau sunt „ascunși” sau nu au o energie observabilă (au energia zero) deși ei pot avea o existență virtuală, nedeterminată, prin funcția de undă asociată.