

2

H_3^+ について、下図に示すような 距離の等しい直線構造 (A) と正三角形構造 (B) を考える。各原子の $1s$ オービタルを ϕ_i ($i=1,2,3$)、 H_3^+ のハミルトニアンを \hat{H} 、分子軌道エネルギーを E とする。Hückel 分子軌道法を使って、以下の問いに答えよ。

(注：この系の分子軌道は、炭素化合物 π 電子の Hückel 分子軌道を計算するのと同じ方法で計算できる)



問 1 積分 $H_{ij} = \int \phi_i^* \hat{H} \phi_j d\tau$ ($i=1,2,3; j=1,2,3$) \cdots (1)
のうちで クーロン積分 α をすべて書け。

問 2 直線構造 (A) について考える。(1)の中で 共鳴積分 β のうち、 0 以外のものをすべて書け。

問 3 正三角形構造 (B) について考える。(1)の中で 共鳴積分 β のうち、 0 以外のものをすべて書け。

問 4 (A) と (B) それぞれに対する永年行列式を、 $x = (\alpha - E) / \beta$ を用いて表せ。

問 5 問 4 の 2 つの永年行列式を解いて、(A) と (B) それぞれについて、分子軌道エネルギーを全て求めよ。

問 6 H_3^+ について、(A) と (B) の全電子エネルギーを計算して、どちらが安定かを決定せよ。

問 7 中性の H_3 について、(A) と (B) の全電子エネルギーを計算して、どちらが安定かを決定せよ。