

図3 R16, gap = 0.105 eV で計算したフェルミ面の極地断面積 (A) a軸回転、磁場は b\*-c\* 面内 (B) b\* 軸回転、磁場はa-c面内 (C) c軸回転、磁場は a\*-b\* 面内

表2 その他の原子のスレーター型原子軌道のパラメータ

	IP(ev)	$\zeta 1$	C1	$\zeta 2$	C2
H 1s	-13.6	1.0			
C 2s	-21.4	1.625			
	2p	-11.4	1.625		
Ni 4s	-10.95	2.1			
	4p	-3.74	2.1		
	3d	-10.6	5.75	0.5681	2.0

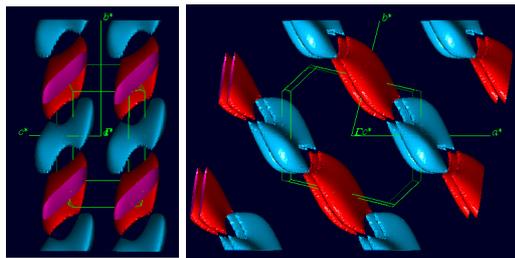


図4 R16, Gap = 0.105 eV で計算したフェルミ面

これらを用い計算した所、R16とR52、R74と著者らの使っているパラメータはほぼ似た様な結果を与え、これらのパラメータは3つのグループに分けられるようである。S3dBは他のパラメータより大きな重なり積分を与えフェルミ面も大きくなり HOMO-LUMO ギャップを 1.15 eVにするまでフェルミ面が残っている。R16,R52は逆に重なり積分が小さくなり、ギャップが 0.3 eV を超えたあたりでフェルミ面が消失する。

パラメータ	Calcd HOMO-LUMO Gap (eV)	FS消失 (eV)
S3dB	0.11259	1.16 (1.15 remain)
R16	0.21929	0.34 (0.33 remain)
R 52	0.22370	0.32 (0.31 remain)
R 74	0.11586	0.55 (0.54 remain)
標準パラメータ	0.10306	0.62 (0.61 remain)

それぞれのパラメータで極値断面積を調べたところ R16 のパラメータで HOMO-LUMO ギャップ 0.105 eV の時、図3のように実験結果によく一致する結果が得られた。この時のフェルミ面の形状を図4に示す。

また、赤外領域に現れる電子スペクトルを説明する為に (A) Ni(tm<sub>2</sub>dt)<sub>2</sub>, (B) Ni(dmdt)<sub>2</sub>, (C) Ni(ptdt)<sub>2</sub>, (D) Pd(dt)<sub>2</sub> の Joint Density of Statesの計算を行ったところ、吸収スペクトル (図5) によく対応する結果 (図6) が得られたので当日報告する。

- 1) R. Hoffmann et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 1979, **101**, 592-598
- 2) R. Hoffmann et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 1987, **109**, 118-124
- 3) R. Hoffmann et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 1995, **117**, 10108-10112

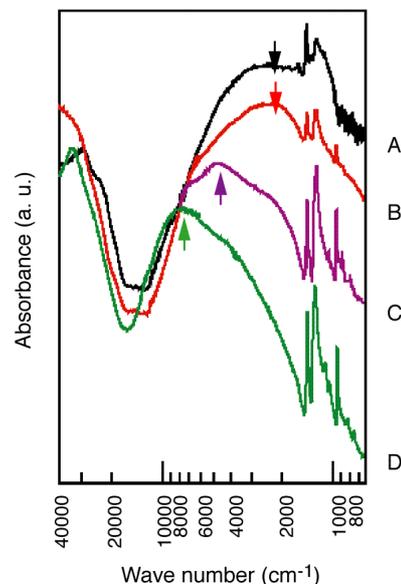


図5 類縁体の電子スペクトル。

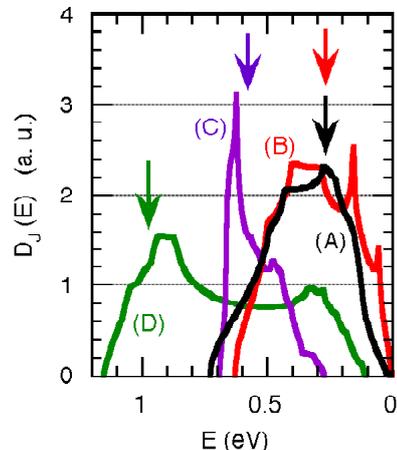


図6 計算した Joint density of state