

## 超球面探索法を用いたニッケロセンの異性体探索

<sup>1</sup>和歌山大院システム工, <sup>2</sup>和歌山大システム工

○徳田 遥祐<sup>1</sup>, 山門 英雄<sup>1,2</sup>

### Isomer search of Nickelocene using Scaled Hypersphere Search Method

○Yosuke Tokuda<sup>1</sup>, Hideo Yamakado<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Graduate School of Systems Engineering, Wakayama Univ., Japan

<sup>2</sup> Faculty of Systems Engineering, Wakayama Univ., Japan

#### 【序】

ニッケロセン[1]は、シクロペンタジエニル環 2 つがニッケル原子を挟んだ構造の有機金属化合物である[2]。シクロペンタジエニル環の中央部がニッケルに配位しており、特殊な結合をもつ。

本研究では、超球面探索法[3]を用いてニッケロセンの異性体を探索する。

#### 【方法】

エネルギー計算には Gaussian09 を、探索には GRRM17[4]内の ADDF 法（非調和下方歪追跡法）を用い、計算手法/基底関数は HF/3-21G を用いて、結合切り替わりを含めたニッケロセンの異性体の探索を行った。初期構造は D5d 対称のニッケロセン分子から出発した。オプションには LADD=6, gauproc=8 を用いた。

#### 【結果・考察】

HF/3-21G を用いた ADDF 探索により、初期構造を含めて、結合の切り替わりも許した分子の EQ 点が 12 点、TS 点が 10 点得られた(Fig.1)。気相中で Fig.1 に示したような異性体が存在することが示唆された。EQ1 は Meta-GGA 汎関数を用いた理論研究で、ニッケラベンゼンとして知られる分子である [5]。

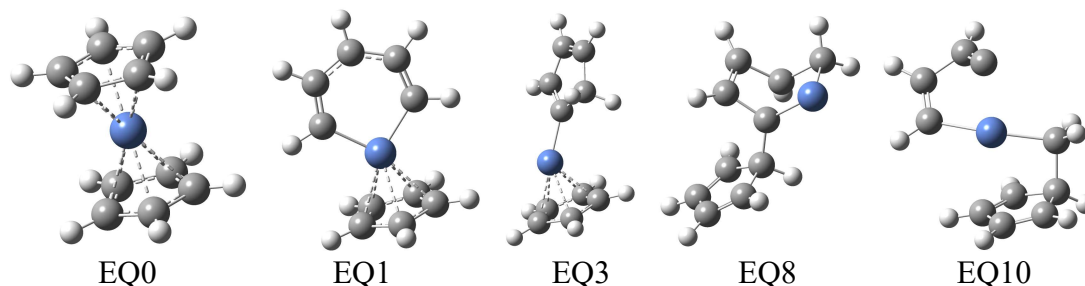


Fig. 1. Example of Equilibrium Structures obtained by ADDF search (HF/3-21G). EQ0 is the initial structure.

#### 【参考文献】

- [1] Fischer, E. O., Pfab, W., *Z. Anorg. Allg. Chem.* **1953**, 274, 316-322.  
 [2] P. Seiler and J. D. Dunitz, *Acta Cryst.* **1980**, B36, 2255-2260.  
 [3] (a) K. Ohno and S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.*, **2004**, 384, 277; (b) S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A* **2005**, 109, 5742; (c) K. Ohno, S. Maeda, *J. Phys. Chem. A* **2006**, 110, 8933.  
 [4] (a) S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Sumiya, M. Takagi, K. Suzuki, M. Hatanaka, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma and K. Ohno, GRRM17, see [http://iqce.jp/GRRM/index\\_e.shtml](http://iqce.jp/GRRM/index_e.shtml) (accessed date 3 March, 2020); (b) S. Maeda, K. Ohno and K. Morokuma, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, 15, 3683.  
 [5] *Comprehensive Organometallic Chemistry IV*, 8.06.2.1, **2022**, ISBN:978-0-323-91350-8.