

Teil III

Das Fullerenderivat $C_{60}Cl_{30}$

Kapitel 10

Fullerenderivat $C_{60}Cl_{30}$

10.1 Messung

Die Fullerene sind neben Diamant und Graphit eine weitere Modifikation des Kohlenstoffs. Alle Fullerene besitzen eine Käfigstruktur, die sich aus fünf- und sechsgliedrigen Kohlenstoffringsystemen zusammensetzt. 1985 erschien die erste Veröffentlichung zu Fullerenen in der Zeitschrift Nature [60]. Für diese Entdeckung bekamen Robert F. Curl jr., Sir Harold W. Kroto und Richard E. Smally 1996 den Nobelpreis für Chemie. Das C_{60} stellt den Hauptvertreter dieser Verbindungsklasse dar und wird zu Ehren des Architekten Richard Buckminster Fuller auch Buckminster-Fulleren genannt. Hier liegen 12 Fünf- und 20 Sechsringe in einer hochsymmetrischen (I_h) Anordnung vor. Alle Kohlenstoffatome besitzen dieselbe chemische Umgebung und sind äquivalent. Im freien C_{60} liegen nur zwei unterschiedliche Bindungstypen vor, die Bindungen zwischen zwei verknüpften Sechsringen ([6,6]-Bindungen), die einen formalen Doppelbindungscharakter besitzen, und die formalen Einfachbindungen zwischen einem Fünfring und Sechsring ([5,6]-Bindungen). Eine genaue Strukturbeschreibung mittels Röntgenbeugung ist durch die freie Rotation der kugelsymmetrischen Moleküle im Kristallgitter nicht möglich. Aus diesem Grund ist keine experimentelle Ladungsdichtestudie von dem freien C_{60} bekannt. Durch Addition von Seitenketten konnte die Beweglichkeit im Kristallgitter eingeschränkt und somit zwei Fullerenderivate experimentell untersucht werden [61],[62].

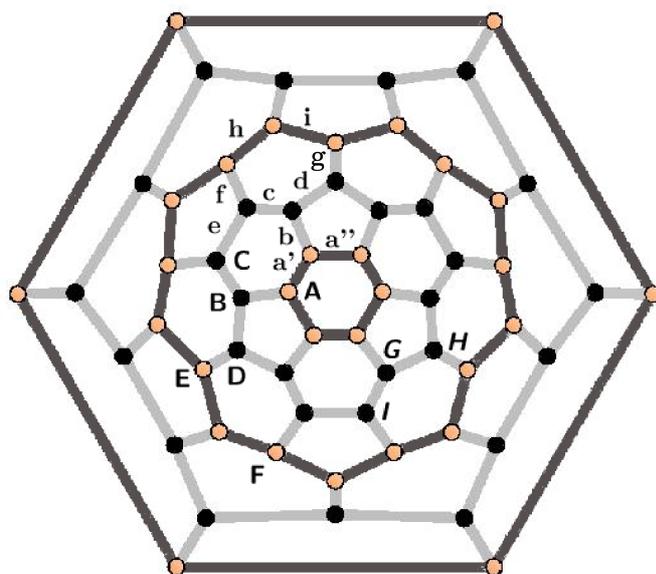


Abbildung 10.1: $C_{60}Cl_{30}$

Die sphärische Geometrie des freien C_{60} -Moleküls ändert sich drastisch, wenn halogenierte Fullerene betrachtet werden. Je nach Anzahl der addierten Fluor-, Chlor- oder Bromatome beobachtet man eine entsprechend starke Deformation des Kohlenstoffkäfigs [63],[64],[65],[66]. Diese Deformation wird hervorgerufen durch die zum Teil enorme Verlängerung/Verkürzung der C–C Bindungen.

Im Fall von $C_{60}Cl_{30}$ erkennt man zwei, im Käfig gegenüberliegende, planare, aromatische Ringsysteme und einen äquatorialen 18π -*trans*-Annulen-Ring. Die aromatischen Systeme sind durch zwei 15-gliedrige Ringe, die aus chlorierten, sp^3 -hybridisierten Kohlenstoffatomen bestehen, voneinander getrennt. Diese Anordnung führt zu einer „Trommelform“ des Kohlenstoffkäfigs. Die in dieser Arbeit untersuchte Substanz wurde in Form von Kristallen von I. Troyanov (Universität Moskau) zur Verfügung gestellt. Abbildung 10.1 zeigt das Schlegeldiagramm der Verbindung. Die schwarz markierten Atome bezeichnen die chlorierten Kohlenstoffatome, während die unhalogenierten durch orangefarbene Atome dargestellt sind. In der Darstellung sind die aromatischen Bindungen durch eine dunklere Färbung erkennbar. Auf die Bezeichnung der Bindungen (a-i) und der Atome (A-I) wird im Rahmen der topologischen Untersuchung (10.4) näher eingegangen. Die molekulare Struktur in der ORTEP-Darstellung ist in Abbildung 10.2 in der Auf- und Seitenansicht des $C_{60}Cl_{30}$ -Moleküls gezeigt.

Die Messung fand am AED 5 in Berlin statt. Es wurden 248726 Reflexe bis zu einer Auflösung von 1.17 \AA^{-1} gemessen. Davon waren 36787 symmetrieunabhängige Reflexe, was eine Redundanz von 6.6 ergibt. In Tabelle 10.1 sind weitere Details der Messung angegeben. Für das sphärische Modell wurde auf die Strukturlösung von Troyanov [66] zurückgegriffen. Durch die C_i -Symmetrie des Fullerenmoleküls befindet sich nur die Hälfte des Moleküls in der asymmetrischen Einheit. Zusätzlich zu dem $C_{60}Cl_{30}$ -Molekül befindet sich noch ein Cl_2 -Molekül in der Elementarzelle, welches nur zu 9% populiert ist. Das sphärische Modell war der Ausgangspunkt für die Multipolverfeinerung mittels XD.

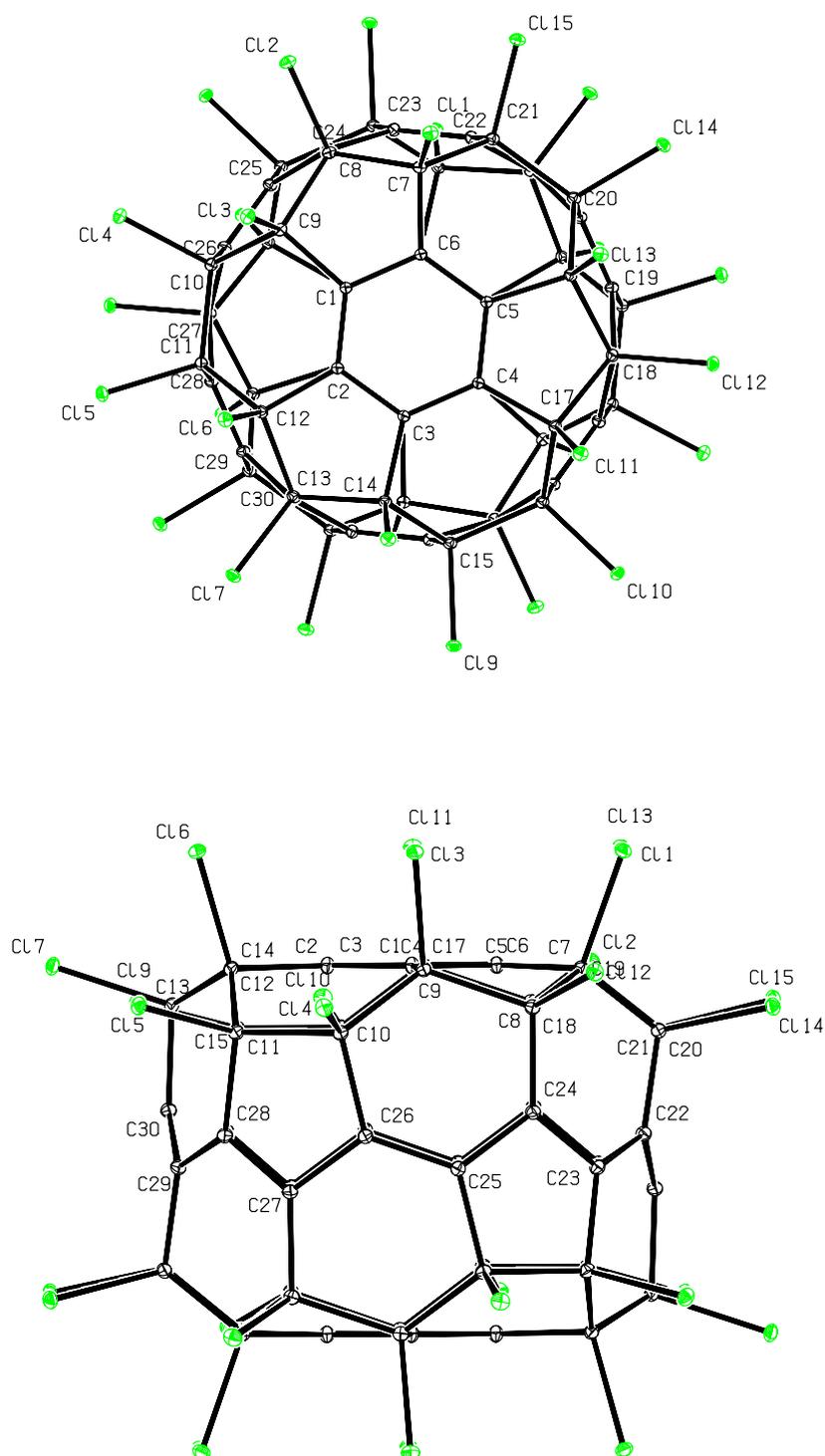


Abbildung 10.2: ORTEP [27] Plot von $C_{60}Cl_{30}$ in zwei Orientierungen, 50 % Wahrscheinlichkeit für die Verschiebungsellipsoide der bei 20 K gemessenen Struktur.

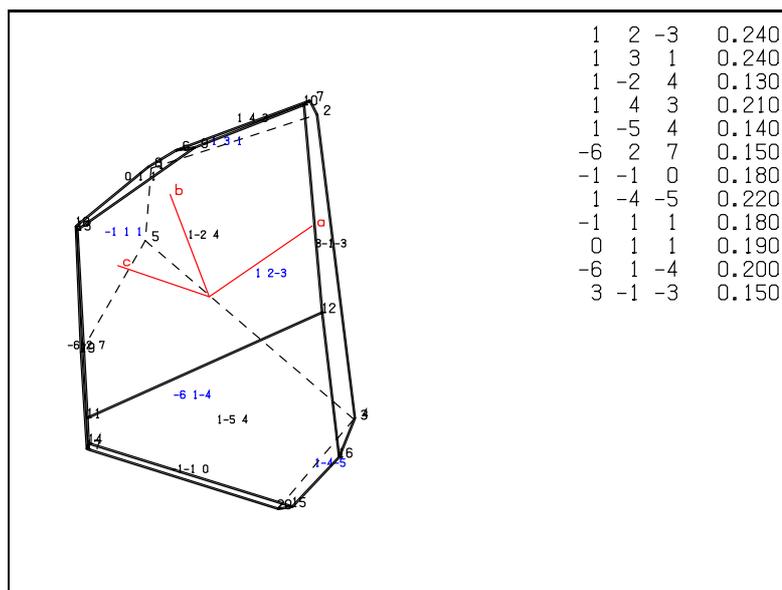


Abbildung 10.3: Kristallgestalt (links) und Abstand der Kristallflächen zum Zentrum (rechts). Sichtbare Flächen sind mit schwarzen, verdeckte mit blauen Indizes gekennzeichnet.

Für den Datensatz wurde aufgrund des großen Absorptionskoeffizienten eine analytische Absorptionskorrektur durchgeführt. Im Rahmen der Absorptionskorrektur wurden die optisch vermessenen Kristallflächen mit Hilfe des Programms EUHEDRAL [67] verfeinert. Dies führte zu einer Verbesserung des internen R-Wertes. Die Kristallgestalt und die Abstände der Kristallflächen zum Mittelpunkt des Kristalls sind in Abbildung 10.3 gezeigt.

10.2 Multipolverfeinerung

Im Rahmen der Multipolverfeinerung wurden die Populationen für die Kohlenstoff- und Chloratome des Fullerenmoleküls bis hin zum Hexadekapol verfeinert. Chemisch äquivalente Atome, wie z. B. die Kohlenstoffatome des planaren, aromatischen Ringsystems (Atom A in Abbildung 10.1) wurden *constraint*. In Tabelle A.21 im Anhang sind die lokalen Koordinatensysteme und die "*chemical constrains*" sowohl für die Kohlenstoffatome, als auch für die Chloratome angegeben. Wie bei früheren Untersuchungen an Fluorverbindungen [68] wurde für die Chloratome eine zylindrische Symmetrie angenommen, während die Multipolparameter für Kohlenstoffatome frei verfeinert wurden. Die Atome des nur teilweise besetzten Cl_2 -Moleküls wurden nur bis zum Monopollevel ($l=0$) verfeinert. Dies führte zu 598 Parametern (davon 10 κ -Parameter), die verfeinert wurden. Das Multipolmodell ließ sich bis zu einem R_1 -Wert von 1.65% verfeinern. Weitere Gütefaktoren sind in Tabelle 10.2 gegeben.

Summenformel	$C_{60}Cl_{30} \cdot 0.097Cl_2$
Formelmasse / [$g \cdot mol^{-1}$]	1790.98
Kristallsystem	Monoklin
Raumgruppe	$P2_1/n$ (Nr. 14)
Z	2
Meßtemperatur [$^{\circ}K$]	20
Gitterkonstanten:	
a / [\AA]	12.520(11)
b / [\AA]	13.479(11)
c / [\AA]	17.088(23)
α [$^{\circ}$]	90
β [$^{\circ}$]	99.95(5)
γ [$^{\circ}$]	90
V / [\AA^3]	2840.48(6)
Dichte / [$g \cdot cm^{-3}$]	2.0940(30)
$F(000)$	1746.6
Absorptionskoeffizient μ / [mm^{-1}]	1.490
Kristallgröße / [mm]	$0.45 \cdot 0.4 \cdot 0.35$
Wellenlänge λ / [\AA]	0.71073
max. 2θ [$^{\circ}$]	58.75
$(\sin \theta / \lambda)_{max}$ / [\AA^{-1}]	1.168
Grenzreflexe (nach Mittelung)	$-29 \leq h \leq 28,$ $0 \leq k \leq 30,$ $0 \leq l \leq 39$
Anzahl gemessener Reflexe	248726
davon symmetrieunabhängig	36787
davon mit $F_o > 2.5 \sigma(F_o)$	30212
Vollständigkeit	96.4%
Redundanz nach Integration	6.6
$R_{int}(F^2)$	0.032

Tabelle 10.1: Kristallographische Daten von $C_{60}Cl_{30}$

Um die Qualität der gemessenen Daten zu überprüfen, wurde, wie schon bei den anderen Verbindungen, das Verhältnis beobachteter Struktur faktoren zu berechneten Struktur faktoren gegen die Auflösung aufgetragen (Abbildung 10.4). Es zeigt sich die typische Streuung bei hohen Beugungswinkeln. Einzelne Ausreißer sind in diesem Fall jedoch kaum vorhanden.

Multipol	
Reflexe	30121
Parameter	598
Refl./Par.	50.61
R _w (F)	0.0174
R ₁ (F)	0.0165
R _{all} (F)	0.0252
Gütefaktor	0.9139

Tabelle 10.2: Gütefaktoren der Multipolverfeinerung

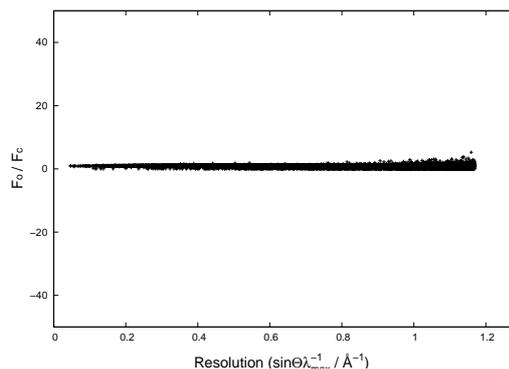
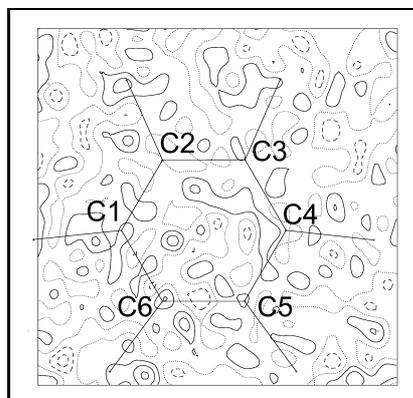


Abbildung 10.4: Verhältnis von F_O/F_C in Abhängigkeit von der Auflösung

10.3 Restelektronendichte

Bei der Betrachtung der Restelektronendichte (Abbildung 10.5) fällt auf, dass sie um einiges größer ist als die bereits diskutierten organischen Verbindungen, die in dieser Arbeit untersucht wurden. Die höchsten Peaks der Restelektronendichte befinden sich ausschließlich in der Nähe der Chloratome, während für den Kohlenstoffkäfig ein guter *fit* erzielt wurde. Die unzureichende Beschreibung der Chloratome ist zum Teil auf eine zu geringe Flexibilität im Multipolmodell zurückzuführen.



Maximum bis zu 1.17 Å ⁻¹	1.59
Minimum bis zu 1.17 Å ⁻¹	-0.36
RMS bis zu 1.1 Å ⁻¹	0.8
Maximum bis zu 1.0 Å ⁻¹	1.30
Minimum bis zu 1.0 Å ⁻¹	-0.33
RMS bis zu 1.0 Å ⁻¹	0.07
Maximum bis zu 0.9 Å ⁻¹	1.15
Minimum bis zu 0.9 Å ⁻¹	-0.30
RMS bis zu 0.9 Å ⁻¹	0.06

Abbildung 10.5: Restdichten nach der Multipolverfeinerung in der Ebene des planaren, aromatischen Ringsystems. Konturlinien im Abstand von 0.1 eÅ⁻³. Durchgezogene bzw. gestrichelte Linien entsprechen positiven bzw. negativen Konturen. Die Nullkontur ist gepunktet dargestellt. In der Tabelle (rechts) sind die maximalen Restdichten bei unterschiedlich abgeschnittenen Auflösungen [e/Å³] angegeben.

10.4 Topologische Analyse

10.4.1 Kritische Punkte

Die topologische Analyse des Fullerenmoleküls lässt genaue Aussagen zur Bindungssituation im Käfig zu. Es konnten hierbei alle zu erwartenden bindungskritischen Punkte gefunden werden. Wie bereits erwähnt, findet durch die Chlorierung eine starke Deformation des C_{60} -Käfigs statt. Dadurch kommt es zu einer Veränderung der C–C Bindungslängen. Während im freien C_{60} nur zwei unterschiedliche Bindungen (mit $l_{5,6}=1.448$ Å, $l_{6,6}=1.371$ Å) vorliegen, findet man im $C_{60}Cl_{30}$ Molekül stark unterschiedliche Bindungslängen, die von $1.3717(5)$ Å bis $1.7044(3)$ Å reichen. In Abbildung 10.6 ist sowohl die experimentelle, als auch die aus zwei theoretischen Berechnungen stammenden Elektronendichten am bindungskritischen Punkt gegen die Bindungslänge aufgetragen. In allen drei Fällen beobachtet man eine lineare Beziehung, wie sie auch bei dem Dodekakis(ethoxycarbonyl)- C_{60} -Fulleren gefunden wurde [61].

Die Ausgleichsgerade der beiden *single point* Rechnungen (Hartree-Fock-Methode (6-31G(d,p)): rot, DFT-Methode (6-31G(d)): blau) verlaufen parallel zueinander und sind nur leicht verschoben. Im Durchschnitt liegen die Werte für ρ am bindungskritischen Punkt der HF-Rechnung um 0.07 e/Å³ über den Werten der DFT-Rechnung. Die Ausgleichsgerade der experimentellen Werte (grün) liegt genau zwischen den beiden theoretischen Geraden und spricht für eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment.

Um die Bindungsordnung n , ausgehend von der Elektronendichte ρ am bindungskritischen Punkt, zu bestimmen, führte Bader folgende Gleichung ein [21] :

$$n = e^{\{A(\rho-B)\}} \quad (10.1)$$

Man geht von idealen Einfach-, Zweifach- und Dreifachbindungen in Ethan, Ethen und Ethin aus. Die Elektronendichte der bindungskritischen Punkte wurde mit dem Basissatz 6-31G(d) nach der Dichtefunktionaltheorie (B3LYP) theoretisch berechnet. Durch einen *fit* der Gleichung 10.1 an die theoretisch berechneten Werte der Modellverbindungen erhält man die Parameter $A=1.02289$ und $B=1.64585$. Im Fall des $C_{60}Cl_{30}$ -Kohlenstoffkäfigs ergibt sich danach eine große Spannweite an Bindungsordnungen, die von Doppelbindungen bis zu Werten deutlich kleiner als eins reichen.

Die in Abbildung 10.6 angegebenen Werte für die C–C Bindungen können in fünf Gruppen eingeteilt werden.

Die erste Gruppe besitzt einen Bindungslängenbereich von 1.35 - 1.40 Å und zeigt die Bindungen des planaren aromatischen Ringsystems (a', a'') sowie des Annulens-Ringes(h, i) (siehe Abbildung 10.1). Die Bindungsordnung dieser Bindungen befindet sich zwischen $n=2$ und $n=1.5$. Deren Bindungslängen liegen um den Wert der (6,6)-Bindungen im freien C_{60} .

Die zweite Gruppe besitzt einen Bindungslängenbereich um 1.50 Å und beinhaltet die sp^2 - sp^3 Bindungen (b, f, g), die von den aromatischen Systemen wegführen. Die Bindungsordnungen liegen zwischen $n=1$ und $n=1.5$, wobei an das sp^3 -hybridisierte Kohlen-

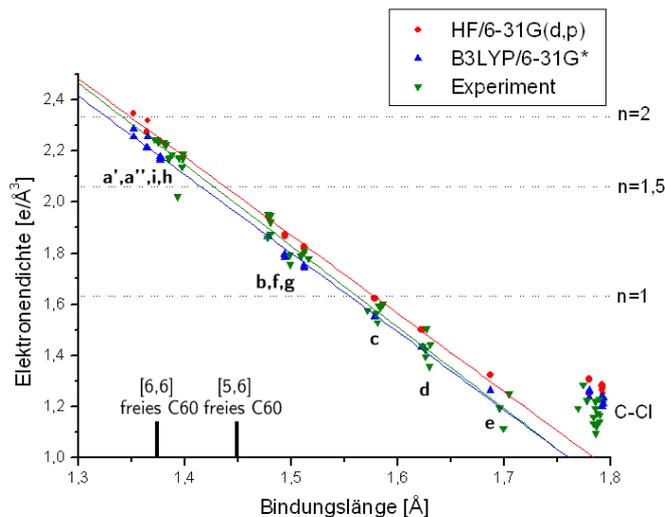


Abbildung 10.6: Auftragung der Elektronendichte ρ gegen die Bindungslänge der C–C Bindungen im $C_{60}Cl_{30}$ mit den Resultaten vom Experiment und von zwei theoretischen Berechnungen. Die kleinen Buchstaben beziehen sich die auf Bindungsarten nach Abbildung 10.1.

stoffatom jeweils ein Chloratom gebunden ist. Im Bereich der (5,6)-Bindung des freien Fulleren ($l=1.448 \text{ \AA}$) findet sich keine Bindung.

Drei weitere Gruppen mit Bindungslängen nahe 1.58 \AA , 1.63 \AA und 1.70 \AA sind für die Bindungen c, d und e zu finden. Sie alle besitzen ungewöhnlich lange C–C Abstände und eine Bindungsordnung kleiner als Eins. In allen Fällen sind an beide sp^3 -Kohlenstoffatome ein Chloratom gebunden. Man muss allerdings bei Bindungsordnungen kleiner Eins berücksichtigen, dass diese Methode zur Bestimmung von n zwischen eins und drei ausgerichtet ist und sich nur mit einer gewissen Ungenauigkeit auf Werte <1 extrapolieren lässt.

10.4.2 Atomare Volumina und Ladungen

Die Resultate der Integration über die atomaren Volumina für das $C_{60}Cl_{30}$ Molekül sind in Tabelle 10.3 dargestellt. Die Summe der atomaren Ladungen ergibt $0.00 e$ und die Abweichung zwischen der Summe der atomaren Volumina und dem Zellvolumen kann durch das nur teilweise besetzte Chloratom erklärt werden, welches bei der Intergation nicht berücksichtigt wurde. Bei der Betrachtung der Unterschiede zwischen V_{tot} und V_{001} findet man für die Kohlenstoffatome eine durchschnittliche Differenz von 0.58 \AA^3 oder 7.25% . Für die Chloratome ergibt sich eine durchschnittliche Differenz von 3.20 \AA^3 bzw. 10.98% . Im Gegensatz zum Volumen sind die elektronischen Populationen N_{tot} und N_{001} praktisch gleich. Aufgrund ihrer chemischen Umgebung können die Kohlenstoffatome im

$C_{60}Cl_{30}$ -Molekül in 6 Gruppen unterteilt werden (A-F, siehe Abbildung 10.1). Die Kohlenstoffatome des Annulen-Ringes C22-C30 (E und F) besitzen dabei die größten Volumina ($\varnothing V_{tot}=9.86(4)\text{\AA}^3$ bzw. $9.81(26)\text{\AA}^3$). Im Vergleich dazu zeigen die Kohlenstoffatome des planaren aromatischen Ringsystems C1-C6 (Gruppe A) mit $\varnothing V_{tot}=9.11(9)\text{\AA}^3$ leicht reduzierte Volumina. Deutlich geringere Volumina zeigen dagegen die sp^3 hybridisierten Kohlenstoffatome der Gruppen B, C und D, die jeweils an ein Chloratom gebunden sind. Das durchschnittliche Volumen der C-Atome der Gruppe B beträgt $\varnothing V_{tot}=6.48(4)\text{\AA}^3$, für die Atome der Gruppe C $\varnothing V_{tot}=6.47(3)\text{\AA}^3$ und für die der Gruppe D $\varnothing V_{tot}=6.02(5)\text{\AA}^3$. Im Vergleich zu den sp^2 hybridisierten Kohlenstoffatomen ist der Unterschied zwischen V_{tot} und V_{001} bei den letzten Gruppen durch die zusätzliche Verknüpfung zu den Chloratomen viel kleiner. Für die Chloratome beobachtet man keine so großen Unterschiede, sie zeigen ein durchschnittliches Volumen von $29.3(17)\text{\AA}^3$.

In Bezug auf die atomaren Ladungen können alle Atome als neutral angesehen werden. Es findet keine Polarisierung der Atome statt.

Atomname	Gruppe	V_{tot}	V_{001}	N_{tot}	N_{001}	Q
C(1)	A	9.07	8.41	5.93	5.93	0.07
C(2)	A	8.96	8.34	5.94	5.94	0.06
C(3)	A	9.04	8.42	5.93	5.93	0.07
C(4)	A	9.15	8.56	5.94	5.94	0.06
C(5)	A	9.20	8.60	5.93	5.93	0.07
C(6)	A	9.22	8.50	5.94	5.94	0.06
C(7)	B	6.51	6.44	5.95	5.95	0.05
C(8)	D	6.06	6.04	5.82	5.82	0.18
C(9)	B	6.47	6.44	5.94	5.94	0.06
C(10)	C	6.47	6.43	5.91	5.91	0.09
C(11)	C	6.42	6.38	5.90	5.90	0.10
C(12)	B	6.41	6.37	5.95	5.95	0.05
C(13)	D	6.03	6.00	5.82	5.82	0.18
C(14)	B	6.50	6.45	5.94	5.94	0.06
C(15)	C	6.48	6.44	5.91	5.91	0.09
C(16)	C	6.49	6.45	5.90	5.90	0.10
C(17)	B	6.52	6.47	5.95	5.95	0.05
C(18)	D	5.96	5.95	5.81	5.81	0.19
C(19)	B	6.47	6.43	5.94	5.94	0.06
C(20)	C	6.47	6.43	5.91	5.91	0.09
C(21)	C	6.49	6.42	5.90	5.90	0.10
C(22)	F	9.35	8.90	6.09	6.09	-0.09
C(23)	F	10.13	8.96	6.09	6.09	-0.09
C(24)	E	9.88	8.98	6.05	6.05	-0.05
C(25)	F	9.77	8.90	6.07	6.07	-0.07
C(26)	F	9.96	9.20	6.12	6.12	-0.12
C(27)	E	9.81	9.04	6.06	6.06	-0.06
C(28)	F	9.92	9.01	6.10	6.09	-0.10
C(29)	F	9.75	8.73	6.09	6.09	-0.09
C(30)	E	9.88	9.04	6.05	6.05	-0.05
CL(1)	G	30.60	27.00	17.12	17.11	-0.12
CL(2)	H	29.18	25.56	16.95	16.93	0.05
CL(3)	G	26.32	25.43	17.14	17.14	-0.14
CL(4)	I	29.89	26.46	17.08	17.07	-0.08
CL(5)	I	30.39	25.80	17.08	17.06	-0.08
CL(6)	G	26.65	25.31	17.13	17.12	-0.13
CL(7)	H	29.24	25.51	16.94	16.93	0.06
CL(8)	G	29.11	26.51	17.14	17.13	-0.14
CL(9)	I	32.20	26.38	17.08	17.06	-0.08
CL(10)	I	28.40	26.55	17.09	17.08	-0.09
CL(11)	G	28.77	26.92	17.13	17.12	-0.13
CL(12)	H	27.00	25.07	16.94	16.94	0.06
CL(13)	G	29.05	26.31	17.14	17.13	-0.14
CL(14)	I	31.60	26.18	17.08	17.06	-0.08
CL(15)	I	30.53	26.65	17.09	17.07	-0.09
Summe		677.78	618.35	435.00	434.77	0.00

Werte sind angegeben in Å³ und e.

Tabelle 10.3: Atomare Eigenschaften von C₆₀Cl₃₀

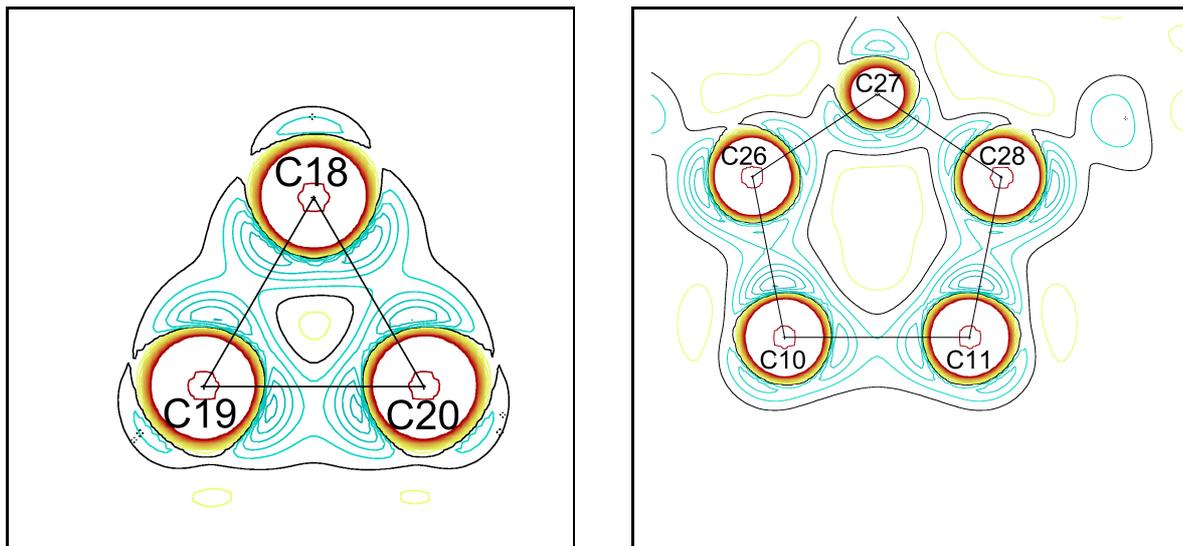


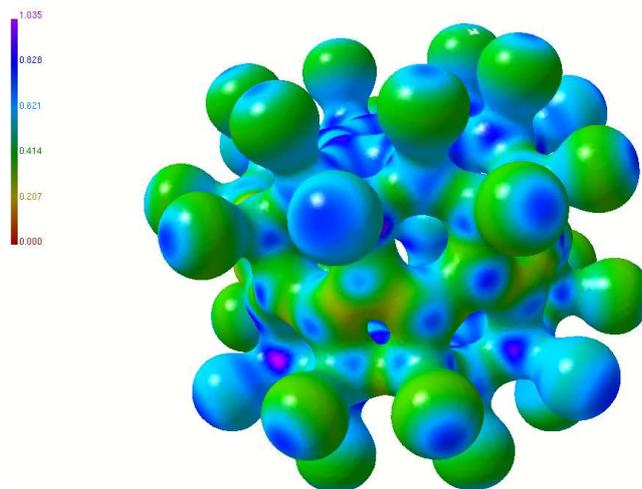
Abbildung 10.7: Laplacefunktion im Cyclopropanring von Naltrexon (links) und dem Fünfring im $C_{60}Cl_{30}$ (rechts) mit der Bindung C10–C11. Konturlinienintervall $5 \text{ e}/\text{\AA}^5$, blau/rot - negativ/positiv.

10.5 Laplacefunktion

Es ist bekannt, dass die extrem langen C–C Bindungen in halogenierten Fullerenderivaten durch Sauerstoff angegriffen werden können und sich unter Bindungsspaltung intramolekulare Ether bilden [69]. Im Fall von $C_{60}Cl_{30}$ zeigen diese extrem verlängerten Bindungen vom Typ e (z.B. C10–C11) trotz der großen Bindungslänge einen gebogenen Charakter. In Abbildung 10.7 ist auf der rechten Seite die Laplacefunktion des Fünfringes mit der Bindung C10–C11 abgebildet. Man erkennt die für ein gespanntes System typische „Bananenbindung“ in Form einer deutlich gebogenen Bindung. Dabei liegt erwartungsgemäß das Minimum der sattelförmigen Verteilung nicht auf der direkten Verbindungslinie der beteiligten Atome. Eine vergleichbare C–C Bindung wurde in einem Barbaralanderivat gefunden [45]. Die Länge einer Bindung in dem Dreiring betrug 1.65 \AA und die topologische Analyse ergab für die Elektronendichte am bcp $\rho=1.29 \text{ e}/\text{\AA}^3$ und für die Laplacefunktion $\nabla^2\rho=-1.3 \text{ e}/\text{\AA}^5$. Die Länge der Bindung C10–C11 im Fullerenderivat beträgt 1.70 \AA und die Elektronendichte am bindungskritischen Punkt ist mit $\rho=1.24 \text{ e}/\text{\AA}^3$ und $\nabla^2\rho=-5.3 \text{ e}/\text{\AA}^5$ für die Laplacefunktion vergleichbar. In beiden Fällen liegt der Abstand der direkten Verbindungslinie zum bindungskritischen Punkt bei 0.06 \AA , während dieser für Bindungen im Cyclopropanring im Naltrexon (Abbildung 10.7, links) 0.08 \AA beträgt. Damit besitzt die Bindung des Fullerenderivates einen ähnlichen Spannungszustand, wie er in gespannten Ringsystemen, z.B. Dreiringen vorhanden ist. Die Ringspannung bewirkt demnach eine Verlängerung der Bindung, was zu erhöhter chemischer Reaktivität führt. Dieses Phänomen tritt u.a. auch bei den Stellenen [70] auf.

10.6 Elektrostatisches Potential

In Abbildung 10.8 ist das elektrostatische Potential auf die Isooberfläche der Elektronendichte bei einem Wert von $0.5 \text{ e}/\text{\AA}^3$ abgebildet. Durch die moderate Elektronegativitätsdifferenz zwischen Kohlenstoff (2.5 nach Pauling) und Chlor (3.0) beobachtet man kleine Potentialgradienten im $C_{60}Cl_{30}$ -Molekül. Deutlicher sind die Unterschiede bei dem $C_{60}F_{18}$ -Molekül [71]. Durch die deutliche Elektronegativitätsdifferenz zwischen C und F (4.0) beobachtet man in diesem Fall Regionen stark negativer Potentiale um die Fluoratome.



Moliso (c) 2005 Christian B. Hübschle

Abbildung 10.8: Elektrostatisches Potential von $C_{60}Cl_{30}$