$\Psi = a\phi_a + b\phi_b$, on $\{\phi_a, \phi_b\}$ estan normalitzats, $\langle\phi_a|\hat{\mathcal{H}}|\phi_a\rangle = -2$ a.u., $\langle\phi_b|\hat{\mathcal{H}}|\phi_b\rangle = -2$ a.u., $\langle\phi_a|\hat{\mathcal{H}}|\phi_b\rangle = -1$ a.u. i $\langle\phi_a|\phi_b\rangle = \frac{1}{4}$. Trobeu els coeficients variacionals a i b i l'energia associada.

132. (febr. 07) Considereu l'orbital molecular $\frac{1}{2}(0, 1, 1, 0, -1, -1)$ del C_6H_6. Calculeu la seua energia en termes dels paràmetres α i β.

6.3 Apèndix: nombres complexos

El concepte primari de nombre deriva de la possibilitat de comptar els elements d'un conjunt (Quantes pomes hi ha en aquest cistell?). La resposta ens fa aparèixer el concepte de nombre natural. La resta de tipus de nombre els introduirem com una necessitat per a poder resoldre equacions. El punt de partida és l'existència de nombres naturals. Comencem intentant trobar la solució de:

$$x + 2 = 1 \tag{6.4}$$

Per a solucionar aquesta equació passem el 2 restant al membre de la dreta: $x = 1 - 2$. Restar 2 equival a restar dues voltes 1, aleshores escrivim que $x = 1-1-1$. En restar 1 d'1 ens queda zero, nombre que sumat a qualsevol altre el deixa inalterat. Per tot açò escrivim: $x = 1-2 = 1-1-1 = 0-1 = -1 \notin N$. En altres paraules, l'equació no presenta solució.

Per a poder afirmar que hi ha una solució cal *inventar* uns altres nombres (els nombres negatius). Com els inventem? Diem que a més dels naturals i el zero hi ha uns altres nombres anomenats negatius. No tenim idea del que són ni del que representen. El que sí que sabem és com operen. Per exemple, el nombre que anomenem -2 (negatiu del 2) és aquell que sumat a 2 dóna com a resultat zero.

Una volta *inventats* els nombres negatius podem dotar-los de quotidianitat. Podem interpretar-los com un deute. Si tenim un deute de 5 milions i sumem al nostre patrimoni 5 milions, eliminem el deute i ens quedem a zero. A la col·lecció de nombres naturals, el zero i els negatius l'anomenem conjunt del nombres enters (Z).

Plantegem ara una altra equació:

$$x \times 3 = 1 \tag{6.5}$$

Per a solucionar aquesta equació passem el 3 dividint al membre dret: $x = 1/3 \notin Z$. En altres paraules, l'equació no presenta solució. No hi ha cap nombre enter que multiplicat per 3 done 1.

Perquè hi haja solució cal que *inventem* un nou nombre que anomenem fraccionari. No tenim idea del que és ni del que representa. El que sí que sabem és com opera. Per exemple, el nombre que anomenem 1/3 és aquell que multiplicat per 3 dóna 1 com a resultat.

Una volta *inventats* els nombres fraccionaris podem dotar-los de quotidianitat. Imaginem que partim un objecte en 5 trossos iguals. Interpretem 2/5 com dues parts de les 5. A la col·lecció de nombres enters (Z) més els fraccionaris els anomenem nombres racionals (Q).

Plantegem una altra equació:

$$x^2 - 3 = 0 \tag{6.6}$$

Per a solucionar aquesta equació passem el 3 sumant a la dreta. Després eliminem segones potències efectuant una radicació: $x = \sqrt{3} \notin Q$. En altres paraules, l'equació no presenta solució. No hi ha cap nombre racional que elevat al quadrat done 3.

Perquè hi haja solució cal que *inventem* un nou nombre que anomenem irracional. No tenim idea del que és ni del que representa. El que sí que sabem és com opera. Per exemple, el nombre que anomenem $\sqrt{3}$ és aquell que elevat al quadrat dóna 3 com a resultat.

Una volta *inventats* els nombres irracionals podem dotar-los de quotidianitat. Podem interpretar-los lligats al concepte de longitud. La manera més habitual de presentar els irracionals és demostrant que la diagonal d'un triangle rectangle de catets unitat no pot ser escrita com un nombre racional. A la col·lecció de nombres racionals (Q) més els irracionals els anomenem reals (R).

Plantegem una altra equació:

$$(x - a)^2 + b^2 = 0 \tag{6.7}$$

Per a solucionar aquesta equació passem el b^2 restant a la dreta. Després eliminem segones potències efectuant una radicació: $x - a = \sqrt{(-b^2)}$. No sabem efectuar aquesta operació en el membre dret. Sí que podem escriure que: $\sqrt{(-b^2)} = \sqrt{((-1) * b^2)} = \sqrt{(-1)} * \sqrt{(b^2)} = b\sqrt{-1}$. Etiquetem amb la lletra i a $\sqrt{-1}$. Ara sumem a a tots dos membres. El resultat és $x = a+bi \notin R$. En altres paraules, l'equació no presenta solució. No hi ha cap nombre real que elevat al quadrat done -1.

Perquè hi haja solució cal que *inventem* un nou nombre que anomenem *imaginari*. No tenim idea del que és ni del que representa. El que sí que sabem és com opera. Anomenem $i = \sqrt{-1}$ a aquell nombre que elevat al quadrat dóna com a resultat -1. Anomenem nombre *complex* (C) a la suma $(a + bi)$. Un nombre real no és més que un nombre complex que presenta un valor zero en la part imaginària.

Una volta *inventats* els nombres complexos podem dotar-los de quotidianitat. Podem interpretar-los lligats a magnituds com ara el voltatge en corrent altern, que necessita dos nombres reals per a estar especificat.

També podem donar-los una descripció vectorial, atès que tenen dues coordenades (podem escriure (a,b) en lloc de a+bi). Definim el mòdul r, com és habitual entre vectors, $r = \sqrt{a^2 + b^2}$ i l'angle amb l'eix horizontal també com ho faríem amb un vector: $\tan\phi = b/a$. Aquestes equacions permeten escriure: $a = r\cos\phi$, $b = r\sin\phi$. Aleshores, escrivim el nombre complex també en la forma $r(\cos\phi + i\sin\phi)$.

Si ara fem el desenvolupament en sèrie de Tailor de les funcions $e^{i\phi}$, $\sin\phi$, $\cos\phi$, comprovem de seguida l'anomenada identitat d'Euler:

$$e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi \tag{6.8}$$

Per aquest motiu, una escriptura alternativa (pot ser la més habitual en ciència) per a un nombre complex és $re^{i\phi}$. Hi ha diferents demostracions de la fórmula d'Euler. Per exemple, podem partir de la funció $f(\phi) = (\cos\phi + i\sin\phi)e^{-i\phi}$ i comprovar que la seua derivada és zero, cosa que vol dir que $f(\phi)$ és la funció constant. Calculant $f(\phi)$ en $\phi = 0$ trobem que l'esmentada constant és la unitat. És a dir, trobem que $(\cos\phi + i\sin\phi)e^{-i\phi} = 1$, que no és més que una reescriptura de la identitat d'Euler.