

Teil III

Experimente & Ergebnisse

Kapitel 5

$C_{60}F_{18}$, Ein gespanntes Kohlenstoffsystem

5.1 $C_{60}F_{18}$, ein deformiertes Fulleren

5.1.1 Motivation

Fullerene sind neben dem Graphit und Diamant die zuletzt entdeckten Modifikationen des Kohlenstoffs. Diamant und Graphit wurden bereits 1796 beziehungsweise 1779 als Modifikationen des Kohlenstoffs erkannt. Jedoch dauerte es bis 1985 [34], bis die Fullerene entdeckt wurden. Für ihre Entdeckung haben Robert F. Curl jr., Sir Harold W. Kroto und Richard E. Smally 1996 den Nobelpreis für Chemie erhalten. Allen Fullerenen gemein ist ihr Aufbau aus sich abwechselnden Fünf- und Sechsecken, aus denen sich geschlossene Käfige bilden. Der bekannteste Vertreter der Fullerene ist das C_{60} , welches aus zwölf Fünfecken und 20 Sechsecken besteht und Ikosaeder-Symmetrie (I_h) aufweist. Es wurde nach dem Architekten geodätischer Kuppeln Buckminster Fuller Buckminsterfulleren genannt. Unter seinen 90 C–C-Bindungen gibt es nur zwei unterschiedliche Typen, die [6,6]- und die [5,6]-Bindungen, welche an zwei Sechsecken beziehungsweise einem Fünfeck und einem Sechseck angrenzen. Leider ist es durch die hohe freie Drehbarkeit nicht möglich, für Ladungsdichtestudien geeignete nicht fehlgeordnete Kristalle zu erhalten. Von substituierten Buckminsterfullerenen ist dies jedoch möglich [35, 36], da diese in ihrer Rotation behindert sind. Halogeniert man Fullerene, so können diese stark deformiert werden. Das hier untersuchte $C_{60}F_{18}$ ist an einer Seite gestaucht, so dass es im Aussehen einer Schildkröte oder einem Fußball mit zu geringer Luftfüllung ähnelt. Diese Deformation geht mit einer starken Streuung der C–C-Bindungslängen einher. Die C–C-Bindungslängen variieren von 1.3676(8) bis 1.6808(8) Å. Diese besonders langen C–C-Bindungen eignen sich hervorragend, um das Verhalten von Kohlenstoffbindungen unter extremen Bedingungen zu studieren.

5.1.2 Messung und Multipolverfeinerung

Das hier untersuchte Fulleren $C_{60}F_{18}$ wurde von Dr. S. I. Troyanov und Mitarbeitern in einer vierstündigen Reaktion von C_{60} mit K_2PtF_6 in einem Mischungsverhältnis von 1:4 bei 460–465°C hergestellt und durch Sublimation kristallisiert. Aufgrund der geringen Kristallabmessungen und des geringen Streuvermögens konnte $C_{60}F_{18}$ nur an einem Synchrotron gemessen werden. Dies geschah am Messplatz X10SA an der Swiss Light Source des Paul-Scherer-Instituts in Villigen in der Schweiz. Dieser eigentlich für Proteine kon-

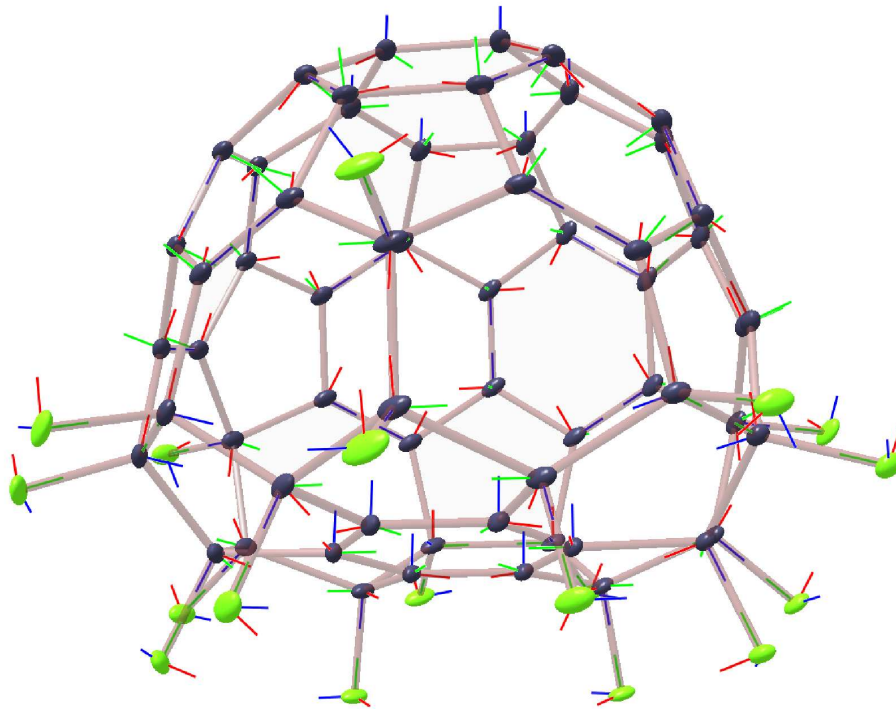


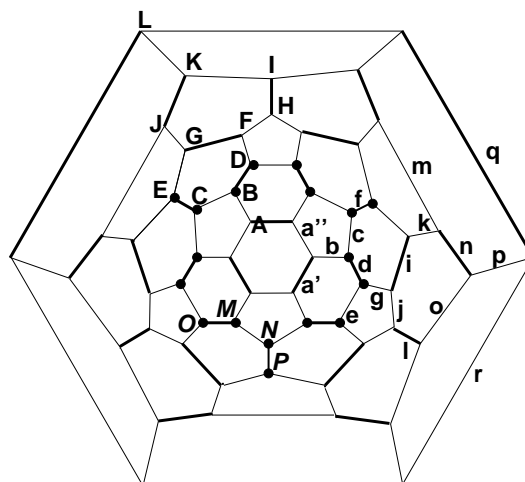
Abbildung 5.1: ADP-Ellipsoide und Struktur von $C_{60}F_{18}$

zipierte Messplatz ist mit einem sehr brillanten und intensitätsstarken Röntgenstrahl von nur $50 \times 10 \mu\text{m}^2$ Ausdehnung ausgestattet. Die Energie des Röntgenstrahls betrug 20 keV, was einer Wellenlänge von 0.6214 \AA entspricht. Da es sich bei dem dort installierten Diffraktometer um eines mit nur einem drehbaren Kreis (ω) handelte, wurde zum besseren Abdecken des reziproken Raumes ein kleines handbetriebenes Gerät (4DX-ray System AB) benutzt, welches χ - und φ -Drehungen der Eulerwiege simulierte. Außerdem wurde an diesem Messplatz eigens für uns eine Vorrichtung zur Verkippung des Detektors erprobt, welche höhere Beugungsordnungen zugänglich machen sollte. Leider konnte der um 40° verkippte Detektor nicht näher als 147 mm an den Kristall bewegt werden, was die Auflösung auf 1.0 \AA^{-1} in $\frac{\sin \theta}{\lambda}$ beschränkte. Es wurden drei Durchläufe ohne und sieben Durchläufe mit Verkippung gemessen, ein Durchlauf bestand aus 120 Einzelbildern, bei denen der Kristall jeweils um 3° in ω gedreht wurde. Keines der Einzelbilder (Frame) wurde länger als eine Sekunde belichtet, stattdessen wurden für die unverkippten Durchläufe noch verschiedene Filterstufen zugeschaltet, um ein Überbelichten durch starke Reflexe zu vermeiden. Weitere kristallografische Daten sind in Tabelle 5.1 zu finden.

Tabelle 5.1: Kristallografische Daten von C₆₀F₁₈

Summenformel	C ₆₀ F ₁₈
Molekulargewicht/ g.mol ⁻¹	1062.62
Kristallsystem, Raumgruppe, Z	monoklin, Cc (Nr. 9), 4
Temperatur/ K	100
Gitterkonstanten/ Å	
<i>a</i>	19.67(1)
<i>b</i>	11.04(1)
<i>c</i>	19.16(1)
$\beta / ^\circ$	120.26(1)
<i>V</i> / Å ³	3593.81
Röntgendichte / g.cm ⁻³	1.96
Absorptionskoeffizient/ mm ⁻¹	0.18
Kristallform	Nadel
Abmessungen/ mm	0.5 0.15 0.1
Wellenlänge (λ)/ Å	0.6214
$(\sin \theta / \lambda)_{max} / \text{Å}^{-1}$	1.00
Gemessene Reflexe	245274
Vollständigkeit/ %	98.6
Symmetrieunabhängige Reflexe	14898
Redundanz	16.8
R_{int}	0.043
Bedingung für beobachtete Reflexe	
$F_o > 2.5 \sigma (F_o)$	14715
R_1 (sphärisch)	3.73%
Multipolverfeinerung:	
N_v	806
R_F	2.89%
R_{all}	2.91%
R_{wF}	3.36%
R_{F^2}	7.00%
R_{allF^2}	7.00%
R_{wF^2}	6.72%
Gof	4.53
N_{ref} / N_v	18.5

Die gemessenen Daten wurden mit dem Programm XDS [37] integriert und die bereits bekannte konventionelle Struktur [38] mit SHELXL[39] verfeinert. Ausgehend von diesem konventionellen Strukturmodell wurde ein Multipolmodell mit dem XD- [29] Programm XDLSM verfeinert. Da die Auflösung von 1.0 \AA^{-1} in $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ recht gering war, wurde versucht, die Zahl der zu verfeinernden Parameter so gering wie möglich zu halten. Dabei wurde die Punktgruppensymmetrie des Moleküls C_{3v} zur Einführung von chemischen „constraints“



Schlegeldiagramm von $C_{60}F_{18}$.

genutzt, so dass von den 78 Atomen nur 16 unabhängige Atome verfeinert wurden. Außerdem wurde, wenn möglich, lokale Symmetrie für jedes dieser 16 Atome angewandt. Für alle Fluoratome wurden nur bindungsgerichtete Multipole verfeinert. Für die Atome der Gruppen C, E, H und I (siehe Schlegeldiagramm) wurde m- oder Spiegelsymmetrie modelliert. Die restlichen Atome wurden in ihren Multipolparametern frei verfeinert. Die Multipolexpansion wurde nur bis zur Oktopolstufe ($l = 3$) vorgenommen. Es wurden 9 verschiedene κ -Kontraktions-Parameter verfeinert, wobei sich Atome der Gruppen A, B und C, D, F, I, J, K sowie G, H je einen κ -Parameter teilten.

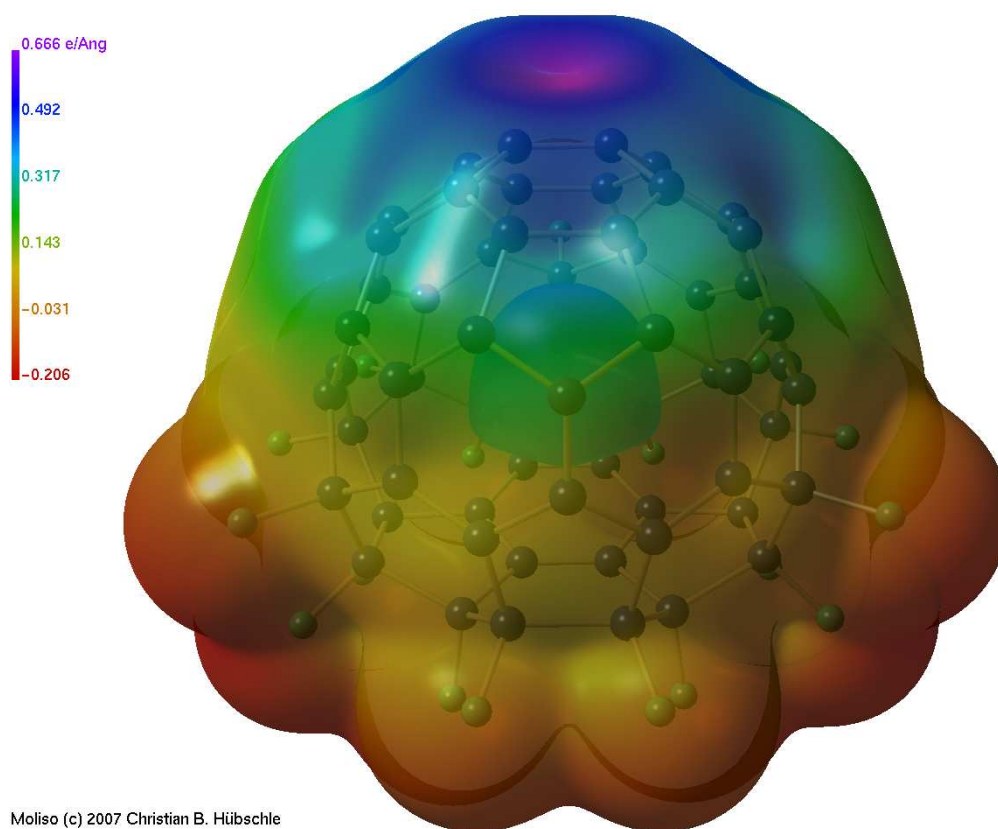
Obwohl der Kristall durch die hohe Primärintensität am Messplatz sehr gut streute, war Kristall nicht frei von Fehlern. Dies machte sich auf dem Beugungsbild durch schwache Pulverlinien und erhöhte Untergrundstreuung bemerkbar, welche durch nicht entfernbare Verunreinigungen auf dem Kristall verursacht wurden. Dadurch kann die Qualität der Daten beeinträchtigt sein.

5.1.3 Elektrostatisches Potential

Abbildung 5.2 zeigt das elektrostatische Potential, auf eine 0.001 au Isodichteoberfläche kartiert. Durch den großen Elektronegativitätsunterschied zwischen Kohlenstoff und Fluor und die einseitige Addition der Fluoratome an eine Hemisphäre des Fulleren ergibt sich ein ausgeprägter Potentialgradient im Molekül. Auf der gezeigten Oberfläche reicht dieser Gradient von -0.2 e\AA^{-1} um

die Fluoratome bis zu $0.67 \text{ e}\text{\AA}^{-1}$ in der Mitte des aromatischen Sechsrings am nicht fluorierten Ende des Moleküls. Anhand der tabellierten Größen lässt sich erkennen, dass die positiven Werte des Potentials auf der Oberfläche deutlich überwiegen.

$V_{S,min}$ $\text{e}\text{\AA}^{-1}$	$V_{S,max}$ $\text{e}\text{\AA}^{-1}$	V_S^+ $\text{e}\text{\AA}^{-1}$	V_S^- $\text{e}\text{\AA}^{-1}$	Π $\text{e}\text{\AA}^{-1}$	σ_+^2 $(\text{e}\text{\AA}^{-1})^2$	σ_-^2 $(\text{e}\text{\AA}^{-1})^2$	σ_{tot}^2 $(\text{e}\text{\AA}^{-1})^2$
-0.205797	0.666103	0.213892	-0.115282	0.163855	0.061157	0.023554	0.084711



Moliso (c) 2007 Christian B. Hübschle

Abbildung 5.2: Das elektrostatische Potential von C₆₀F₁₈, auf eine 0.001 au Isodichteoberfläche kartiert.

5.1.4 Hirshfeld-Oberfläche

Die Hirshfeld-Oberfläche in Abbildung 5.3 auf Seite 54 zeigt dadurch, dass auf ihr der Wert der Elektronendichte kartiert wurde, den nicht elektrostatischen Anteil der Wechselwirkungen zwischen den Molekülen im Kristall. Die Elektronendichte auf der Hirshfeld-Oberfläche variiert von null bis $0.075 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$, was verglichen mit anderen Verbindungen, die Wasserstoffbrücken enthalten, ein

sehr kleiner Wert ist. Die Dichte auf Wasserstoffbrücken ist üblicherweise im Bereich von $0.25 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$. Daher kann man schließen, dass die intermolekularen Wechselwirkungen in C₆₀F₁₈ recht schwach sind, was ihren nicht elektrostatischen Anteil angeht. Die höchste Dichte der Elektronen ist in dem Kontakt zwischen C54 und F12 zu finden. Mit $0.075 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$ bei einem Abstand von 2.8 \AA stellt der C54...F12-Kontakt nicht den kürzesten intermolekularen Kontakt dar. Dieser kürzeste Kontakt besteht zwischen F2 und F14 mit einem Abstand von 2.75 \AA . Dort liegt jedoch mit nur $0.05 \text{ e}\text{\AA}^{-3}$ eine geringe Elektronendichte vor. Interessant ist die Tatsache, dass aufgrund der geringen Polarisierbarkeit des Fluors die Oberfläche der Nachbarmoleküle durch Fluoratome konkav deformiert wird.

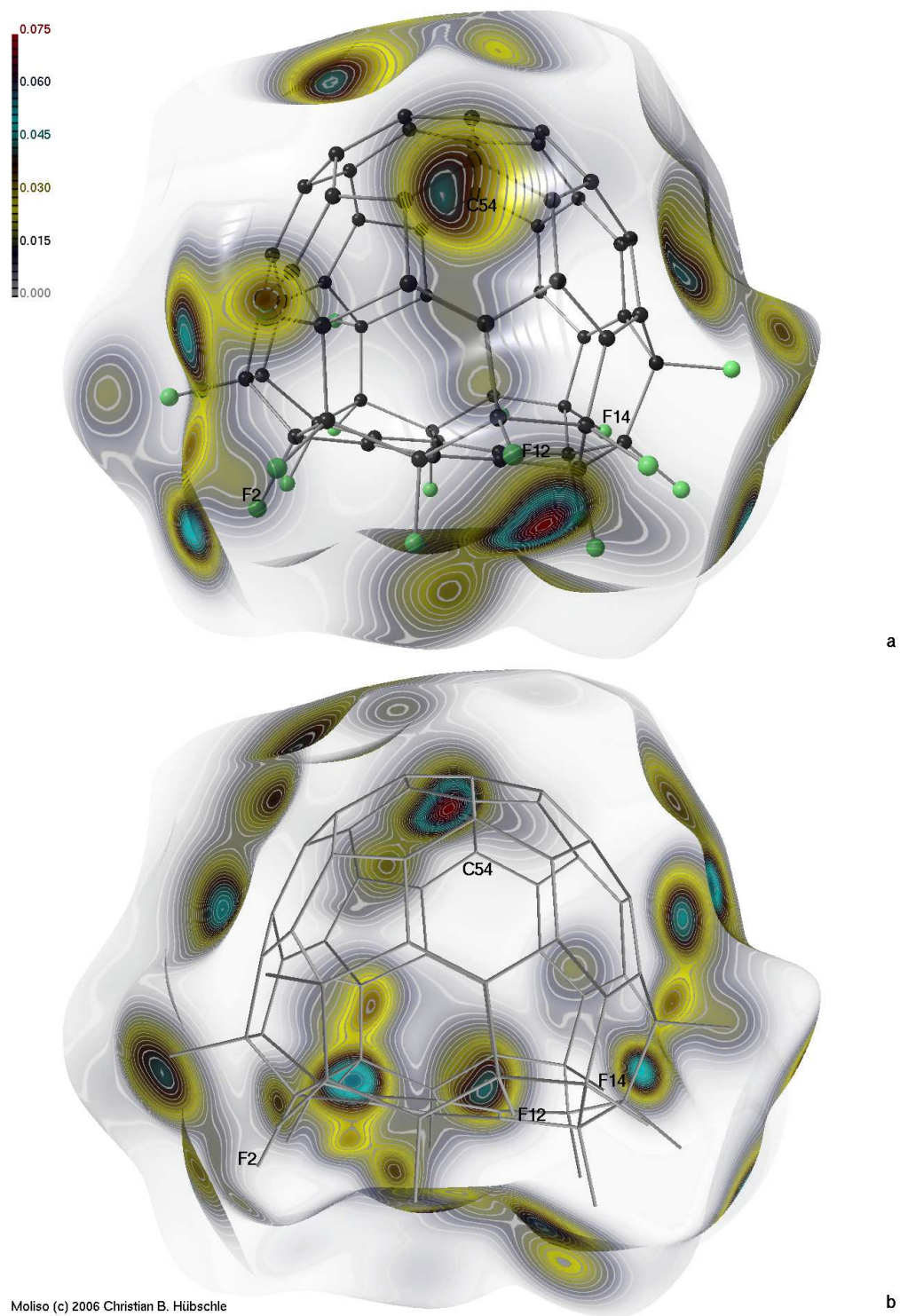


Abbildung 5.3: Hirshfeld-Oberfläche von $C_{60}F_{18}$, auf der die Elektronendichte kartiert ist. In der Abbildung oben ist die konvexe Vorderseite zu sehen. In der unteren Abbildung ist der konkave Aufriss der Oberfläche zu erkennen.

5.1.5 Topologische Analyse

Tabelle 5.2: Bindungskritische Punkte in C₆₀F₁₈

	$\rho(\mathbf{r})$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r})$	R_{AB}	ϵ	Typ		$\rho(\mathbf{r})$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r})$	R_{AB}	ϵ	Typ
F-C	1.70	-0.8	1.387	0.06	3	C-C	1.73	-9.7	1.536	0.12	h
F-C	1.69	-12.6	1.360	0.06	2	C-C	2.44	-20.9	1.370	0.22	i
F-C	1.69	-8.5	1.373	0.06	4	C-C	1.88	-8.2	1.436	0.19	j
F-C	1.45	1.8	1.400	0.32	1	C-C	2.11	-13.8	1.445	0.14	k
C-C	2.31	-16.7	1.385	0.23	a'	C-C	2.10	-6.3	1.398	0.26	l
C-C	2.12	-12.2	1.378	0.27	a''	C-C	1.93	-9.3	1.440	0.26	o
C-C	1.83	-10.1	1.481	0.09	b	C-C	1.85	-12.3	1.441	0.16	m
C-C	1.37	-5.3	1.630	0.09	c	C-C	2.22	-17.5	1.394	0.09	n
C-C	1.57	-8.2	1.565	0.10	d	C-C	1.84	-10.7	1.456	0.11	p
C-C	1.19	-3.1	1.680	0.23	e	C-C	2.07	-16.4	1.399	0.12	q
C-C	1.52	-6.8	1.572	0.08	f	C-C	1.82	-10.5	1.450	0.20	r
C-C	1.87	-12.8	1.506	0.02	g						

Das Ergebnis der topologischen Analyse der experimentellen Elektronendichte von C₆₀F₁₈ mit Hilfe des Programms XDPROP aus dem XD[29]-Programmpaket ist in Tabelle 5.2 zu sehen. Da C₆₀F₁₈ C_{3v}-Symmetrie besitzt, sind nur 23 der 108 Bindungen prinzipiell verschieden. Die C-C Bindungen sind in Gruppen a', a''-r eingeteilt (Bindungstypnomenklatur siehe Schlegeldiagramm). Abbildung 5.4 zeigt die lineare Beziehung zwischen der Dichte am bindungskritischen Punkt $\rho(\mathbf{r}_{bcp})$ und der Bindungslänge. Die beiden theoretischen Rechnungen ergeben in dieser Darstellung Geraden mit derselben Steigung, aber unterschiedlichem Achsenabschnitt. Die experimentellen Daten weisen hingegen eine höhere Steigung auf, was möglicherweise der suboptimalen Datenqualität geschuldet ist. Die Bindungen lassen sich in sieben Gruppen aufteilen. Die Bindungstypen **a'**, **a''**, **i**, **l**, **n** und **q** befinden sich im Bereich von [6-6]-Bindungen des freien C₆₀. **j**, **k**, **m**, **o**, **p** und **r** verhalten sich ähnlich zu [5-6]-Bindungen des freien C₆₀.

$$n_{Bader} = e^{c_1(\rho(\mathbf{r}_{bcp})-c_2)} \quad (5.1)$$

Die Bindungstypen **b**, **h** und **g** haben nach der Formel 5.1 noch einen formalen Bindungsgrad von über eins, während **d**, **f**, **c** und **e** einen deutlich geringeren Bindungsgrad aufweisen. Die Parameter c_1 und c_2 wurden aus theoretischen Rechnungen von Modellverbindungen erhalten.

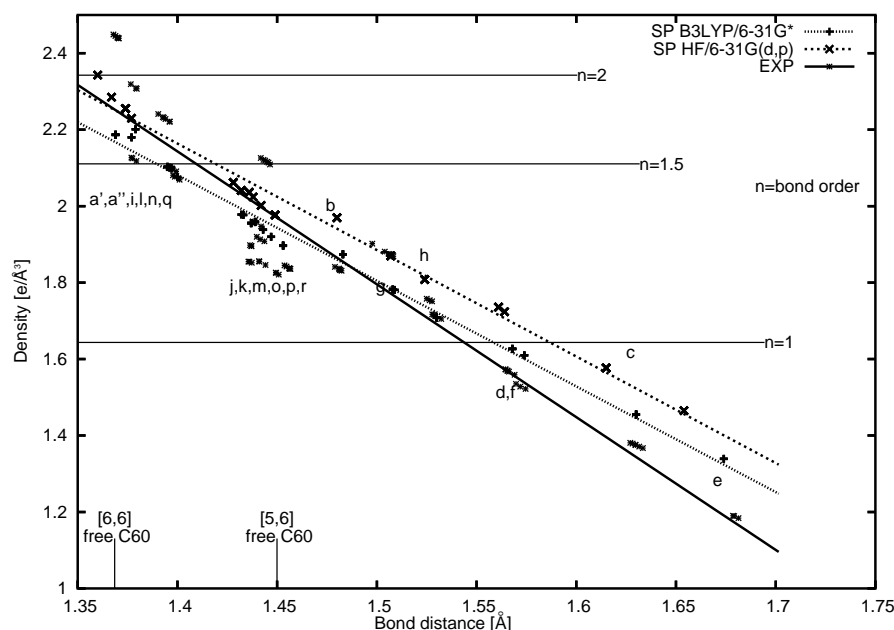


Abbildung 5.4: $\rho(r_{bcp})$ -Werte [$e\text{\AA}^{-3}$] gegen die Bindungslängen aufgetragen, für die C—C-Bindungen von C₆₀F₁₈ aus der experimentellen Ladungsdichtebestimmung und zweier theoretischer Rechnungen. Kleinbuchstaben beziehen sich auf die Bindungsnomenklatur aus dem Schlegeldiagramm

5.1.6 Atomare Volumina und Ladungen

Die experimentelle Elektronendichte wurde mit dem Programm TOPXD aus dem XD-Paket [29] nach dem Baderformalismus in atomare Bassins partitioniert und integriert. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.3 aufgelistet. Die atomaren Eigenschaften sind additiv. Die atomaren Volumina summieren sich bis auf 1 % zum Volumen der asymmetrischen Einheit auf. Die Ladungen ergeben in der Summe null. Um mit theoretischen Volumina isolierter Moleküle vergleichbar zu sein, sind die bei einer Dichte von 0.001 au abgeschnittenen Werte ebenfalls aufgeführt. Die Volumina V_{tot} und V_{001} weichen in ihrer Summe 0.93\AA^3 von einander ab. Für Fluoratome, die sich außen am Molekül befinden, ist diese Abweichung größer, nämlich 3.93\AA^3 . Da Bereiche mit einer Elektronendichte kleiner als 0.001 au kaum zu der Gesamtladung beitragen, sind Q_{tot} und Q_{001} praktisch identisch und nicht separat aufgeführt. Atome der Gruppen B-E, (siehe Schlegeldiagramm) sind fluoriert und daher in ihrem Volumen stark kontrahiert. Das kleinste Volumen ist bei den Atomen der Gruppe C zu finden $V_{tot}/V_{001} = 5.34(3)/5.34(3) \text{\AA}^3$. Diese Atome sind nicht nur selbst

fluoriert, sondern auch alle ihre drei Nachbar-Kohlenstoffatome sind fluoriert. Mit 0.80(1) e ist auch ihre positive Ladung am größten. Atome der Gruppen B und D haben nur zwei ebenfalls fluorierte Nachbar-Kohlenstoffatome und daher ein etwas größeres Volumen von 5.64(3)/5.64(3) Å³, wenn man über beide Gruppen mittelt. Dies macht sich direkt in einer etwas geringeren Ladung bemerkbar: 0.5(1) e für Gruppe B und 0.68(1) e für D. Atome der Gruppe E sind fluoriert sowie einer der Nachbar-Kohlenstoffatome, sie besitzen ein Volumen von 6.22(1)/6.20(1) Å³ und eine Ladung von 0.49(1) e. Die nicht fluorierten Atome mit einem Nachbar-Kohlenstoffatom, welches fluoriert ist (Gruppe A, F und D) nehmen schon ein deutlich größeres Volumen ein. Die Atome des aromatischen planaren Sechsrings (Gruppe A) besitzen Bassins mit dem Volumen von 9.7(3)/9.1(1) Å³, während Gruppe F und G sehr ähnliche Volumina von 10.5(7)/9.6(2) Å³ für F und 10.3(10)/9.1(2) Å³ für G einnehmen. Die Ladungen in diesen drei Gruppen sind sehr nahe bei null. Für die Atome der Gruppen H-L, die weder fluoriert sind noch fluorierte Nachbarn besitzen, kann keine klare Systematik in den atomaren Eigenschaften festgestellt werden. Lediglich ihr Volumen ist größer. Der Unterschied zwischen V_{tot} und V_{001} ist bei fluorierten Atomen kaum festzustellen, aber die unfluorierten Atome weisen einen beträchtlichen Unterschied auf. Die Fluoratome selbst (Gruppe M-P) besetzen Bassins mit 16-20/14-16 Å³, wobei sie sich untereinander kaum systematisch unterscheiden. Ihre Ladungen reichen von -0.63 bis -0.83 e und sind damit entsprechend ihrer hohen Elektronegativität stark negativ geladen. Fluor ist als harte Base dafür bekannt, kaum veränderliche Volumina und Ladungen einzunehmen, gleichgültig welchen Hybridisierungsgrad das benachbarte Kohlenstoffatom einnimmt [40]. In anderen Ladungsdichtestudien konnten ähnliche atomare Eigenschaften für Fluor gefunden werden [41, 42]. Beim freien C₆₀ ist $V_{001} = 11.0$ Å³. Obwohl es keine Ladungsdichtestudie an dieser Verbindung gibt, kann man aus dem Zellvolumen der Kristallstruktur auf $V_{tot} = 11.6$ Å³ schließen. Damit zeigt sich, dass das Volumen fast aller C-Atome in C₆₀F₁₈ kleiner ist. Im Durchschnitt ist V_{tot}/V_{001} um 76/80 % reduziert.

Tabelle 5.3: Atomare Eigenschaften nach QTAM für C₆₀F₁₈

Atom	Q	N ₀₀₁	N	V ₀₀₁	V _{tot}	Group
C(1)	-0.05	6.04	6.05	9.15	9.77	A
C(2)	-0.05	6.04	6.05	9.08	10.05	A
C(3)	-0.05	6.04	6.05	9.20	9.94	A
C(4)	-0.05	6.04	6.05	9.06	9.60	A
C(5)	-0.05	6.04	6.05	8.88	9.39	A
C(6)	-0.05	6.04	6.05	8.90	9.41	A
C(7)	0.50	5.50	5.50	5.65	5.66	B
C(8)	0.50	5.50	5.50	5.66	5.68	B
C(9)	0.52	5.48	5.50	5.65	5.66	B
C(10)	0.50	5.50	5.50	5.69	5.71	B
C(11)	0.50	5.50	5.50	5.64	5.65	B
C(12)	0.50	5.50	5.50	5.68	5.68	B
C(13)	0.80	5.20	5.20	5.32	5.32	C
C(14)	0.79	5.20	5.21	5.38	5.38	C
C(15)	0.80	5.20	5.20	5.32	5.32	C
C(16)	0.68	5.32	5.32	5.61	5.62	D
C(17)	0.68	5.32	5.32	5.61	5.61	D
C(18)	0.68	5.32	5.32	5.58	5.59	D
C(19)	0.68	5.32	5.32	5.64	5.65	D
C(20)	0.69	5.31	5.31	5.61	5.61	D
C(21)	0.68	5.32	5.32	5.61	5.61	D
C(22)	0.49	5.51	5.51	6.20	6.22	E
C(23)	0.49	5.51	5.51	6.21	6.24	E
C(24)	0.49	5.51	5.51	6.19	6.21	E
C(25)	-0.06	6.06	6.06	9.18	9.65	F
C(26)	-0.06	6.06	6.06	9.68	11.57	F
C(27)	-0.07	6.07	6.07	9.63	10.36	F
C(28)	-0.06	6.06	6.06	9.33	10.14	F
C(29)	-0.07	6.07	6.07	9.70	10.09	F
C(30)	-0.06	6.06	6.06	9.76	11.30	F
C(31)	0.06	5.93	5.94	9.40	10.99	G
C(32)	0.05	5.94	5.95	9.28	10.90	G
C(33)	0.06	5.93	5.94	9.28	11.83	G
C(34)	0.05	5.95	5.95	9.11	9.56	G
C(35)	0.06	5.93	5.94	9.01	9.52	G
C(36)	0.05	5.94	5.95	8.72	9.01	G
C(37)	0.15	5.84	5.85	9.41	10.74	H
C(38)	0.16	5.84	5.84	9.37	11.29	H
C(39)	0.15	5.84	5.85	9.69	11.03	H
C(40)	-0.25	6.25	6.25	10.20	11.65	I
C(41)	-0.25	6.25	6.25	10.69	12.60	I
C(42)	-0.26	6.24	6.26	10.77	14.65	I

Tabelle 5.4: Atomare Eigenschaften nach QTAM für C₆₀F₁₈ forts.

Atom	Q	N ₀₀₁	N	V ₀₀₁	V _{tot}	Group
C(43)	-0.02	6.02	6.02	9.42	10.10	J
C(44)	-0.03	6.02	6.03	10.13	11.68	J
C(45)	-0.03	6.02	6.03	9.78	13.75	J
C(46)	-0.02	6.02	6.03	9.63	11.23	J
C(47)	-0.02	6.02	6.02	9.15	9.41	J
C(48)	-0.02	6.02	6.02	9.26	9.63	J
C(49)	0.14	5.85	5.86	9.43	10.46	K
C(50)	0.15	5.84	5.85	9.06	10.69	K
C(51)	0.14	5.86	5.86	9.56	9.93	K
C(52)	0.15	5.85	5.85	9.65	10.60	K
C(53)	0.14	5.85	5.86	9.86	14.56	K
C(54)	0.16	5.84	5.84	8.92	9.64	K
C(55)	0.22	5.78	5.78	10.27	10.66	L
C(56)	0.22	5.78	5.78	9.51	9.74	L
C(57)	0.21	5.78	5.79	10.10	10.44	L
C(58)	0.21	5.78	5.79	10.28	11.95	L
C(59)	0.21	5.78	5.79	10.15	13.98	L
C(60)	0.21	5.78	5.79	10.11	12.51	L
F(1)	-0.63	9.62	9.63	15.34	17.88	M
F(2)	-0.62	9.61	9.63	14.34	21.07	M
F(3)	-0.65	9.64	9.65	15.05	18.46	M
F(4)	-0.63	9.61	9.63	14.94	19.23	M
F(5)	-0.63	9.62	9.63	14.35	18.32	M
F(6)	-0.63	9.63	9.63	14.29	15.46	M
F(7)	-0.73	9.73	9.73	13.59	14.55	N
F(8)	-0.73	9.72	9.73	14.18	17.24	N
F(9)	-0.73	9.72	9.73	14.19	16.94	N
F(10)	-0.65	9.64	9.65	15.15	17.65	O
F(11)	-0.65	9.63	9.65	15.84	19.82	O
F(12)	-0.66	9.65	9.66	14.83	17.81	O
F(13)	-0.65	9.62	9.65	15.23	24.60	O
F(14)	-0.65	9.63	9.65	14.64	22.26	O
F(15)	-0.65	9.64	9.65	15.11	18.07	O
F(16)	-0.84	9.81	9.83	15.90	22.95	P
F(17)	-0.83	9.82	9.83	15.69	19.21	P
F(18)	-0.83	9.82	9.83	15.46	17.33	P
∑:	0.02	521.59	521.98	771.09	897.29	
Erwartet:	0.00	522.00	522.00	-	898.45	

