の関係でつながっている。ここで a_i , a_i' は複素数の定数で次の関係を満たしている。

なぜ同じ？
定常状態をつくるための a_1 , a_2 の関係式？

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_1' \\ a_2 & a_2' \end{pmatrix}$$ ← ユニタリー行列になるはず？？？

(9.18) , (9.19) から導きだした E だったので

$$\begin{cases} C_1 = a_1 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ C_2 = a_2 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \end{cases} \rightarrow \quad \frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E-H_{11}} \quad , \quad |a_1|^2+|a_2|^2 = 1$$

$$|a_1|^2+|a_2|^2 = 1 \quad , \quad \frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_{\mathrm{I}}-H_{11}} \qquad (10.5)$$

$$|a_1'|^2+|a_2'|^2 = 1 \quad , \quad \frac{a_1'}{a_2'} = \frac{H_{12}}{E_{\mathrm{II}}-H_{11}} \qquad (10.6)$$

$$(\,|\,\mathrm{I}\,\rangle\,,|\,\mathrm{II}\,\rangle\,) = (\,|\,1\,\rangle\,,|\,2\,\rangle\,)\boxed{\begin{pmatrix} a_1 & a_1' \\ a_2 & a_2' \end{pmatrix}}$$

底の変換行列

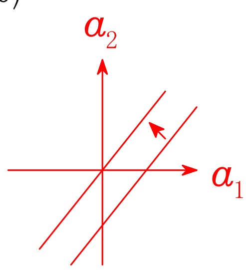
● $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ が固有ベクトルであれば $\dfrac{a_1}{a_2} = \dfrac{H_{12}}{E_{\mathrm{I}}-H_{11}}$ である。

なぜなら

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} H_{11}-E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22}-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$a_1(H_{11}-E)+a_2H_{12} = 0 \rightarrow a_2 = -\frac{H_{11}-E}{H_{12}}a_1 \quad \cdots \quad ①$$

$$a_1H_{21}+a_2(H_{22}-E) = 0 \rightarrow a_2 = -\frac{H_{21}}{H_{22}-E}a_1 \quad \cdots \quad ②$$



①、②を a_2 が a_1 の関数であるとみれば、自明な解を持つためには、①、②のグラフが重なる必要がある。つまり

$$\frac{a_2}{a_1} = \frac{E-H_{11}}{H_{12}} = \frac{H_{21}}{E-H_{22}}$$ を満たしていなければならない。

そしてこの条件を満たす $\boldsymbol{E}$ が $\boldsymbol{E}_{\mathrm{I}}$ と $\boldsymbol{E}_{\mathrm{II}}$ だったので

$\begin{pmatrix} \boldsymbol{H}_{11} & \boldsymbol{H}_{12} \\ \boldsymbol{H}_{21} & \boldsymbol{H}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{E}_{\mathrm{I}} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ であり、そのとき $\dfrac{a_1}{a_2} = \dfrac{\boldsymbol{H}_{12}}{\boldsymbol{E}_{\mathrm{I}} - \boldsymbol{H}_{11}}$ となる。

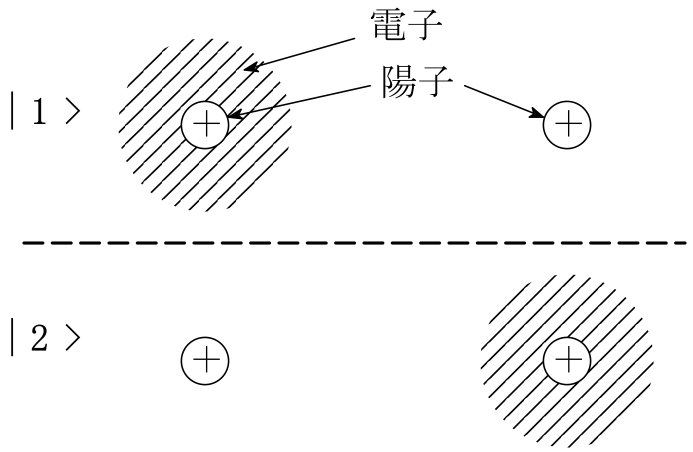
同様に

$\begin{pmatrix} \boldsymbol{H}_{11} & \boldsymbol{H}_{12} \\ \boldsymbol{H}_{21} & \boldsymbol{H}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \end{pmatrix} = \boldsymbol{E}_{\mathrm{II}} \begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \end{pmatrix}$ であり、そのとき $\dfrac{a_1'}{a_2'} = \dfrac{\boldsymbol{H}_{12}}{\boldsymbol{E}_{\mathrm{II}} - \boldsymbol{H}_{11}}$ となる。

● 水素分子イオン

正にイオン化された水素分子は、2個の陽子と、それらのまわりをうろうろしている1個の電子とから構成されている。

どちらかの陽子に電子がひっついている2つの状態が考えられる。
この2つの状態を基本状態とする。



水素原子がエネルギーの一番低い状態（基底状態）にあるような状況だけを考える。スピンについては無視する。

電子が1つの陽子から、もう1つの陽子のところに飛躍するのは、古典的には不可能である。（13．6電子ボルト以上のエネルギーが必要）
ところが、量子力学では可能である。つまり、電子が1つの陽子から、他の陽子へ移動する振幅が小さいながらも存在する。

そこでハミルトニアン行列を次のように書くことにする。

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{E}_0 & -\boldsymbol{A} \\ -\boldsymbol{A} & \boldsymbol{E}_0 \end{pmatrix}$$

これは前にやったことと同じである。
電子が行ったり来たりすることがないとすれば、正確に同一のエネルギーをもつ