



Solució:

Les matrius Hamiltonianes $\mathbf{H}_o$ i $\mathbf{H}'$ per al butadiè, expressades en base atòmica, són:

$$\mathbf{H}_o = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha \end{bmatrix} ; \quad \mathbf{H}' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \beta' \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta' & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La diagonalització de $\mathbf{H}_o$ ens proporciona els següents autovalors i autovectors d'ordre zero (comproveu-ho):

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_1^{(0)} &= \begin{bmatrix} 0.3718 \\ 0.6015 \\ 0.6015 \\ 0.3718 \end{bmatrix} & \mathbf{C}_2^{(0)} &= \begin{bmatrix} 0.6015 \\ 0.3718 \\ -0.3718 \\ -0.6015 \end{bmatrix} & \mathbf{C}_3^{(0)} &= \begin{bmatrix} 0.6015 \\ -0.3718 \\ -0.3718 \\ 0.6015 \end{bmatrix} & \mathbf{C}_4^{(0)} &= \begin{bmatrix} 0.3718 \\ -0.6015 \\ 0.6015 \\ -0.3718 \end{bmatrix} \\ \epsilon_1^{(0)} &= \alpha + 1.618\beta & \epsilon_2^{(0)} &= \alpha + 0.618\beta & \epsilon_3^{(0)} &= \alpha - 0.618\beta & \epsilon_4^{(0)} &= \alpha - 1.618\beta \end{aligned}$$