



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

B-B kötéshosszabbodás vizsgálata *klozo-* karboránok esetén

TDK dolgozat

Készítette:

Kucsera Péter Mihály
Vegyésszmérnök BSc hallgató

Témavezető:

Dr. Kelemen Zsolt
adjunktus

Konzulensek:

Dr. Buzsáki Dániel
tudományos munkatárs

Dr. Szilágyiné Dr. Kertész Júlia
adjunktus

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

2022.

Tartalom

Tartalom	2
Rövidítésjegyzék	3
Ábrajegyzék	4
1. Bevezetés	6
2. Irodalmi áttekintés	8
2.1 <i>Klozo</i> -hexaborán dianion	11
2.2 <i>Klozo</i> -karboránok	13
2.3 Szén-szén kötéshossz karboránokban	15
2.4 A kötés vizsgálatának eszköztára	16
3. Alkalmazott számításhoz kémiai módszerek	17
4. Eredmények	19
4.1 „Scan” eredmények	19
4.2 Geometriai változások szubsztituált karboránok esetén	22
4.3 Kétszeres szubsztitúció hatása B-B kötésekre	26
5. Összegzés	37
Köszönetnyilvánítás	38
6. Függelék	39
6.1 Kísérleti leírás	39
6.2 Geometriai eredmények táblázatos formában	42
<i>Orto</i> -karboránok	43
<i>Meta</i> -karboránok	60
<i>Para</i> -karboránok	82
6.3 Kísérleti és számított kötéshossz eredmények összehasonlítása	85
6.4 Scan számítások eredményei	87
7. Hivatkozások	90

Rövidítésjegyzék

- LCAO: Linear Combination of Atomic Orbitals (atompályák lineáris kombinációjának elmélete)
- AO: Atomic Orbital (atompálya)
- MO: Molecular Orbital (molekulapálya)
- 3c-2e: 3 centrumos 2 elektronos kötés
- LUMO: Lowest unoccupied molecular orbital (legalacsonyabb energiaszintű, betöltetlen molekulapálya)
- C_c: a klaszterben található szénatom
- DFT: Density Functional Theory (sűrűségfüggvény elmélet)
- BCP: Bond critical point (kötés kritikus pont)
- RCP: Ring critical point (gyűrű kritikus pont)
- DMSO: Dimetil-szulfoxid
- THF: Tetrahydrofuran
- NaBH₄: Nátrium-borohidrid

Ábrajegyzék

1. ábra A leghosszabb C-C kötés versenye ^[3]	7
2. ábra A diborán szerkezete	8
3. ábra A 3c-2e kötés magyarázata	9
4. ábra Különböző borán szerkezetek: a)klozo b)nido c)arachno d)hifo	10
5. ábra Kobalt-biszdikarbolid anion (COSAN).....	11
6. ábra A hexaborán dianion klaszter lényegesebb molekulapályái	12
7. ábra Ikozaéderes klozo-karboránok konstitúciós izomerei	13
8. ábra Orto-karborán előállítása.....	14
9. ábra Izomerek különböző BH egységei	15
10. ábra A leghosszabb, karboránok esetén publikált C _c -C _c kötések ^[4,28]	16
11. ábra Lehetséges kötéstípusok a különböző izomereknél	20
12. ábra Energia változások <i>orto</i> -karborán esetén	21
13. ábra Energia változások <i>meta</i> -karborán esetén	21
14. ábra Energia változások <i>para</i> - karborán esetén	22
15. ábra Vizsgált molekulacsoportok konstitúció szerint (<i>orto</i> -karborán).....	23
16. ábra Vizsgált molekulacsoportok konstitúció szerint (<i>meta</i> -karborán)	24
17. ábra Vizsgált molekulacsoport konstitúció szerint (<i>para</i> -karborán).....	24
18. ábra Számított B-B kötéstávolságok kétszeresen szubsztituált klaszterekben.....	27
19. ábra Elvégzett reakciók: 9,12-bisz(tiol)- <i>o</i> -karborán (1); 9,10-bisz(tiol)- <i>m</i> -karborán (2) előállítása.....	28
20. ábra 9,12-bisz(tiol)- <i>o</i> -karborán (1) egykristály röntgendiffrakcióval megállapított geometriája	29
21. ábra 9,10-Bisz(tiol)- <i>m</i> -karborán (2) egykristály röntgendiffrakcióval megállapított geometriája	30
22. ábra 9,10-Bisz(amino)- <i>m</i> -karborán (3) egykristály röntgendiffrakcióval megállapított geometriája	30
23. ábra Elvégzett deprotonálási reakciók: Kálium-9,12-bisz(tiolát)- <i>o</i> -karborán (4); Kálium-9,10-bisz(tiolát)- <i>m</i> -karborán (5) előállítása.....	32
24. ábra <i>Orto</i> -bisztiolát (4) származék ¹ H NMR spektruma.....	33
25. ábra <i>Orto</i> -bisztiolát (4) származék ¹¹ B NMR spektruma.....	33
26. ábra <i>Meta</i> -bisztiolát (5) származék ¹ H NMR spektruma	34
27. ábra <i>Meta</i> -bisztiolát (5) származék ¹¹ B NMR spektruma	34

28. ábra <i>Meta</i> -bisztiolát (5) származék $\{^1\text{H}\} ^{13}\text{C}$ NMR spektruma	35
29. ábra <i>Meta</i> -bisztiolát (5) származék egykristályröntgendiffrakcióval kapott geometriája.	36

1. Bevezetés

Lavoisier 18. században rájött, hogy zárt rendszerben az anyag nem vész el, nem keletkezik a semmiből, csak átalakul. Következtetések és kísérletek alapján feltételezte, hogy az egyes elemek atomjai kölcsönhatásba lépnek egymással és molekulákat képeznek. Ez a felfedezés elindította a modern kémia tudományát, azonban az, hogy mi a kémiai kötés mint definíció a mai napig teljes mértékben nem tisztázott. Sokáig kezdetleges, de szemléletes modellekkel próbálták magyarázni, hogy egyes elemek atomjai hogyan reagálnak egymással és mi az az erő, ami összetartja a különböző atomokat. A tény, hogy sók olvadékai vezetnek az elektromos áramot, bizonyították, hogy a kémiai kötés is elektromos hajtóerőn alapszik, szemben az addigi mágneses, vagy összekapaszkodó kezes modellekkel. Ezen modellek finomodásával felfedezték, hogy van bizonyos elektronszerkezet, amelyre az elemek atomjai törekszenek, ez pedig a nemesgáz elektronszerkezet.^[1] A 20. század közepén Linus Pauling részletesen foglalkozott a kémiai kötéssel, annak fajtáival^[2]. Munkásságáért 1954-ben kémiai Nobel-díjat kapott.

Mára már világossá vált, hogy a modellek, amiket a kötések jellegére hoztak létre, a legtöbb esetben jól előre jelzik az adott molekula szerkezetét, de egyes esetekben az eddigi ismeretek nem magyarázzák a kísérleti eredményeket. A számítási kémia elterjedésével a kötések alapos vizsgálatára új eszközök váltak elérhetővé. A kémiai kötés limitációi mindig az érdeklődés középpontjában voltak, és minden bizonnyal lesznek is jó ideig. Egy rendkívül hosszú kötés (különösképp szén-szén kötés) felfedezése mindig hosszú vitát szokott elindítani, vajon az adott molekulában lehet-e még kötésről beszélni, összehasonlítható-e a korábban tapasztaltakkal, ez vajon tekinthető-e a világon jelenleg ismert leghosszabb kötésnek.^[3]

Ezt jól mutatja egy 2019-es a *Chemical & Engineering News*-ban megjelent közlemény (1. ábra), ami kiemelt néhány példát, de a cikk írójának elkerülte figyelmét, hogy publikáltak az említetteknel jóval hosszabb C-C kötést tartalmazó vegyületet.^[4] Mindenesetre vitathatatlan tény, hogy az eddig ismert, igazolhatóan leghosszabb C-C kötéshosszakat *orto*-karborán származékokban sikerült megfigyelni. Munkám során arra kerestem a választ, hogy vajon a karborán váz más kötése is hasonlóan viselkednek-e, rugalmasan változtatható-e azok hossza.



1. ábra A leghosszabb C-C kötés versenye^[3]

2. Irodalmi áttekintés

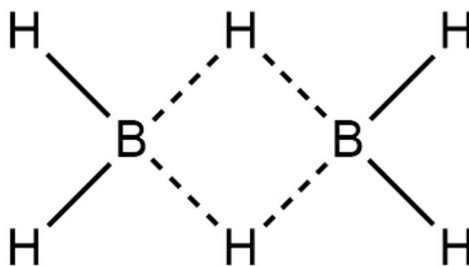
A bór kémia az elmúlt pár évtizedben komoly figyelmet kapott, amelyen belül a karboránok kiemelkedő részt képviselnek. Az egyre növekvő érdeklődést az egyedi kötésszerkezetüknek és felhasználási potenciáljuknak köszönhetik.

Először Alfred Stock foglalkozott boránok szintetizálásával több, mint egy évszázaddal ezelőtt.^[5] Következő fontos mérföldkőként Lipscomb 1976-ban elnyert Nobel-díja tekinthető, amelyet e vegyületek pontos leírásáért és kötésszerkezetük értelmezéséért ítéltek oda.

A karboránok a boránokkal együtt jelentős figyelmet a második világháborút követően, a hidegháború kezdeti időszakában kaptak, mivel rakéta hajtóanyagokként lehetett őket használni (különösképp a pentaboránt és származékait)^[6], ám ezen kutatások anyagai egészen a hatvanas évekig titkosítva voltak.

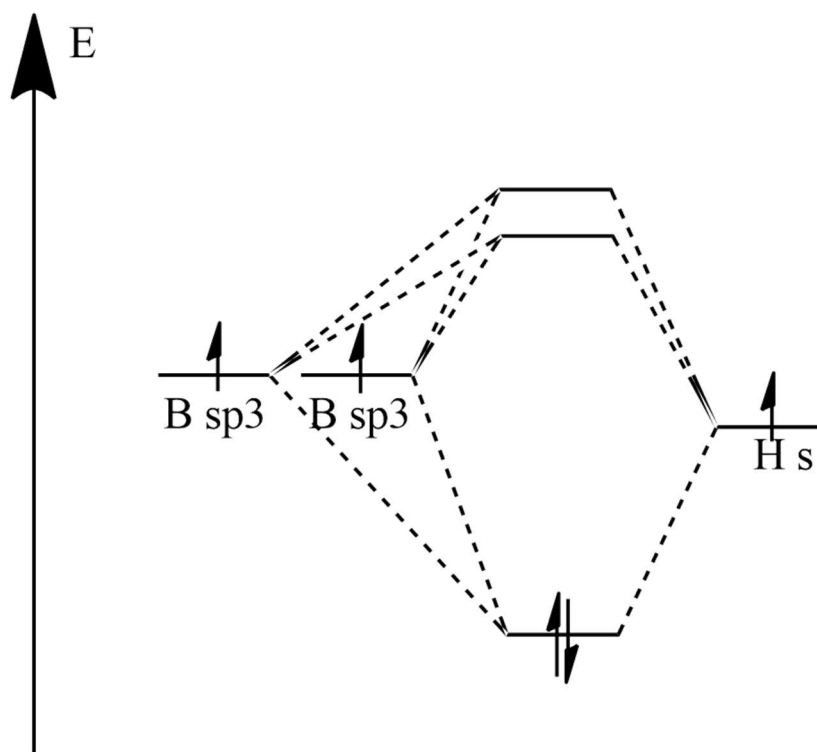
Ahogy azt említettem, a bór kémia mint terület fejlődésének egyik hajtóereje az egyedi kötésszerkezetüknek köszönhető. Ahhoz, hogy a karboránok szerkezetét megértsük, először a boránok szerkezetét kell megértenünk, kezdve a legegyszerűbb diborán szerkezetével.

A bór hidrogénnel alkotott legegyszerűbb sztöchiometriai összetételénél joggal feltételezhetnénk, hogy az BH_3 , azonban ez a vegyület normál körülmények között dimerizál és B_2H_6 -ként írható le. Kezdetben azt gondolták, hogy a diborán is szén analógia alapján etán szerkezetű, mert sokáig az eredmények nem zárták ki e szerkezet létjogosultságát.^[7] Ezzel szemben Longuet-Higgins vezette be elsőként a tudományos köztudatba a "híd szerkezetet" (**2. ábra**).^[8] A szerkezetet Price-nak kétséget kizárólag sikerült bizonyítani pár évvel később IR spektroszkópia segítségével.^[9]



2. ábra A diborán szerkezete

Az ábrán látható, hogy ha a klasszikus atomi pályák lineáris kombinálásának elmélete (LCAO elmélet) szerint kovalens kötések feltételezve kombinálódnak az atompályák (AO) és egy kötő, illetve egy lazító molekulapálya (MO) jön létre, akkor azzal a diborán kötősszerkezete nem magyarázható.



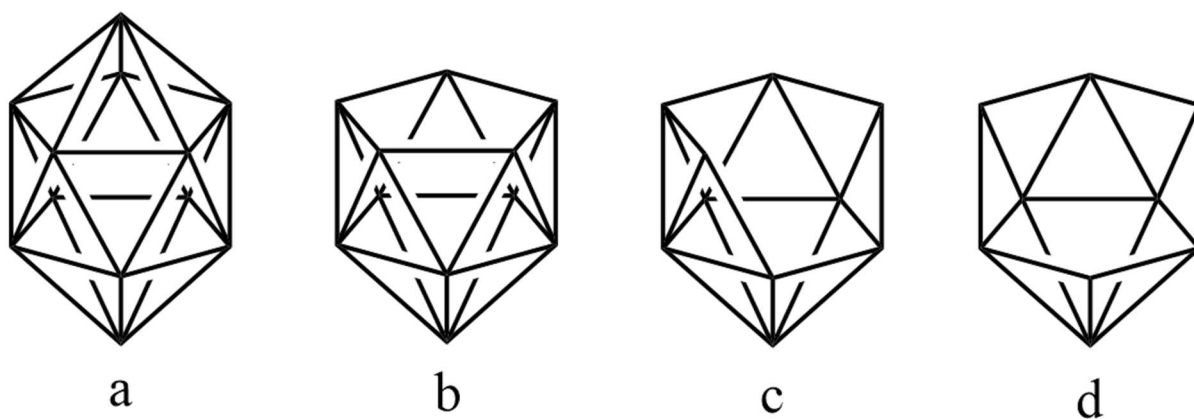
3. ábra A 3c-2e kötés magyarázata

A valóságban két darab háromcentrumos, két elektronos kötés alakul ki két bór illetve egy hidrogénatom között (**3. ábra**). A kötőpályát a két bóratom sp^3 hibridállapotú pályája és a hidrogénatom s pályája alakítja ki. A diboránban két ilyen típusú kötés található, a bóratomok egy-egy elektronnal járulnak hozzá a 3c-2e kötésekhez, kettővel pedig a 2c-2e kötésekhez a két hidrogénnel. A fennmaradó két hidrogén atom egy-egy elektront ad a 3c-2e kötésekbe. Ezek a kötő pályák a lokalizált B-H kötések által leírható sík alatt és felett helyezkednek el. E görbült, „banánra” emlékeztető alak miatt szokás az itt létrejövő kötést „banana bond”-nak is nevezni az angolszász irodalomban.^[10]

A nagyobb tagszámú boránoknál is megfigyelhetők ezek a többcentrumú kötések. A dominánsnak tekinthető 3 centrumú 2 elektronos kötések mellett, 4 centrumú 2 elektronos, 6 centrumú 2 elektronos kötések is léteznek.^[11,12] A BHB hidakon kívül bóratomok közt is kialakulnak ilyen többcentrumos kötések is, így nagyon nehéz volt megérteni és megjósolni

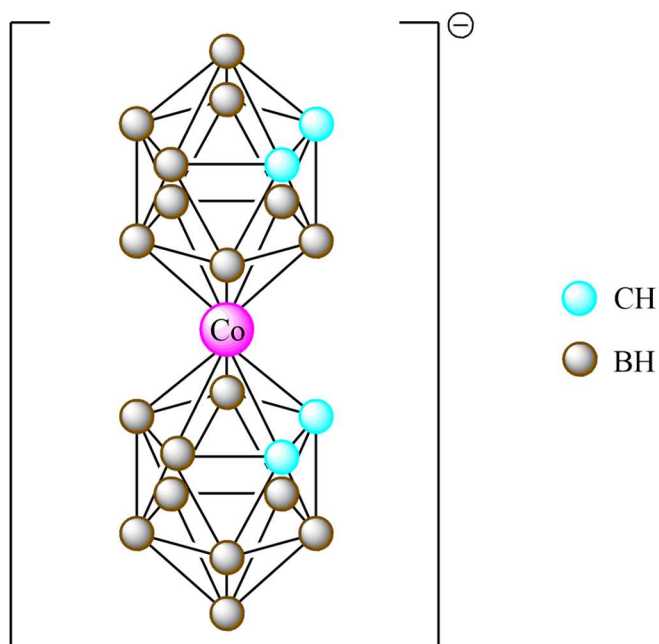
kezdetben egy-egy molekula szerkezetét. Emiatt volt szükség egy egységes nevezéktanra, amely ezeket a szerkezeteket kötéseik alapján összefoglalja. A teljesség igénye nélkül az alábbi szerkezeteket különböztethetjük meg (**4. ábra**):^[13]

- *Klozo*-szerkezetet: egy n csúcúsú poliéder, amelynek minden csúcsában egy vázatom helyezkedik el,
- *Nido*-szerkezetet: egy n csúcúsú poliéder, amelynek $(n-1)$ csúcsában helyezkedik el vázatom,
- *Arachno*-szerkezetet: egy n csúcúsú poliéder, amelynek $(n-2)$ csúcsában helyezkedik el vázatom (úgy, hogy a "kimaradó" csúcsok érintkeznek egymással)
- *Hifo*-szerkezetet: egy n csúcúsú poliéder, amelynek $(n-3)$ csúcsában helyezkedik el vázatom (szintén érintkezőnek kell lennie)



4. ábra Különböző borán szerkezetek: a)klozo b)nido c)arachno d)hifo

Fontos megjegyezni, hogy a fenti szerkezetek nem szigorúan csak semleges molekulákra igazak, sőt, boránok esetében a váz stabilitásának feltétele sok esetben a negatív töltés. A fenti típusok összekapcsolásából kialakulhatnak úgynevezett konjunkto-szerkezetek is. Ebbe a csoportba tartoznak a széles irodalommal rendelkező metallokarboránok (példa: **5. ábra**).^[14]



5. ábra Kobalt-biszdikarbolid anion (COSAN)

Az adott (borán) klaszterek létezésének elvi lehetősége függ a vázatomok számától, azok pályáitól és vegyértékelektronjaik számától. Ezeket a szabályokat Wade összegezte, és fogalmazott meg általános rendszert rájuk.^[15]

A karborán váz szerkezetéhez alapvetően négy forrásból származhatnak elektronok: darabonként három a C atomoktól (egy elektron a hidrogénnel való kötés kialakításához szükséges), darabonként kettő a B atomoktól (szintén a H atomok miatt), nyitott szerkezetek esetében a további H atomoktól, valamint anionos jelleg esetén a plusz negatív töltésből származó elektronokból. Ezek alapján elmondható (n a poliéder csúcsát jelöli):

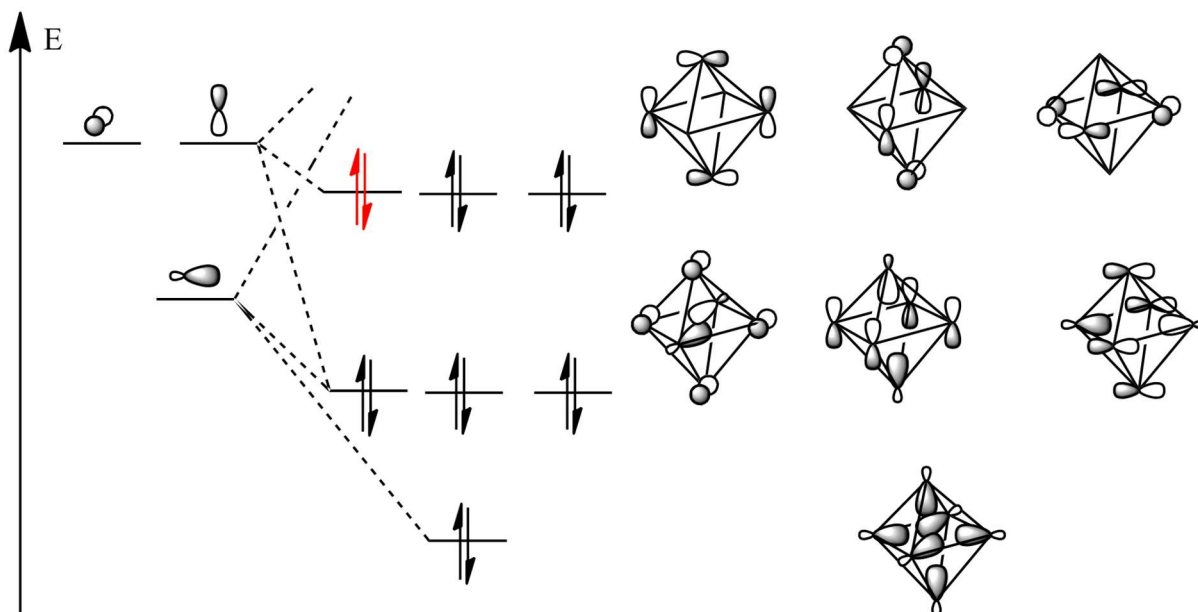
- $(n+1)$ vázkötő elektronpár esetén *klozo*-
- $(n+2)$ vázkötő elektron esetén *nido*-
- $(n+3)$ vázkötő elektron esetén *arachno*-

szerkezet valósul meg.

2.1 *Klozo*-hexaborán dianion

A borán klasztereket sokáig kémiai megközelítéssel próbálták megérteni. Ennek megfelelően a $B_6H_6^{2-}$ vegyületet a benzol analógjaként próbálták leírni, azonban minden

esetben a megfelelő dianiont sikerült izolálni. Ahhoz, hogy megértsük ezt a kísérleti eredményt, érdemes megvizsgálni a rendelkezésre álló molekulapályákat és vegyértékelektronok számát. **(6. ábra)** A bóratomok egy s és három p pályával rendelkeznek vegyértékhéjukon, míg a hidrogén atomok mindegyike egy darab s pályával. Ennek megfelelően 24 darab elektron, azaz 12 elektronpár áll rendelkezésre. A 6 darab terminális B-H kötés 6 darab elektronpárt vesz igénybe, ezek klasszikus 2c-2e kötések. A bóratom fennmaradó pályái egy további sp hibridállapotú pálya és két p pálya. Az sp hibrid pálya nagyobb lebenye a molekula középpontja felé mutat, amely nagyban hozzájárul a 3D aromásság kialakulásához. A fennmaradó p pályákból további 6 darab kötőpálya alakul ki, ami így összesen 7 darabot eredményez a klaszterben (nem számolva a B-H kötések), ugyanakkor csak 6 darab elektronpár marad ezek betöltésére. Ahhoz, hogy minden kötőpálya betöltött legyen, további két elektronra van szükség (az ábrán piros színnel jelzett elektronok), aminek a fényében érthető, hogy két negatív töltésű anionként stabilizálódik a rendszer.



6. ábra A hexaborán dianion klaszter lényegesebb molekulapályái

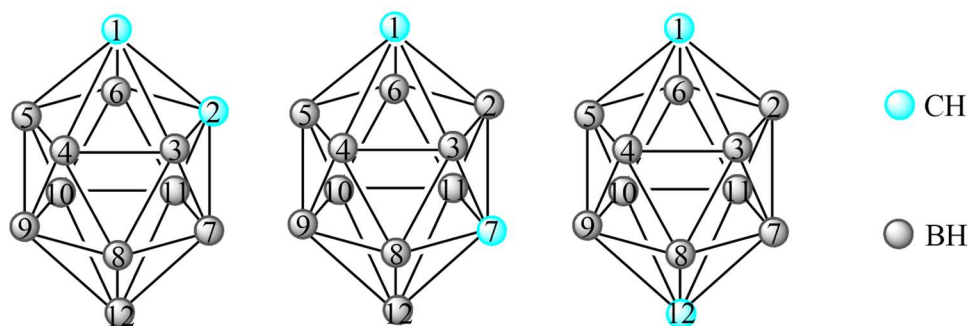
E tényekből korábban úgy gondolták, hogy a boránok *elektronhiányos* vegyületek, ami annyit jelent, hogy a molekulában több kötőpálya található, mint amennyi vegyértékelektron rendelkezésre áll, hogy 2c-2e kötésekkel kielégítsék az oktett-szabályt.^[16] Mára ezt az elméletet már megcáfolták, pontosan annyi elektronjuk van, amennyi a klasztervegyület stabilitásához

szükséges, amit a legjobban az bizonyít, hogy elektrokémiai úton redukálva (formálisan elektront helyezve a klaszterre), azok felnyílnak és bomlásnak indulnak.^[17]

2.2 Klozo-karboránok

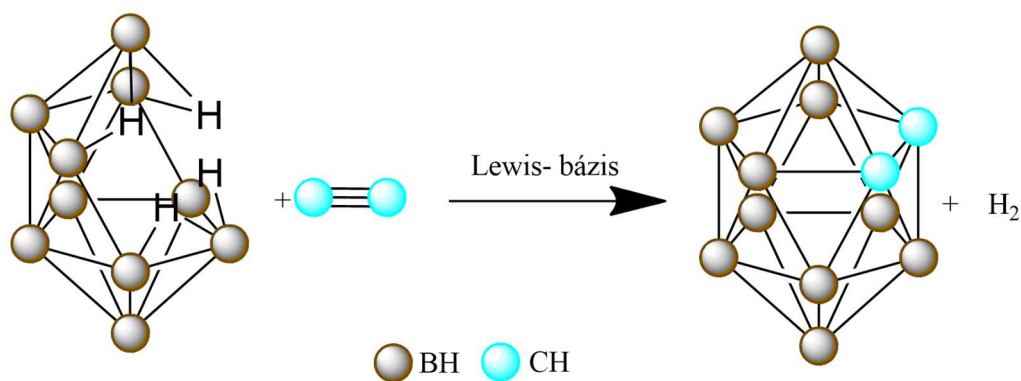
Az ikozaéderes dodekaborán is hasonló analógia szerint vezethető le, mint a hexaborán (a feltételezést Longuet-Higgins és Roberts számításokkal igazolták).^[18] Ha viszont a klaszterben két bóratom helyét átveszi valamilyen heteroatom, akkor a vegyértékelektronszám módosul a klaszterben, míg a kötő pályák száma nem változik, így amennyiben több vegyértékelektron áll rendelkezésre, akkor stabil, semleges molekulákat is kaphatunk. Az így kapott vegyületeket nevezzük heteroboránoknak. A legszélesebb körben kutatott heteroboránok a karboránok, amelyeknél a heteroatom szén. E vegyületek kiemelkedő stabilitással rendelkeznek a heteroboránok közül, ami annak köszönhető, hogy a szénatom méretben és elektronegativitásban sem különbözik drasztikusan a bóratomoktól.

A karboránokon belül az ikozaéderes *klozo*-karboránok a legstabilabbak és a leginkább vizsgált vegyületek. E vegyületek viszonylag magas hőmérsékletig stabilisak (400°C), nem pirofórosak és a NaCl-dal megegyező toxicitásúak. Szerves kémiai analógja alapján az ikozaéderes klozo-karboránoknál megkülönböztetünk *orto*-, *meta*- és *para*- konstitúciós izomereket, pontosabb elnevezés szerint *orto*-(1,2)-karboránt, *meta*-(1,7)-karboránt és *para*-(1,12)-karboránt (7. ábra). Az atomok IUPAC számozása az ábrán látható módon történik.



7. ábra Ikozaéderes klozo-karboránok konstitúciós izomerei

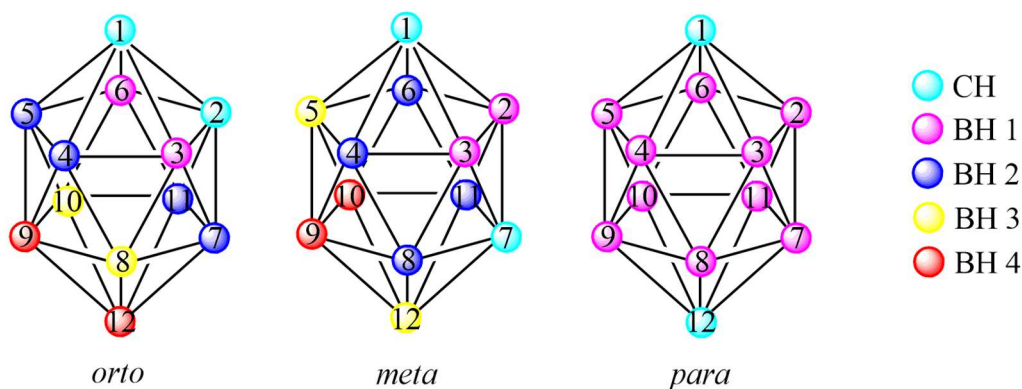
Ezeknek a vegyületeknek az előállítása jellemzően dekaboránból és acetilénből (vagy valamilyen acetilénszármazékból) történik, Lewis-bázis jelenlétében (8. ábra).^{[19] [20]}



8. ábra Orto-karborán előállítása

Ilyen módon kizárólag az *orto*-izomert lehet előállítani, így *meta*- és *para*-izomereket ebből kiindulva lehetséges izomerizálni. Termodinamikai szempontból a *para*-karboránok a legstabilabbak, *orto*-izomereket inert atmoszférában 400-500 °C-ra hevítve *meta*-, 600-700 °C-on *para*-izomereket kapunk.^[21] Az izomerizáció mechanizmusára több elméletet is kidolgoztak, de egyértelműen nem sikerült még egyiket sem bizonyítani. Számításos módszerekkel egy ún. gyémánt–négyzög-gyémánt átrendeződést igazoltak.^[22] Fontos azonban hozzátenni, ez az elmélet csak az *orto*–*meta* átrendeződést írja le és megjelenése óta már többen megkérdőjelezték.

A szénatomok elektronegativitása nagyobb, mint a bóratomoké, így a szénatomok elektronszívó tulajdonsággal rendelkeznek a szubsztituálatlan klaszterekben. Ez a hatás kihat az egész molekula reaktivitására, mely szempontból a CH egység távolságától függően az *orto*- és *meta*- izomerek négy különböző, míg a *para*-izomer egy fajta BH egység tartalmaznak. (9. ábra).



9. ábra Izomerek különböző BH egységei

2.3 Szén-szén kötэшossz karboránokban

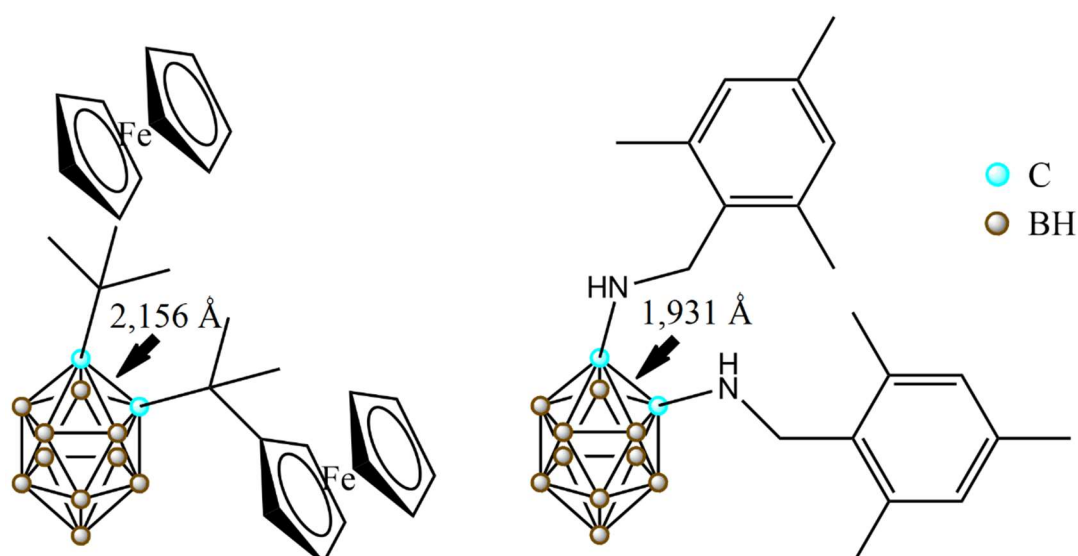
Klasszikus szerves molekulákban a C_{sp^3} - C_{sp^3} kötэш jellemzően 1,5 Å körüli.^[23] Ezzel szemben *orto*-karborán esetén a kötэш jóval hosszabb, 1,624 Å.^[24] Továbbá, ha a C atomok hidrogénjeit bizonyos csoportokkal szubsztituálják, a kötэшhossz megközelítheti a 2,0 Å-t is, sőt olyan mértékben is megnyújtható a szénatomok távolsága, hogy gyakorlatilag nem vehető már kötэшnek. Ilyen esetekben kaphatunk ún. *pseudoklozo* szerkezetű molekulákat, amelyeket elsősorban metallokarboránoknál írtak le.^[25]

A jelenség okának számos hatást megjelöltek. Döntően két nagy csoportot különböztethetünk meg: elektronikus és szterikus hatásokat. Az *o*-karborán szénatomjához közvetlenül kapcsolódó, π -elektronküldő csoport elektront donál a klaszter irányába, jellemzően a C-C kötэш σ lazító pályára, ami eredményezi a C-C kötэш gyengülését. Ezt a jelenséget (π -elektron donálás σ -pályára) negatív hiperkonjugációnak nevezzük.^[26]

A fenti elméletet igazolja, hogy semleges molekulák esetén NH_2 - ill. SH - csoportnál figyelték meg eddigi egyik leghosszabb C-C távolságot, mind DFT számításokkal jólt, mind kísérleti eredmények esetén.^[27] Természetesen ebben az esetben is szerepet játszik a csoport atomjainak elektronegativitása (fluoro csoportok esetében nem volt jelentős a hatás) és a magános pár térbeli helyzete.

Ezen felül számít a molekula össztöltése, illetve a kapcsolódó csoportok töltése is. A klaszter szénatomjain lévő hidrogének megfelelő anionos funkciós csoporttal való helyettesítésekor még hosszabb kötэшhosszt figyelték meg. Azonban az is látható volt, hogy az anionos szubsztituensek hatása elsősorban a klaszter szénatomjait befolyásolta, így még a C_c - C_c kötэш „hangolása” is lehetővé vált.

Ha a karborán szénatomjain nagyméretű szubsztituensek helyezkednek el, akkor az szintén taszítást idézhet elő, ami a kötéshossz növekedéséhez vezet. Itt elsősorban nagyobb átmérőjű atomok és nagyobb aromás csoportok azok, amik ilyen módon befolyásolják a C_c-C_c távolságot. Összefoglalva tehát, a kötéshosszt elektrosztatikus hatások és sztérikus hatások együttesen befolyásolják, a csoport jellegétől függő mértékben (példák: **10. ábra**). Felmerül a kérdés, hogy a karborán klaszter más kötéseit is lehet-e ilyen mértékben modulálni, mint a C-C kötés esetében.



10. ábra A leghosszabb, karboránok esetén publikált C_c-C_c kötések^[4,28]

2.4 A kötés vizsgálatának eszköztára

A kémiai kötést mint fogalmat nem olyan egyszerű definiálni, mint azt először gondolnánk, ahogy ezt a bevezetőben is kiemelttem. Amennyiben rendelkezésre áll egykristály röntgendiffrakció segítségével meghatározott szerkezet, akkor a kötэшossz a leginformatívabb jellemző. Ugyanakkor sok esetben nem sikerül alkalmas kristályt növesztetni, ilyenkor a leíráshoz számos lehetőség rendelkezésünkre áll. Információt nyerhetünk azzal, hogy meghatározzuk a kötés felszakításához szükséges energiát, a kapcsolódó atomok középpontja közötti elektronsűrűséget, elektromos töltések közti vonzó erőket. Ezekre mind-mind léteznek számítható, kvantitatív mennyiségek, amelyek segítségével összehasonlíthatóak egymással.

A felszakításhoz szükséges energia abszolút értéke megadható úgy, mint a molekula atomokból való kialakulásának entalpianyeresége. Ez azonban összetettebb szerkezetű vegyületek esetében már egy-egy atom közti kölcsönhatás erősségéről nem ad átfogó információt.

Emiatt is vált szükségessé egy jobban definiálható, az adott kötésre jellemző mennyiség bevezetése. Kvantumkémiai számítások segítségével két atom közti elektronsűrűséget bizonyos pontokban megvizsgálva, következtetéseket vonhatunk le a kötés erősségével kapcsolatban. Ezen pontok elhelyezkedése a következően magyarázható el egyszerűen: a kötésben résztvevő atommagok közül az egyikből egy egyenes mentén a másik atommag felé kezdünk el haladni, és vizsgáljuk az elektronsűrűséget. Az elektronsűrűség értelemszerűen monoton csökken. Abban az esetben, ha az elektronsűrűség eléri a nullát, az atom nincs kölcsönhatásban a másikkal, viszont kémiai kötés esetén az érték elér egy minimumot, majd ismét emelkedni kezd a másik atommag felé közeledve. A minimum pontot nevezzük kötés kritikus pontnak.^[29] Angolszász irodalomban elterjedt rövidítése BCP (bond critical point). Ebben a pontban az elektronsűrűség képet ad a kölcsönhatás erősségéről, azzal arányos.

A kötés kritikus pontban végzett analízis mellett különböző kötési indexek, kötésrendek is rendelkezésre állnak, amelyek megadják, hogy egy kötésben mennyi elektron vesz részt. Számos kutató definiált kötésrendeket, amelyek az elsőrendű sűrűségmátrixból származtathatóak.^[30] Ezek közül a Wiberg-index használata a legelterjedtebb. A pontos fizikai leírását mellőzve,^[31,32] már-már pongyolának tekinthető definíció szerint, a Wiberg-index megmutatja, hogy mennyi az átlagos elektronpárok száma, amit megoszt egymás közt két atom.

A felsorolt eszközök mind betekintést nyújtanak egy kémiai kötés jellegébe és lehetőséget adnak összehasonlításukra, de teljeskörűen egyik sem írja le az adott kölcsönhatást.

3. Alkalmazott számítási kémiai módszerek

A számításokat kivétel nélkül Gaussian09^[33] programcsomaggal végeztem el, vizuális megjelenítéshez Molden^[34] programot használtam. A geometriai optimalizálást két lépésben hajtottam végre. Mindkét esetben B3LYP szinten, kezdetben 6-31G*, majd aug-cc-pVTZ bázissal. A két bázissal történő optimalizálást elsősorban a számítási idő, emiatt a gépek terhelésének csökkenésének érdekében hajtottam végre. Az esetek túlnyomó többségében közel azonos szerkezeteket kaptam, leszámítva egy-két anionos rendszert, ahol a különbséget

feltehetően az okozza, hogy a 6-31G* bázis nem tartalmaz diffúz függvényt. A dolgozatban a B3LYP/aug-cc-pVTZ szinten számított adatokat tüntettem fel.

Fontos kiemelni, hogy a B3LYP mint funkcionál alkalmazását számos támadás éri, és valóban számos esetben nem nyújt megfelelő eredményt, döntően olyan problémák leírására, ahol diszperziós kölcsönhatások is szerepet játszanak. Egyszerű karbonán rendszerek leírására a B3LYP funkcionál megfelelő eredményeket szolgáltatnak, amit számos általunk is elvégzett validálás és mások által rangos folyóiratokban publikált eredmények is mutatnak.^[35,36]

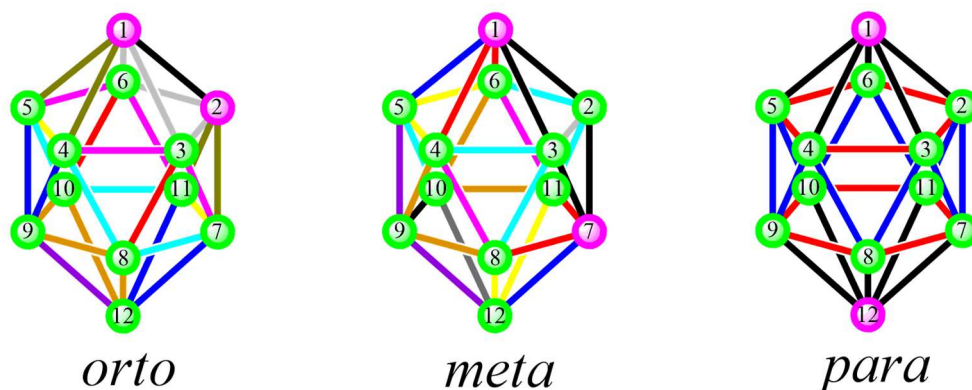
4. Eredmények

4.1 „Scan” eredmények

Az egyensúlyi geometriához képest bármely kötés megnyújtásához energiabefektetés szükséges. Az egyes kötések *rugalmasságának* összehasonlítása könnyen megtehető oly módon, hogy azokat szisztematikusan megnyújtva, majd így rögzítve a kötéshosszt „scannelve”, míg a rendszer többi részét szabadon optimálva vizsgáljuk a rendszerben felhalmozódó energia többletet. Először azt szerettem volna meghatározni, hogy a karborán klaszter különböző kötéseinek megnyújtásához, mekkora energiabefektetés szükséges. Számítási oldalról, ez egyszerűen megvalósítható, hiszen az adott kémiai kötés hosszát több lépésben $0,05\text{-}0,05\text{ \AA}$ -mel megnövelve, majd rögzítve a rendszer optimálható és meghatározható a rendszer energiája. Ezt scan számításoknak nevezem a továbbiakban.

A különböző konstitúciós izomerekben a különböző kémiai kötések száma eltérő, melyeket a **11. ábra** szemlélteti.

Általánosan levonható következtetés, hogy egy adott kötés kis mértékű hossz változása nem okozott akkora mértékű energianövekedést, mint egy klasszikus szerves kémiai molekulában tapasztalhatunk. Szemben az etánnal, ahol $0,1\text{ \AA}$ változás $2,4\text{ kcal/mol}$ energiaváltozást okozott azonos számítási szinten, karboránok esetében ez mindössze $1,0\text{ – }1,2\text{ kcal/mol}$ volt (**44. táblázat-46. táblázat**). Ebből arra lehet következtetni, hogy a klaszter szerkezete lehetővé teszi, hogy egy bizonyos mértékig történő torzítást a molekula a többi kötéshosszának változtatásával kompenzálni tudja anélkül, hogy energiája egy nyílt láncú szénhidrogénhez hasonlóan megnőne. Természetesen, ha a kötéshossz változás jelentős, úgy az energia növekedése is sokkal nagyobb volt. A $0,5\text{ \AA}$ rögzített távolság esetén a rendszer már $12,7\text{ – }22,0\text{ kcal/mol}$ destabilitást mutatott.

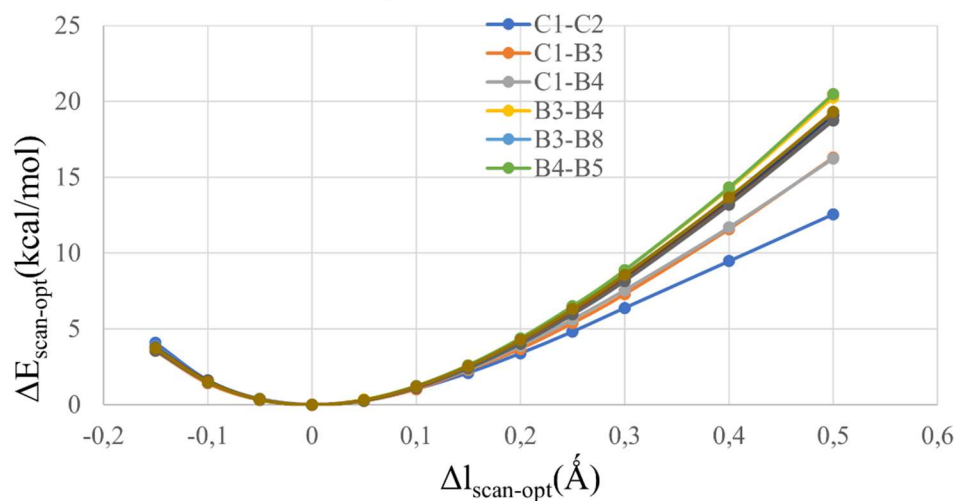


11. ábra Lehetséges kötéstípusok a különböző izomereknél

A vizsgálatokat *orto*-karboránnal kezdtem. Az így kapott optimált rendszerek kötés kritikus pontjainak vizsgálatainál a kötéshossz fokozatos növelése egy bizonyos pont után egyes esetekben a kötés kritikus pont eltűnéséhez vezetett, tehát ez alapján formálisan megszűnt a szigma kötés az adott atomok között, azonban a klaszter ennek ellenére nem nyílt fel. A kötés kritikus pont megszűnésével együtt, amikor az elektronsűrűség lecsökkent 0,1 atomi egység alá, megjelent egy gyűrű kritikus pont (**47. táblázat**). Ez bizonyíték arra utal, hogy a formális szigma kötés megszűnésével a kötés két atomja továbbra is elektromos kölcsönhatásban maradt, csupán még inkább a delokalizált kötésrendszer részeként. (Megvizsgáltuk a hullámfüggvény stabilitását, valamint a szingulett-triplett felhasadás mértékét is, amely minden esetben 30 kcal/mol feletti érték volt.)

Fontos azt is megjegyezni, hogy a klaszterben a C_c-C_c kötések megnyújtása igényelte a legkevesebb energiát, összhangban az irodalomban leírtakkal.^[27] Ennél kis mértékben több energia befektetése kellett a C-B kötések meghosszabbításához, végül a B-B kötéshossz megnyújtása volt az, ami a legtöbb befektetett energiát igényelte. (**12. ábra**) Ugyanakkor fontos megjegyezni, hogy például 0,5 Å-mel történő nyújtás esetében, ami már igen jelentős kötés meghosszabbodásnak tekintendő, a különbség még nem túl jelentős (4-5 kcal/mol) (**44. táblázat**).

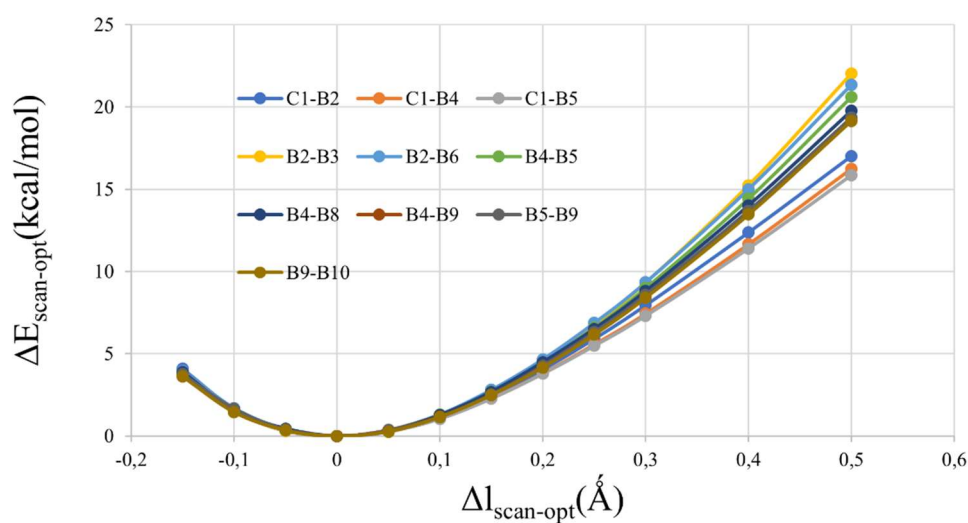
Scan eredmények *orto*-karborán esetén



12. ábra Energia változások *orto*-karborán esetén

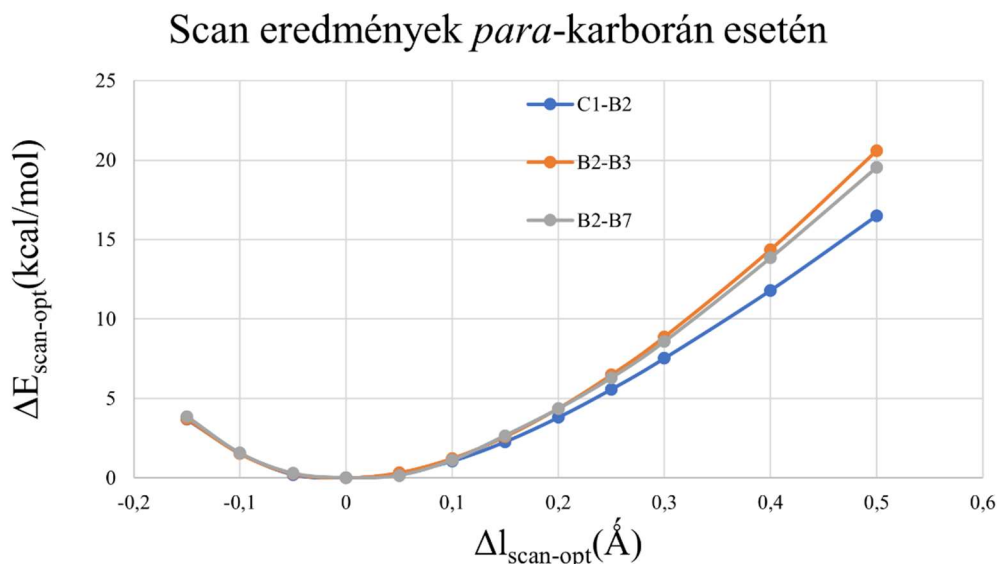
Meta-karborán esetén az *orto*-karboránnál megfigyelt különbség a C-B és B-B kötés nyújthatósága között megmaradt, azonban itt is csak jelentős, 0,4-0,5 Å mértékű kötéshossz növelés esetén lett meghatározó. (13. ábra) Látható, hogy itt a B2-B3 kötés megnyújtása igényli a legtöbb energiabefektetést. (45. táblázat)

Scan eredmények *meta*-karborán esetén



13. ábra Energia változások *meta*-karborán esetén

Para-karborán esetén a nagymértékű szimmetria a különböző lehetséges kötések számát lényegesen lecsökkenti: kétfajta B-B és egy fajta C-B kötés különböztethető meg. A kötés megnyújtása az előző két izomerhez hasonló trendek alapján hatott a rendszer energiájára. (14. ábra, 46. táblázat)



14. ábra Energia változások *para*- karborán esetén

Összefoglalva a scan számítások eredményeit, látható, hogy a B-B és C-B kötés nem különbözik jelentősen a C_c-C_c kötéstől, azonban megnyújtása több energiát igényel. Szubsztituált *o*-karboránok esetében a C_c-C_c kötés lazulására a negatív hiperkonjugációt jelölték meg a legfontosabb tényezőnek (a nyilvánvaló szterikus hatások mellett), így B-B kötések esetében is a jó π -donor szubsztituensektől várhatjuk a legnagyobb kötéshosszabbodást.

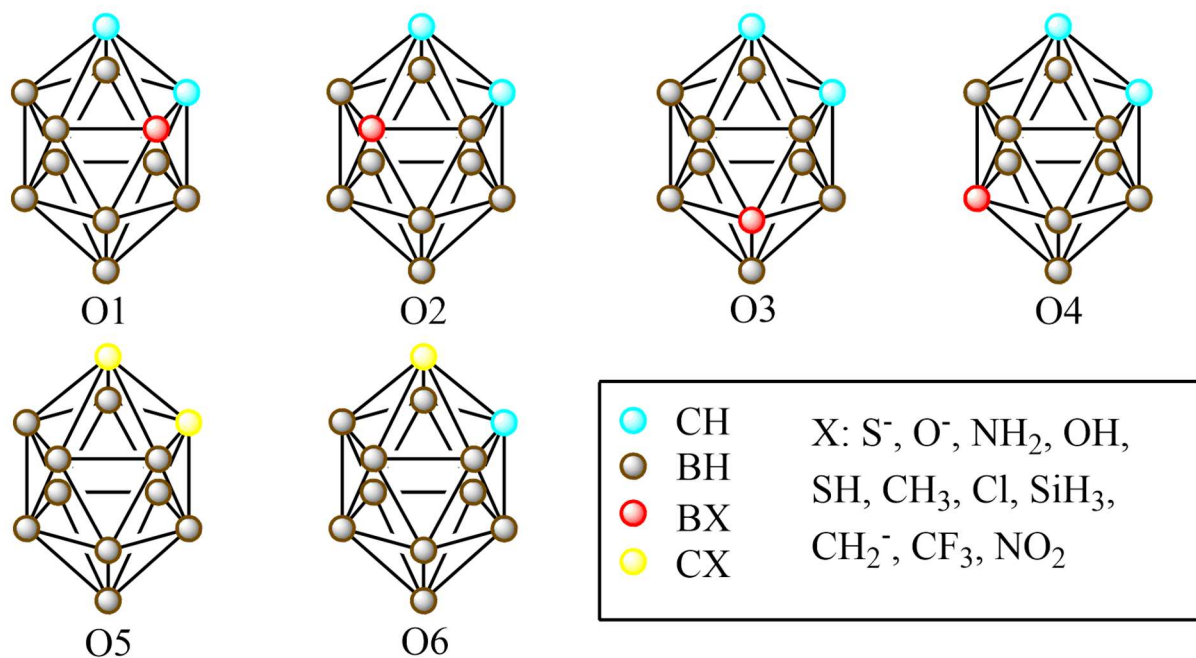
4.2 Geometriai változások szubsztituált karboránok esetén

Orto-karboránoknál megfigyelhető volt, hogy a rendkívül hosszú C_c-C_c kötéshossz összefüggésbe hozható a molekula szénatomjain elhelyezkedő szubsztituens π -elektrondonálási képességével. Emiatt a vizsgálatokat én is olyan csoportokkal kezdtem meg, amelyek hiperkonjugáció útján jelentős befolyással bírnak a klaszter adott kötéseire, azonban referenciaként megvizsgáltam különböző, π -donálásra nem alkalmas, akár elektronszívó hatású csoportokat is. Mivel igen hosszú C_c-C_c kötéstávolságot anionos rendszereknél írtak le korábban,^[27] ilyen tulajdonságú csoportokat is vizsgáltam. Ezek alapján a következő

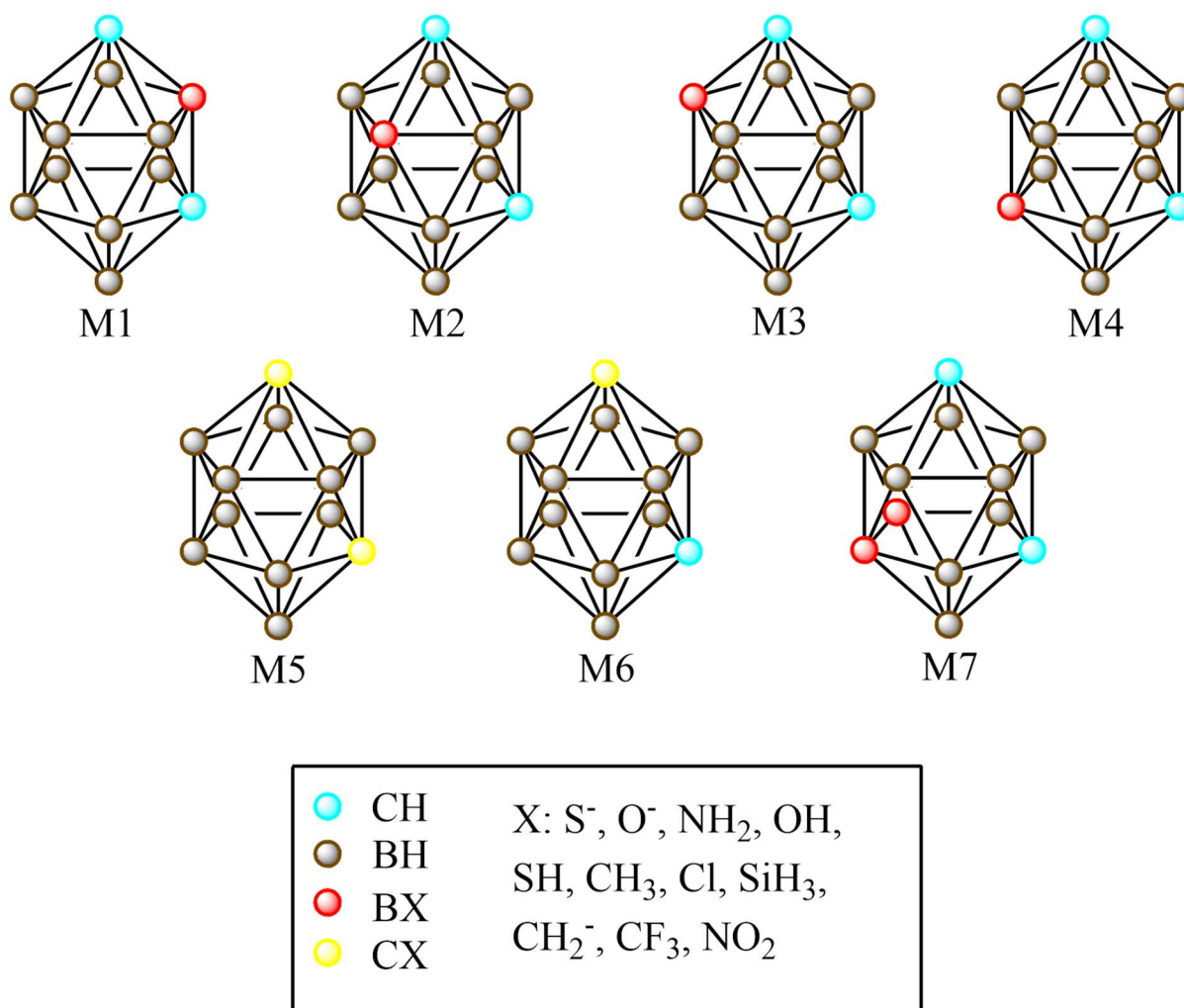
csoportokkal végeztem számításokat: -S^- , -O^- , -NH_2 , -OH , -SH , -CH_3 , -Cl , -SiH_3 , -CH_2^- , -CF_3 , -NO_2 .

A különböző BH egységek típusai, így a vizsgálandó szubsztituensek elhelyezkedése *orto*-, *meta*- és *para*-karborán esetén különbözik, ahogy azt korábban bemutattam. (9. ábra)

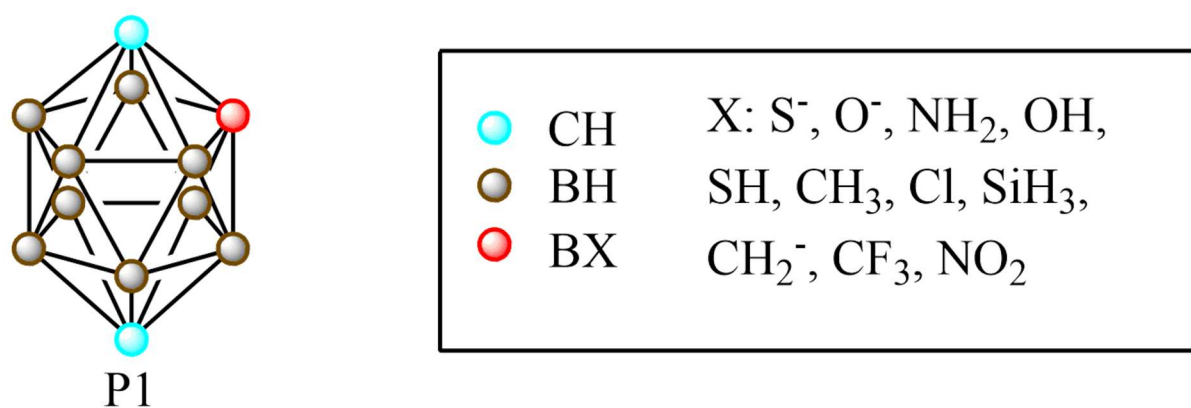
A fentiek értelmében a következő szerkezetű molekulákat vizsgáltam (15. ábra):



15. ábra Vizsgált molekulacsoportok konstitúció szerint (*orto*-karborán)



16. ábra Vizsgált molekulacsoportok konstitúció szerint (*meta*-karborán)



17. ábra Vizsgált molekulacsoport konstitúció szerint (*para*-karborán)

A szubsztituensek elektron donáló képessége alapján négy fő csoportot lehet megkülönböztetni.

Az első csoportba tartoznak azok a rendszerek, ahol anionos funkciós csoportokkal (S^- , O^- , CH_2^-) szubsztituáltam a karborán klasztereket. E helyettesítők hatása volt a legerőteljesebb a kötéshossz tekintetében. Ezeknél a szubsztituenseknél kiemelkedő, 0,8 Å kötéshossz változás is megfigyelhető volt (O^- ; **M1**) (**24. táblázat**), azonban ez a nagy mértékű nyújtás már a klaszter „felnyílását” eredményezte, nem lehet formálisan szigma kötésnek tartani. Mindenképpen hozzá kell tenni, hogy ezek az egyedi esetek kizárólag a szénatomok környékén, C-B és C_c-C_c kötéseknel jelentkeztek. Ez összhangban van azzal a kísérleti ténnyel, hogy a karborán klaszterek erős nukleofilek/bázisok jelenlétében e pozíciókban nyílnak fel.

Második csoportba a jó π -elektrondonor, de semleges csoportot (SH , OH , NH_2) tartalmazó származékok tartoznak. Ezeknél a funkciós csoportoknál mérsékeltebb kötéshossz változás volt jellemző, ugyanakkor meg kell jegyezni, hogy az aminocsoport kiváló elektrondonor képessége miatt kötéshossz változásokban az előbbi, anionos funkciós csoportokhoz hasonlóan viselkedett. A maximális különbség ebben az esetben 0,068 Å (**1.**, **19. táblázat**).

Harmadik csoportba tartoznak azok a szubsztituensek, amelyek nem képesek hiperkonjugáció útján elektront donálni a klaszterre. Ezen esetekben a változások 0,04 Å-nél kisebbek voltak. Mindezek ellenére meg kell említeni, hogy számos példa van arra, hogy egy gyengébb donor is képes volt jelentősebb változást elérni, attól függően, hogy hova csatlakozik (példa: SiH_3 ; **O4**) (**12. táblázat** Szilil-származékok; *o*-karborán).

A negyedik csoportot az elektronszívó tulajdonságú szubsztituensek alkotják, azaz a nitro- és trifluormetil-csoportok. Ezeknél a molekuláknál igen ritkán tapasztaltam jelentős változást a kötéshosszokban. A csoport érdekessége, hogy sok esetben (*meta*-karboránoknál egyértelműen) itt is kötéshossz növekedés volt megfigyelhető, ám ez leginkább attól függött, hogy melyek voltak a kapcsolódási helyek.

Elektronszívó funkciós csoportokkal helyettesített *orto*-karboránnál érdemes megemlíteni azt az esetet, amikor kötésrövidülést figyelhetünk meg, (0,045 Å ill. 0,030 Å Δl - **15.**, **17. táblázat**), a változás nagysága nem összehasonlítható a nyújtás esetével erős π -donor esetén, ami szintén alátámasztja azt a tényt, hogy e kötések elektronikus úton könnyen modulálhatóak.

Általánosan levonható következtetés, hogy a jelentős hosszváltozások függenek attól, hogy milyen távol található a kapcsolódó csoport a klaszter szénatomjaitól. *Orto*-karboránnál jól megfigyelhető, hogy ha a két szénatommal szomszédos atomon történt a szubsztitúció (**O1**)

vagy közvetlenül a szénatomokon (**O6**), és a kapcsolódó csoport képes hiperkonjugációval elektront donálni, akkor a kötéshosszak jelentősen változtak. Ezek azonban alapvetően azzal hozhatóak összefüggésbe, hogy a különböző kötéstípusok milyen könnyen torzíthatók, a szénatomok milyen távolságra helyezkednek el. A C_c-C_c kötéstávolság jelentősen tudott változni, a C_c-C_c -vel szomszédos C-B kötéshosszok valamennyivel csökkentek, ezzel kompenzálva a torzulást, amíg a klaszter többi része merevebben viselkedett (jellemzően 0,01 Å-nél kisebb változás).

A hatás erősebb elektrondonor esetén volt a legjelentősebb. A kötéshossz ebben az esetben olyan mértékben megnyúlt, hogy az már nem tekinthető kémiai kötésnek. Ennek jó példája, hogy (O^- ; **M1**) esetén a két szénatom által bezárt két bóratom (B2,B3) távolsága 2,80Å. (**24. táblázat**) Tehát a scan számításoknál leírt módon „felnyílt” a klaszter, ám a szomszédos atomok továbbra is kölcsönhatásban maradtak a molekula aromás tulajdonságai miatt.

A fent leírt különbség ellenére bóratomok szubsztitúciója esetén is megfigyelhető volt a kötéshosszabbodás. Abban az esetben, ha a szubsztitúció olyan helyzetben történik, hogy minden irányból bóratomok veszik körül a kapcsolódás helyét (pl.: NH_2 ; **O4**, **2. táblázat**), akkor a fent leírtaknak megfelelően a szubsztituált bór körüli (B9, **O4** esetén) kötéshosszak megnőnek, míg az ezzel szomszédos kötések kisebb mértékben csökkennek. Az, hogy a csökkenés milyen mértékű volt az egyes szomszédos kötéseken azonban szintén a szénatomok távolságai befolyásolják. Ha a szénatomok távolsága nagy (mint az itt levezetett példában), akkor a kötéshosszabbodás B-B atomok között meglehetősen homogén módon történik, minden irányba közel azonos mértékben. Ha a funkciós csoport a klaszter valamely szénatomja körül helyezkedett el, akkor a szénatomok befolyása már észrevehető volt.

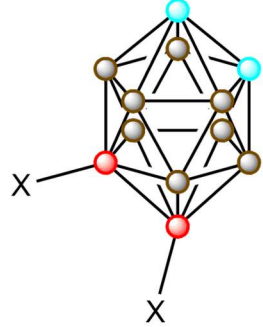
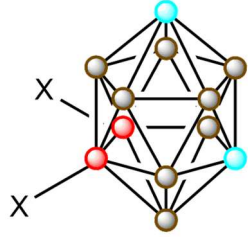
4.3 Kétszeres szubsztitúció hatása B-B kötésekre

A szénen szubsztituált származékok esetében megfigyelték, hogy a két szubsztituens (a klaszter két szomszédos szénatomján) szinergikusan erősíti a kötés nyújtását. Céлом volt ennek a jelenségnek a vizsgálata B-B analógiára, *orto*- és *meta*-karborán esetén.

A vizsgálatokat a klaszter szénatomjaitól legtávolabbi bóratomjain (*orto*-izomernél B9,B12, *meta*-izomernél B9,B10) végeztem el, ugyanis ezeket a bóratomokat a legkönnyebb szelektív módon funkcionalizálni (**18. ábra** Számított B-B kötéstávolságok kétszeresen szubsztituált klaszterekben, tehát e rendszereket a legkönnyebb előállítani laboratóriumban).

Összevetve a C_c-C_c kötőhosszabbodással,^[27] megállapítható, hogy a szubsztitúciók ebben az esetben is jelentős változást tudnak előidézni, azonban a hosszabbodás mértéke egy-egy kötésre lebontva kissé elmarad a C_c-C_c kötésekénél leírtaktól.

A különböző funkciós csoportok hatásai azonban ebben az esetben is teljes összhangban voltak a már korábban megállapítottakkal, az anionos szubsztituensek és az aminocsoport volt az, amely a leghosszabb kötőhosszabbodást tudta előidézni.

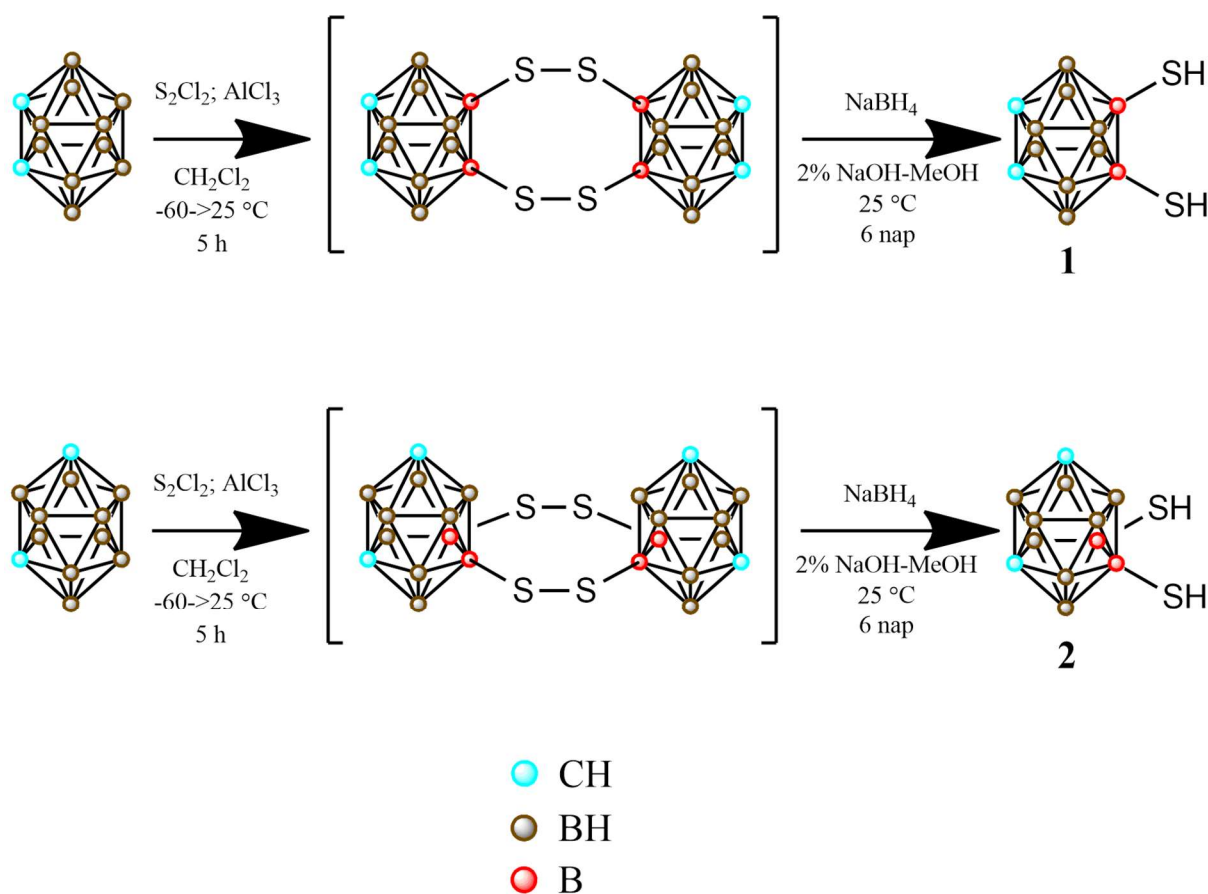
		
X:		
H	1,779 Å	1,790 Å
NH ₂	1,821 Å	1,842 Å
OH	1,808 Å	1,824 Å
SH	1,791 Å	1,812 Å
O ⁻	1,976 Å	2,023 Å
S ⁻	1,938 Å	1,972 Å

18. ábra Számított B-B kötéstávolságok kétszeresen szubsztituált klaszterekben

Összehasonlítva az egyszeres és kétszeres szubsztitúció hatását a klaszterre, megfigyelhető, hogy a szinergikus hatás itt is érvényesül, a kétszeres szubsztitúció ebben az esetben is jelentősen nagyobb kötéstávolságot eredményezett, mind *meta*- mind *orto*-izomer esetén (**18. ábra** Számított B-B kötéstávolságok kétszeresen szubsztituált klaszterekben, azonban a klaszter további kötéseit szinte teljesen megegyező mértékben változtak. Például O⁻; **M7** esetén a B9-B10 kötés hossza 2,023 Å, míg **M4** esetén ugyanez 1,914 Å, ami jelentős különbségnek mondható, ugyanakkor a B8-B9 kötés hossza megközelítőleg azonos (**M7**: 1,888 Å, **M4**: 1,901 Å). (**24. táblázat** **25. táblázat**)

Összefoglalva az elvégzett kvantumkémiai számítások segítségével sikerült megmutatni, hogy hasonlóan *rugalmas* kötések figyelhetők meg a karborán klaszter más atomjai közt is. A kapott számítási eredmények legjobban a megfelelő vegyületek előállításával és az egykristály röntgendiffrakcióval meghatározott kristályszerkezetükkel lehetne igazolni.

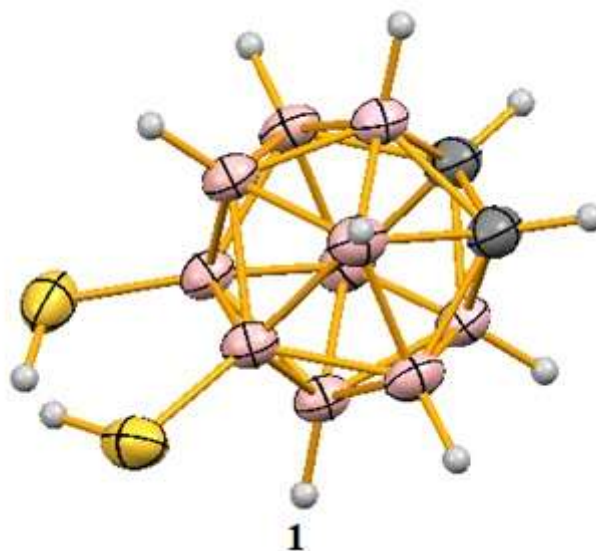
Ennek érdekében csoportunk számos vegyületet előállított. Munkám során én két bisztiol származék előállításába csatlakoztam be, a **19. ábra** szereplő reakcióutakon.



19. ábra Elvégzett reakciók: 9,12-bisz(tiol)-*o*-karborán (**1**); 9,10-bisz(tiol)-*m*-karborán (**2**) előállítása

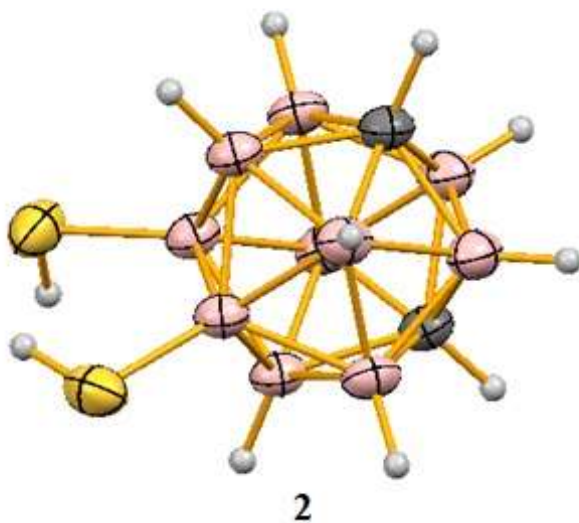
E vegyületek nem tekinthetők új vegyületeknek, azonban kristályszerkezetet nem publikáltak róluk.^[37] Továbbá fontos kiemelni, hogy a korábban publikált receptek alapján nem sikerült többszöri próbálkozás ellenére sem megfelelő tisztaságú termékeket kapnom (nem beszélve a jelentősen alacsonyabb termelésről). Végül inert atmoszférában elvégezve a kísérleteket, valamint oszlopkromatográfiás tisztítást követően sikerült mindkét anyagból egykristály röntgendiffrakcióra alkalmas kristályt növesztenem. A Dr. Holczbauer Tamás által megmért és megfejtett szerkezet alapján megállapítható, hogy a B3LYP funkcionál jó egyezést ad ezeknél a vegyületeknél.

1 ditiolnál (**20. ábra**) mért B9-B12 kötэшhossz 1.790 Å, a kísérleti és számított kötэшhosszok közti különbség (az egész molekulában) maximális értéke 0,018 Å volt, az eltérések átlaga 0,007 Å. (**43. táblázat**)



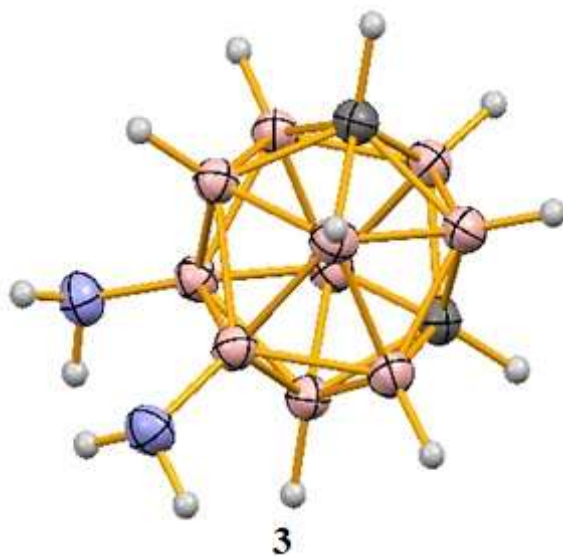
20. ábra 9,12-bisz(tiol)-*o*-karborán (**1**) egykristály röntgendiffrakcióval megállapított geometriája

2 ditiol vegyület (**21. ábra**) esetében a B9-B10 kötéstávolság 1,815 Å, a számított ill. röntgenkristallográfiával megállapított kötэшhosszok közti különbség maximum 0,014 Å volt, azonban az átlag jelentősen elmarad tőle (0,006 Å). (**43. táblázat**)



21. ábra 9,10-Bisz(tiol)-*m*-karborán (**2**) egykristály röntgendiffrakcióval megállapított geometriája

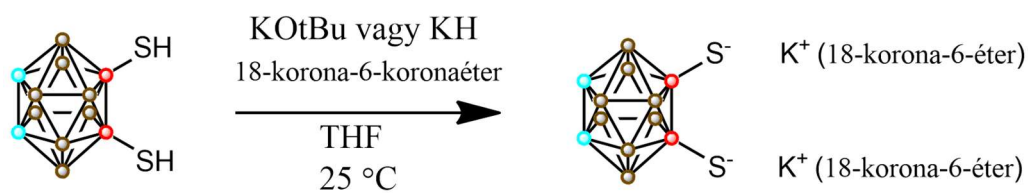
3 diaminnál (**22. ábra**) a B9-B10 kötэшhossz 1.845 Å volt. Az itt eltérés valamelyest jelentősebb: a maximális eltérés itt 0,025 Å, az átlag 0,009 Å volt. (**43. táblázat**)



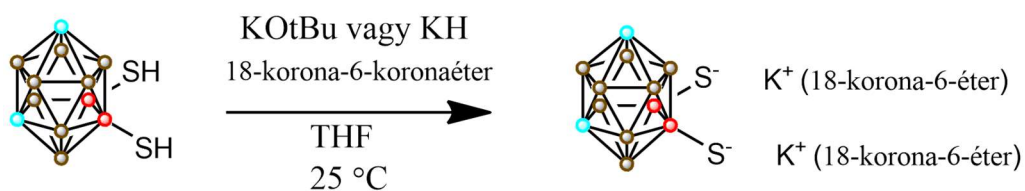
22. ábra 9,10-Bisz(amino)-*m*-karborán (**3**) egykristály röntgendiffrakcióval megállapított geometriája

Mint a fenti számított eredményeimből is látható (**18. ábra**), a tiol csoportnál jobb π -elektron-donor amino csoport esetében nagyobb kötéshosszabodás várható. E vegyületet Harcsa-Pintér Zsófia állította elő saját kísérletei során, ahol gyűrűzárási reakció megvalósításához volt szüksége e prekursorra. A vártakkal összhangban 1.845 Å B-B kötéshosszt sikerült megfigyelni, ami legjobb tudomásunk szerint az eddigi leghosszabb B-B kötés karborán klaszterek esetében (noha a különbség kicsi az eddig ismert leghosszabb kötéssel összehasonlítva, $\sim 0,022$ Å).^[38]

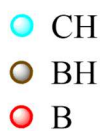
Számításaim megmutatták, hogy az aminocsoport eseténél is hosszabb kötés várható amennyiben anionos szubsztituenseket alkalmazunk. Ugyanakkor itt fontos megemlíteni, hogy a karboránok, különösen az *orto*-karboránok érzékenyek erős nukleofilekkel szemben, így a létrehozandó negatív töltéssel rendelkező funkciós csoport, egyben erős nukleofilként a karborán klaszter bomlásához vezet. Többek közt emiatt nem is próbálkoztunk, -NH^- -O^- vagy -CH_2^- csoportok kialakításával. Ugyanakkor a tiol csoportokat deprotonálva a kapott tiolát már lágyabb nukleofilnek tekinthető. Ezért mindkét bisztiol származékot, deprotonáltam KH és KO^tBu bázissal (a két különböző bázis használata nem okozott különbséget a reakció kimenetelére). Azért, hogy a kálium ne koordinálódjon erősen a tiol csoporthoz, 18-korona-6 étert adtam a rendszerhez. (**23. ábra**)



4

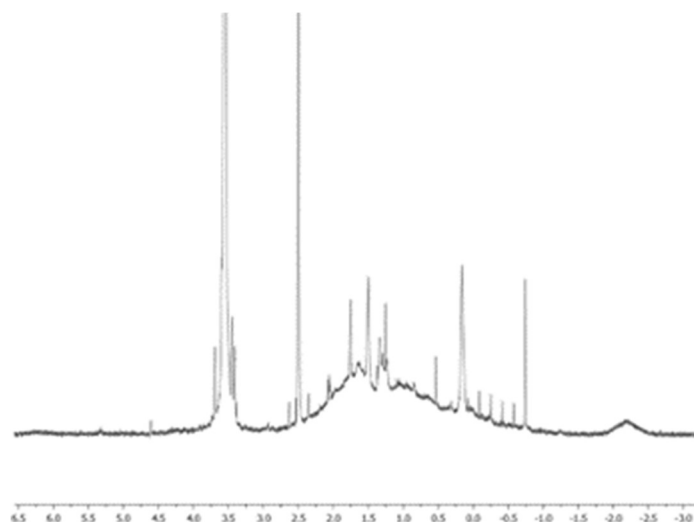


5

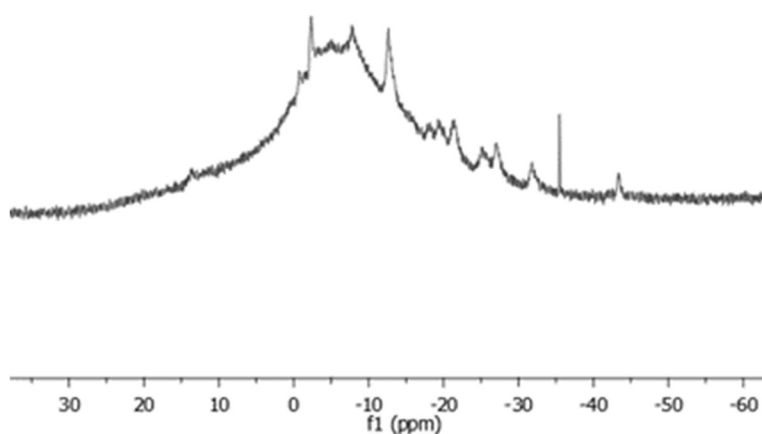


23. ábra Elvégzett deprotonálási reakciók: Kálium-9,12-bisz(tiolát)-*o*-karborán (**4**); Kálium-9,10-bisz(tiolát)-*m*-karborán (**5**) előállítása

Orto-származék esetében a THF-es reakcióelegyből fehér porszerű anyag vált ki, amit DMSO-ban és alkoholokban tudtam csak visszaoldani. A bepárolt reakcióelegy deuterált DMSO-ban felvett spektruma alapján az anyag bomlott (**24. ábra**, **25. ábra**).

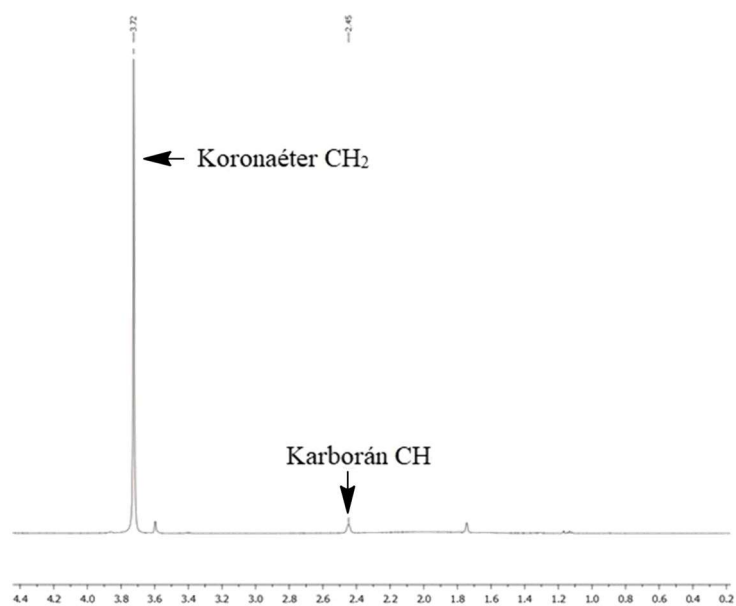


24. ábra *Orto*-bisztiolát (4) származék ^1H NMR spektruma

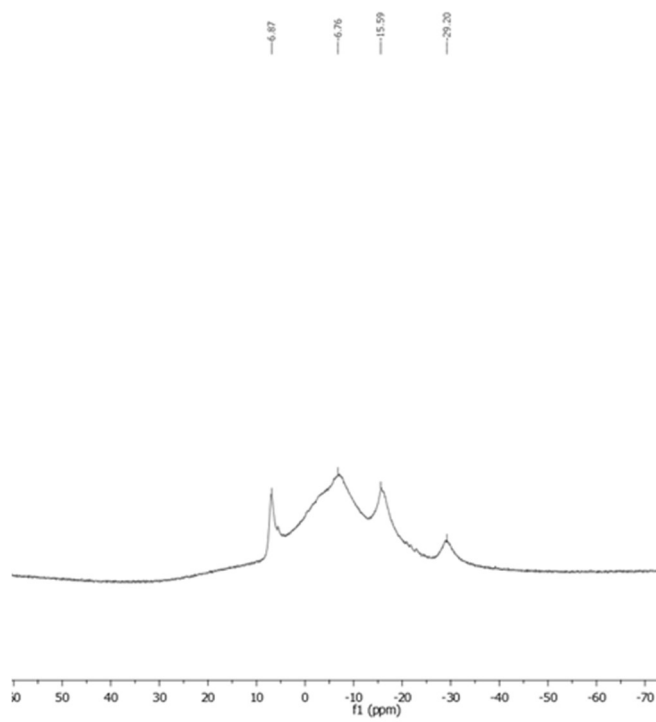


25. ábra *Orto*-bisztiolát (4) származék ^{11}B NMR spektruma

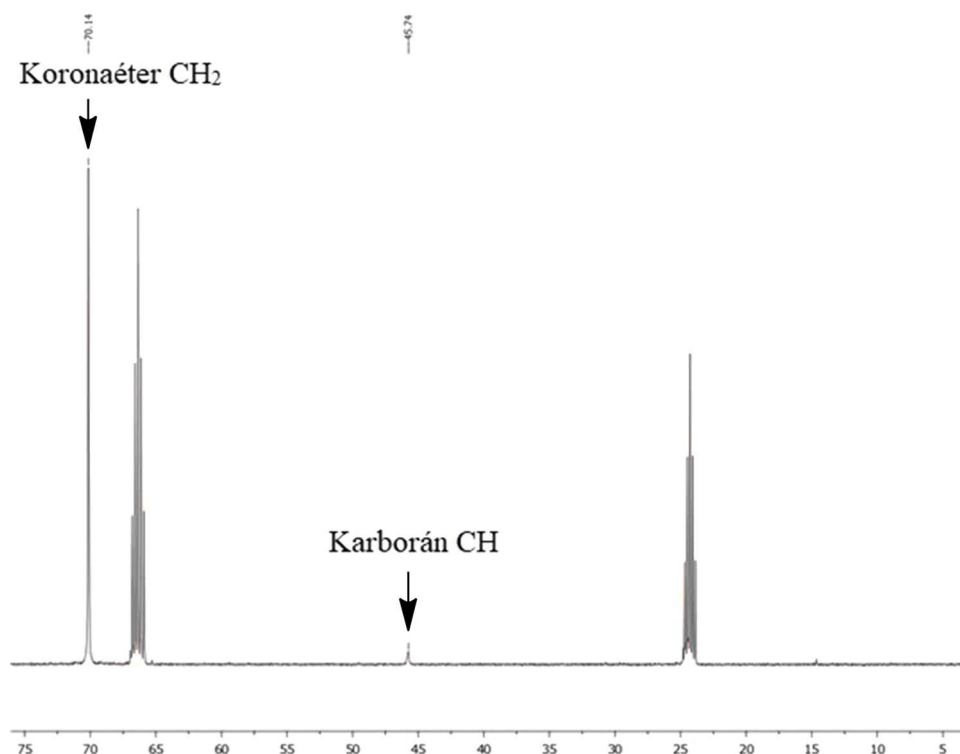
Ugyanakkor a *meta*-karborán származék esetében (**26. ábra****28. ábra**) THF oldószerben elvégzett reakció homogén maradt. A nyers termékből deuterált THF-ben felvett különböző NMR spektrumok alapján egy relatív tiszta reakcióra következtethetünk (a nem feltüntetett csúcsok minden esetben a THF jelei).



26. ábra *Meta*-bisztiolát (5) származék ^1H NMR spektruma

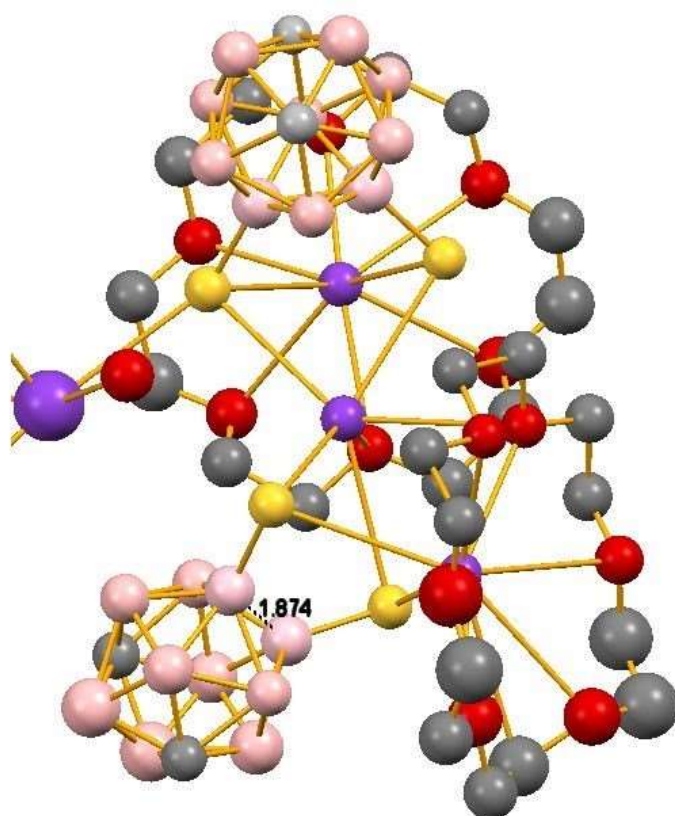


27. ábra *Meta*-bisztiolát (5) származék ^{11}B NMR spektruma



28. ábra *Meta*-bisztiolát (**5**) származék $\{^1\text{H}\}^{13}\text{C}$ NMR spektruma

Többszöri próbálkozásom ellenére sem sikerült egykristály röntgendiffrakcióra alkalmas kristályt növesztenem a deprotonált származékokból. Ugyanakkor Dr. Kertész Júlia segítségével sikerült mérhető kristályokat előállítani. A kristályokon egymásranövések is voltak, ami miatt nem eléggé jól finomítható a szerkezet, így publikálásra még nem alkalmas, de így is nyerhettünk értékes információkat (**29. ábra**). Az elsőre bonyolultnak tűnő szerkezet az alábbiak szerint írható le: egy darab karboránbisztioláthoz egy darab *csupasz* és egy darab koronaéter által komplexált kálium kation tartozik. Érdekes módon, valami oknál fogva a kénnel való kölcsönhatás olyan erős, hogy képes a *csupasz* káliumot stabilizálni a kristályszerkezetben. Emiatt jelentős elektronsűrűség donálódik a kálium kation irányába, amivel magyarázható a rövidebb B-B kötéshossz, mint a gázfázisú számítások által jósolt kötéshossz.



29. ábra *Meta*-bisztiolát (5) származék egykristályröntgendiffrakcióval kapott geometriája (az atomok színei rendre: bór-rózsaszín, szén-szürke, kén-sárga, kálium-lila, oxigén-piros)

5. Összegzés

Vizsgálataim eredményeit összefoglalva megállapítható, hogy a korábban már vizsgált C_c-C_c kötés mellett, a karborán klaszter más kötése is nyújthatóak. A megnyúlás mértékénél az adott funkciós csoport elektromos tulajdonságai B-B kötés esetében is dominánsak, azonban a szubsztitúció helye és száma is jelentős hatással bír a kötésszerkezet megváltozására. A leghosszabb B-B kötést anionos szubsztituensek esetén sikerült leírni. Az elméleti kémiai számítások mellett lehetőségem volt a laboratóriumi munkába is bekapcsolódni. Sikeresen kristályosítottam két tiol származékot, melyek egykristály röntgendiffrakcióval meghatározott szerkezetük alátámasztották számításaim helyességét (és B3LYP, mint funkcionál megfelelőségét ezekre a rendszerekre). A deprotonált származékok esetében megállapítottam, hogy az *orto*-karborán származék bomlik, ugyanakkor a *meta*-karborán származék esetében sikerült kristályosítani az anyagot. A kristályszerkezetet megvizsgálva megállapítható, hogy legjobb tudomásunk szerint a leghosszabb B-B kötést sikerült megfigyelni karborán klaszter esetében.

Köszönetnyilvánítás

Mindenekelőtt szeretném megköszönni témavezetőmnek, Dr. Kelemen Zsoltnak, aki elvállalta munkám vezetését, és ezzel bevezetett a kutatás izgalmas világába. Rengeteg segítséget nyújtott és mentorált mindvégig, még a nehezebb pillanatokban is nyugodtságával és tudásával.

Miután egy nagyobb, már folyamatban lévő munkába kapcsolódtam bele, a számításokhoz szükséges input fájlok egy részét konzulensem, Dr. Buzsáki Dániel és Kovács Máté Barnabás készítették elő és küldték be, akiknek innen is szeretném megköszönni fáradhatatlan munkájukat. Az eredmények kiértékelését én végeztem el. Igyekeztem minden egyes esetben pontosan kiemelni, hogy mi a saját munka, és mi az, amit a kutatócsoport más tagjai végeztek el.

Köszönettel tartozom konzulensemnek, Dr. Szilágyiné Dr. Kertész Júliának, Harcsa- Pintér Zsófiának preparatív munkában való segítségért, László Szabolcsnak, Szathmári Balázsnak, Gál Dalmának a mentorálásért.

Köszönöm Dr. Holczbauer Tamásnak a röntgenkristallográfiában nyújtott segítségét.

Hatalmas köszönet illeti barátaimat, Dudás Olivért, Pesti Villót, Pásztor Sárát és Nagyapáti Anna Pannát, hogy mindvégig kitartottak mellettem és lelkileg támogattak munkám során.

Végül, de nem utolsó sorban szeretném megköszönni barátnőmnek, Forján Lillának, valamint a családomnak, hogy végig támogattak és lehetővé tették, hogy a lehető legjobb körülmények közt tudjam kutatómunkám végezni.

6. Függelék

6.1 Kísérleti leírás

9,12-bisz(tiol)-*o*-karborán (1)

A reakciót N_2 atmoszférában végeztem a reagensek érzékenysége miatt. Egy kivákuumozott majd N_2 alá helyezett, vákuumcsonkkal ellátott 100 ml-es gömblombikba bemértem 1,0 g (7,5 mmol) orto-karboránt, majd 11,5 ml absz. diklórmetánt adtam hozzá. A keletkezett oldat hőmérsékletét folyékony N_2 és MeOH elegyével $-50\text{ }^\circ\text{C}$ -ra hűtöttem, majd ezen a hőmérsékleten hozzáadtam 3,17 g (0,023 mol) alumínium-kloridot (üvegtölcsér segítségével, apró részletekben a szilárd anyagot). Ezután a reakcióelegyhez 2,4 ml (30 mmol) dikén-diklorid 4 ml diklórmetánban $-15\text{ }^\circ\text{C}$ -on elkészített oldatát adtam (cseppenként terveztük, de ennek ellenére viszonylag gyorsan). A reagens hozzáadása után az elegy kezdetben sárga színt vett fel, azonban az idő előrehaladtával (megközelítőleg egy óra leforgása alatt) előbb narancs, majd sötét, mélyzöld színűvé vált az oldat. Az elegyet 5 órán keresztül forraltam, majd vízre öntöttem, aminek hatására fehér csapadék vált ki. A csapadékot már levegőn szűrtem, és vízzel mostam, majd szárítottam. Az így kapott termék tömege 3,4 g gramm (228 %) volt, amely feltehetőleg még jelentős mennyiségű vizet tartalmazhatott. Ezt egy refluxhűtővel ellátott, 250 ml-es gömblombikban, 85 ml 2 % (m/m) NaOH tartalmú metanol oldatban feloldottam, amihez apró adagonként 1,7 g (45 mmol) $NaBH_4$ -et adtam, és szobahőmérsékleten egy éjszakán át kevertettem. A reakcióelegyet 1:1 HCl oldattal 1-es pH-ig savanyítottam. A vizes fázist 3x20 ml diklórmetánnal extraháltam, az egyesített szerves fázist magnézium-szulfáton szárítottam, redős szűrőn szűrtem, majd rotációs vákuumbepárló készülék segítségével bepároltam. A nyers termék tisztítását oszlopkromatográfiával, szilikagél állófázison, kezdetben 1:4 etil-acetát - hexán eluenssel gondoltam végezni, de a termelés olyan kicsinek mutatkozott, hogy az oszlopot metil-alkohollal lemosva a redukciós lépéstől indulva megismételtem a reakciót. A tiszta terméket (0,2 g, 13,5 %) végül többszöri átkristályosítással dietil-éterből sikerült kinyernem.

9,10-Bisz(tiol)-*m*-karborán (2)

A lépések teljes mértékben megegyeztek az *orto*-karborán analógiával, csupán a két anyag reaktivitásbeli különbsége miatt a forralás idejét növeltem meg. A használt eszközök teljes mértékben megegyeznek a korábbiakkal. A reakciót 1,1 g (8,2 mmol) *meta*-karboránból végeztem el, amit 11,5 ml diklórmétánban oldottam fel. Az oldatot folyékony nitrogén és metanolos hűtőközeggel -50 °C-ra csökkentettem. 3,0 g (22,5 mmol) alumínium-kloridot adtam hozzá. Ezután a reakcióelegyhez 2,4 ml (30 mmol) dikén-diklorid 4 ml diklórmétánban -15 °C-on elkészített oldatát adtam. A dikén-diklorid oldat hozzáadását kisebb adagokban, de nem cseppenként sikerült hozzáadni. A reakcióelegyet egy éjszakán át, túlfolyóval, nitrogén atmoszféra alatt forraltam. Ezt követően az elegyet (levegőn) vízre öntöttem, szűrtem, majd szintén 85 ml 2 % (m/m) NaOH metanol oldatban 1,8 g (47,6 mmol) NaBH₄-el redukáltattam. A reakciólépést egy nagy refluxhűtővel ellátott gömblombikban végeztem, 4 napon keresztül, szobahőmérsékleten. Újabb 0,5 g (13,2 mmol) NaBH₄-et adtam az oldathoz, majd még egy napig kevertettem szobahőmérsékleten. A kapott oldatot 1:1 sósav oldattal 1-es pH-ig savanyítottam, majd 3x20 ml diklórmétánnal, és a vizes maradékot még 3x10 ml éterrel ráztam. A egyesített szerves fázist magnézium-szulfáttal szárítottam, redős szűrőn szűrtem rotációs vákuumbepárló készülék segítségével bepároltam. A nyersterméket szilikagél állófázison, kezdetben 1:4, később egyre nagyobb etil-acetát tartalmú etil-acetát – hexán eluenssel oszlopkromatográfiás módszerrel választottam el. A kapott anyag rendkívül jól oldódott etil-acetátban. Számos kristályosítási lépést végeztem el a röntgen-diffrakciós méréshez szükséges kristályok érdekében. Nagy tisztaságú kristályokat sikerült kinyernem dietil-éter – etil-acetát elegyből, 0,3 g (18,5 %) tömegben.

Kálium-9,12-Bisz(tiolát)-*o*-karborán (4)

100-ml-es Schlenk lombikba N₂ atmoszférában bemértem 294 mg (1,1 mmol) 18-korona-6-étert, majd 10 ml aszolút THF-et. Hozzáadtam 112 mg (0,57 mmol) *orto*-ditol (**1**) származékot. A reakcióelegyet jeges vízzel lehűtöttem 0 °C-ra, majd apránként 120 mg (1,1 mmol) KO^tBu-t adtam hozzá. Fél órán keresztül a reakcióelegyet 0 °C-on kevertettem. A reakcióelegyből fehér, porszerű csapadék vált ki. További fél órán keresztül szobahőmérsékleten kevertettem, de mivel nem oldódott vissza, N₂ atmoszféra alatt kiszűrtem. Absz. metanolban visszaoldottam, majd THF-es diffúziós átkristályosítással apró fehér kristályok váltak ki a 2 °C-os hűtőben.

Kálium-9,10-Bisz(tiolát)-*m*-karborán (5)

100-ml-es Schlenk lombikba N₂ atmoszférában bemértem 292 mg (1,1 mmol) 18-korona-6-étert, majd 10 ml aszolút THF-et. Hozzáadtam 110 mg (0,53 mmol) *meta*-ditol (**2**) származékot. A reakcióelegyet jeges vízzel lehűtöttem 0 °C-ra, majd apránként 124 mg (1,1 mmol) KO^tBu-t adtam hozzá. Fél órán keresztül a reakcióelegyet 0 °C-on, majd két órán keresztül szobahőmérsékleten kevertettem. A THF-et és a keletkezett ^tBuOH-t vákuumban lepároltam róla. Abszolút THF-ben visszaoldottam, majd N₂ atmoszféra alatt üvegszűrőn szűrtem. A kristályosítás 2 °C-os hűtőben, hosszú hűtési idővel sikerült. A kapott kristályok átlátszóak voltak.

6.2 Geometriai eredmények táblázatos formában

Az eredmények szubsztituensekre lebontva láthatóak. A csoport neve utáni szám a kapcsolódási helyre utal (lsd.: **15,16,17** ábrák). *Para*-karborán esetén nem tettem különbséget, mivel csak egy konstitúciót vizsgáltam. Ebben az esetben csak a csoport nevét adtam meg.

Sárga sávban találhatóak azon atomok sorszámai, amik közt a kötéshossz számítását végeztem. Minden esetben feltüntettem a szubsztituálatlan karborán kötéseinek hosszát (zöld sáv). Ehhez képest a csoportok alatt a kötéshossz abszolút hossza, mellette az alap molekulához képesti különbség látható. A különbség, ha meghaladja a 0,01 Å-t, akkor azt külön színnel emeltem ki, kötéshossz nyújtás esetén kézzel, rövidülés esetén piros.

Orto-karboránok

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-amino- <i>o</i> -karborán		4-amino- <i>o</i> -karborán		8-amino- <i>o</i> -karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,596	-0,025	1,614	-0,006	1,630	0,010
1	3	1,717	1,777	0,060	1,698	-0,019	1,713	-0,004
1	4	1,694	1,693	-0,001	1,762	0,068	1,684	-0,010
1	5	1,694	1,685	-0,009	1,685	-0,009	1,694	0,000
1	6	1,717	1,719	0,002	1,709	-0,008	1,721	0,004
2	3	1,717	1,777	0,059	1,719	0,002	1,720	0,003
2	6	1,717	1,719	0,002	1,710	-0,007	1,709	-0,008
2	7	1,694	1,693	-0,001	1,694	0,000	1,683	-0,011
2	11	1,694	1,685	-0,009	1,689	-0,005	1,686	-0,008
3	4	1,775	1,780	0,005	1,799	0,024	1,782	0,007
3	7	1,775	1,780	0,005	1,777	0,002	1,766	-0,009
3	8	1,759	1,771	0,012	1,762	0,004	1,782	0,023
4	5	1,780	1,781	0,001	1,796	0,016	1,784	0,004
4	8	1,776	1,776	0,000	1,789	0,013	1,800	0,025
4	9	1,773	1,780	0,007	1,787	0,015	1,768	-0,005
5	6	1,775	1,771	-0,004	1,776	0,002	1,771	-0,004
5	9	1,773	1,777	0,004	1,775	0,002	1,769	-0,004
5	10	1,776	1,781	0,005	1,778	0,003	1,772	-0,004
6	10	1,759	1,754	-0,005	1,762	0,003	1,764	0,005
6	11	1,775	1,771	-0,004	1,774	-0,001	1,775	0,001
7	8	1,776	1,776	0,000	1,772	-0,004	1,813	0,038
7	11	1,780	1,781	0,001	1,784	0,004	1,773	-0,007
7	12	1,773	1,780	0,007	1,773	0,001	1,774	0,002
8	9	1,788	1,781	-0,007	1,786	-0,002	1,819	0,031
8	12	1,788	1,781	-0,006	1,788	0,001	1,796	0,009
9	10	1,788	1,787	-0,001	1,783	-0,005	1,778	-0,010
9	12	1,779	1,778	-0,001	1,777	-0,002	1,780	0,002
10	11	1,776	1,781	0,005	1,780	0,004	1,780	0,004
10	12	1,788	1,787	-0,001	1,788	0,000	1,792	0,005
11	12	1,773	1,777	0,004	1,772	-0,001	1,776	0,003

1. táblázat Amin-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-amino- <i>o</i> -karborán		1-amino- <i>o</i> -karborán		9,12-biszamino- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,628	0,008	1,685	0,064	1,624641	-0,004
1	3	1,717	1,717	0,000	1,721	0,004	1,70959	0,007
1	4	1,694	1,683	-0,011	1,705	0,011	1,70015	-0,006
1	5	1,694	1,689	-0,005	1,705	0,011	1,691465	0,002
1	6	1,717	1,722	0,005	1,721	0,004	1,711794	0,005
2	3	1,717	1,712	-0,005	1,703	-0,014	1,718845	-0,002
2	6	1,717	1,715	-0,002	1,703	-0,014	1,726107	-0,009
2	7	1,694	1,699	0,005	1,684	-0,010	1,684111	0,010
2	11	1,694	1,693	-0,001	1,684	-0,010	1,692937	0,001
3	4	1,775	1,776	0,001	1,778	0,003	1,764796	0,010
3	7	1,775	1,769	-0,006	1,779	0,004	1,777709	-0,003
3	8	1,759	1,755	-0,004	1,763	0,004	1,753972	0,005
4	5	1,780	1,786	0,006	1,773	-0,006	1,770849	0,009
4	8	1,776	1,771	-0,005	1,769	-0,006	1,772643	0,003
4	9	1,773	1,802	0,029	1,773	0,000	1,801565	-0,029
5	6	1,775	1,780	0,005	1,778	0,003	1,761668	0,013
5	9	1,773	1,790	0,017	1,773	0,000	1,809532	-0,037
5	10	1,776	1,774	-0,002	1,769	-0,007	1,769598	0,006
6	10	1,759	1,749	-0,010	1,763	0,004	1,747308	0,012
6	11	1,775	1,766	-0,009	1,779	0,004	1,78438	-0,009
7	8	1,776	1,768	-0,008	1,778	0,002	1,771728	0,004
7	11	1,780	1,785	0,006	1,775	-0,005	1,780665	-0,001
7	12	1,773	1,776	0,003	1,772	-0,001	1,792886	-0,020
8	9	1,788	1,818	0,030	1,785	-0,003	1,803429	-0,016
8	12	1,788	1,792	0,004	1,791	0,003	1,810504	-0,023
9	10	1,788	1,829	0,041	1,785	-0,003	1,791651	-0,004
9	12	1,779	1,791	0,012	1,773	-0,005	1,820995	-0,042
10	11	1,776	1,766	-0,010	1,778	0,002	1,777323	-0,002
10	12	1,788	1,784	-0,004	1,791	0,004	1,825934	-0,038
11	12	1,773	1,780	0,008	1,772	0,000	1,778422	-0,006

2. táblázat Amin-származékok; *o*- karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-hidroxil- <i>o</i> -karborán		4-hidroxil- <i>o</i> -karborán		8-hidroxil- <i>o</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,625	0,005	1,613	-0,007	1,628	0,008
1	3	1,717	1,740	0,023	1,716	-0,001	1,718	0,001
1	4	1,694	1,685	-0,009	1,738	0,044	1,680	-0,014
1	5	1,694	1,694	0,001	1,684	-0,010	1,689	-0,004
1	6	1,717	1,713	-0,004	1,721	0,003	1,716	-0,001
2	3	1,717	1,743	0,025	1,713	-0,005	1,718	0,000
2	6	1,717	1,712	-0,005	1,717	0,000	1,716	-0,001
2	7	1,694	1,684	-0,010	1,696	0,002	1,680	-0,014
2	11	1,694	1,694	0,000	1,694	0,000	1,689	-0,004
3	4	1,775	1,795	0,021	1,795	0,020	1,776	0,001
3	7	1,775	1,796	0,021	1,775	0,000	1,776	0,001
3	8	1,759	1,764	0,005	1,758	-0,001	1,780	0,021
4	5	1,780	1,775	-0,004	1,807	0,027	1,778	-0,002
4	8	1,776	1,780	0,004	1,792	0,016	1,807	0,031
4	9	1,773	1,768	-0,005	1,779	0,007	1,774	0,001
5	6	1,775	1,776	0,001	1,769	-0,005	1,773	-0,002
5	9	1,773	1,773	0,001	1,775	0,003	1,772	-0,001
5	10	1,776	1,774	-0,002	1,770	-0,006	1,776	0,000
6	10	1,759	1,762	0,003	1,758	-0,001	1,763	0,004
6	11	1,775	1,775	0,000	1,771	-0,004	1,773	-0,002
7	8	1,776	1,780	0,005	1,771	-0,004	1,807	0,031
7	11	1,780	1,776	-0,004	1,779	-0,001	1,778	-0,002
7	12	1,773	1,768	-0,005	1,771	-0,001	1,774	0,001
8	9	1,788	1,791	0,003	1,792	0,005	1,803	0,015
8	12	1,788	1,790	0,003	1,784	-0,004	1,803	0,015
9	10	1,788	1,790	0,002	1,789	0,002	1,784	-0,004
9	12	1,779	1,782	0,003	1,780	0,001	1,784	0,005
10	11	1,776	1,774	-0,002	1,779	0,003	1,776	0,000
10	12	1,788	1,790	0,003	1,791	0,003	1,784	-0,004
11	12	1,773	1,773	0,001	1,775	0,003	1,772	-0,001

3. táblázat Hidroxil-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-hidroxil- <i>o</i> -karborán		1-hidroxil- <i>o</i> -karborán		9,12-biszhidroxil- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,627	0,007	1,663	0,043	1,627053	-0,007
1	3	1,717	1,718	0,001	1,733	0,016	1,718741	-0,002
1	4	1,694	1,687	-0,006	1,695	0,001	1,690294	0,004
1	5	1,694	1,687	-0,006	1,704	0,010	1,689032	0,005
1	6	1,717	1,718	0,001	1,716	-0,002	1,719199	-0,002
2	3	1,717	1,714	-0,003	1,704	-0,013	1,711919	0,005
2	6	1,717	1,714	-0,003	1,716	-0,001	1,717652	-0,001
2	7	1,694	1,694	0,001	1,693	0,000	1,691346	0,002
2	11	1,694	1,694	0,000	1,685	-0,008	1,692106	0,002
3	4	1,775	1,778	0,003	1,778	0,003	1,777677	-0,003
3	7	1,775	1,770	-0,005	1,772	-0,003	1,766701	0,008
3	8	1,759	1,752	-0,007	1,754	-0,005	1,75011	0,009
4	5	1,780	1,786	0,007	1,782	0,002	1,784101	-0,004
4	8	1,776	1,775	0,000	1,776	0,001	1,774396	0,001
4	9	1,773	1,795	0,023	1,774	0,001	1,78896	-0,016
5	6	1,775	1,778	0,003	1,775	0,000	1,777915	-0,003
5	9	1,773	1,795	0,023	1,772	0,000	1,789621	-0,017
5	10	1,776	1,775	-0,001	1,772	-0,004	1,772312	0,003
6	10	1,759	1,752	-0,007	1,763	0,004	1,744642	0,014
6	11	1,775	1,770	-0,005	1,779	0,004	1,769903	0,005
7	8	1,776	1,768	-0,008	1,777	0,001	1,769771	0,006
7	11	1,780	1,785	0,005	1,778	-0,002	1,780165	0,000
7	12	1,773	1,774	0,001	1,771	-0,002	1,801521	-0,029
8	9	1,788	1,816	0,028	1,787	0,000	1,816829	-0,029
8	12	1,788	1,788	0,001	1,790	0,002	1,800839	-0,013
9	10	1,788	1,816	0,028	1,785	-0,003	1,814192	-0,026
9	12	1,779	1,788	0,009	1,776	-0,002	1,807731	-0,029
10	11	1,776	1,768	-0,008	1,778	0,002	1,772669	0,003
10	12	1,788	1,788	0,001	1,788	0,000	1,80422	-0,017
11	12	1,773	1,774	0,001	1,775	0,002	1,793203	-0,021

4. táblázat Hidroxil-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-tiol- <i>o</i> -karborán		4-tiol- <i>o</i> -karborán		8-tiol- <i>o</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,610	-0,010	1,619	-0,001	1,629	0,009
1	3	1,717	1,735	0,018	1,707	-0,010	1,716	-0,001
1	4	1,694	1,699	0,005	1,720	0,026	1,686	-0,007
1	5	1,694	1,692	-0,002	1,692	-0,001	1,691	-0,002
1	6	1,717	1,723	0,006	1,712	-0,006	1,717	-0,001
2	3	1,717	1,748	0,031	1,719	0,002	1,718	0,001
2	6	1,717	1,715	-0,002	1,713	-0,004	1,715	-0,002
2	7	1,694	1,695	0,001	1,693	-0,001	1,687	-0,007
2	11	1,694	1,688	-0,005	1,690	-0,004	1,689	-0,005
3	4	1,775	1,778	0,003	1,784	0,009	1,779	0,004
3	7	1,775	1,777	0,002	1,774	0,000	1,777	0,002
3	8	1,759	1,767	0,008	1,764	0,005	1,765	0,006
4	5	1,780	1,780	0,000	1,783	0,004	1,779	-0,001
4	8	1,776	1,775	-0,001	1,781	0,005	1,791	0,015
4	9	1,773	1,775	0,003	1,783	0,010	1,770	-0,003
5	6	1,775	1,775	0,000	1,777	0,002	1,773	-0,002
5	9	1,773	1,774	0,002	1,776	0,004	1,775	0,002
5	10	1,776	1,779	0,004	1,779	0,003	1,776	0,000
6	10	1,759	1,757	-0,002	1,762	0,003	1,764	0,005
6	11	1,775	1,772	-0,003	1,775	0,000	1,773	-0,002
7	8	1,776	1,778	0,002	1,776	0,000	1,793	0,017
7	11	1,780	1,784	0,004	1,783	0,003	1,778	-0,002
7	12	1,773	1,777	0,004	1,775	0,002	1,771	-0,002
8	9	1,788	1,785	-0,002	1,786	-0,002	1,795	0,007
8	12	1,788	1,783	-0,004	1,790	0,002	1,792	0,004
9	10	1,788	1,786	-0,002	1,785	-0,003	1,785	-0,002
9	12	1,779	1,778	-0,001	1,777	-0,001	1,784	0,005
10	11	1,776	1,778	0,002	1,778	0,002	1,777	0,001
10	12	1,788	1,789	0,001	1,787	0,000	1,787	0,000
11	12	1,773	1,776	0,003	1,772	0,000	1,776	0,003

5. táblázat Tiol-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-tiol- <i>o</i> -karborán		1-tiol- <i>o</i> -karborán		9,10-bisztiol- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,626	0,006	1,662	0,041	1,625	-0,004
1	3	1,717	1,719	0,002	1,726	0,009	1,711	0,006
1	4	1,694	1,688	-0,006	1,703	0,009	1,693	0,000
1	5	1,694	1,688	-0,006	1,710	0,016	1,696	-0,002
1	6	1,717	1,718	0,001	1,719	0,002	1,712	0,006
2	3	1,717	1,714	-0,003	1,708	-0,009	1,720	-0,003
2	6	1,717	1,713	-0,004	1,713	-0,004	1,719	-0,002
2	7	1,694	1,694	0,000	1,688	-0,006	1,691	0,003
2	11	1,694	1,695	0,001	1,686	-0,008	1,688	0,005
3	4	1,775	1,777	0,002	1,781	0,006	1,767	0,008
3	7	1,775	1,771	-0,004	1,777	0,002	1,780	-0,005
3	8	1,759	1,756	-0,003	1,759	0,000	1,756	0,003
4	5	1,780	1,788	0,008	1,777	-0,002	1,780	0,000
4	8	1,776	1,775	-0,001	1,776	0,000	1,774	0,002
4	9	1,773	1,781	0,009	1,776	0,003	1,787	-0,014
5	6	1,775	1,776	0,001	1,779	0,004	1,767	0,008
5	9	1,773	1,782	0,009	1,772	-0,001	1,786	-0,013
5	10	1,776	1,774	-0,002	1,772	-0,004	1,774	0,002
6	10	1,759	1,757	-0,002	1,763	0,005	1,756	0,003
6	11	1,775	1,770	-0,005	1,781	0,006	1,779	-0,004
7	8	1,776	1,771	-0,005	1,777	0,001	1,776	0,000
7	11	1,780	1,784	0,004	1,777	-0,003	1,785	-0,006
7	12	1,773	1,778	0,005	1,773	0,000	1,775	-0,003
8	9	1,788	1,804	0,016	1,785	-0,003	1,790	-0,002
8	12	1,788	1,790	0,003	1,791	0,003	1,807	-0,019
9	10	1,788	1,803	0,016	1,785	-0,003	1,795	-0,007
9	12	1,779	1,780	0,001	1,775	-0,004	1,799	-0,020
10	11	1,776	1,771	-0,005	1,778	0,002	1,774	0,001
10	12	1,788	1,790	0,003	1,789	0,002	1,804	-0,016
11	12	1,773	1,777	0,005	1,773	0,000	1,778	-0,005

6. táblázat Tiol-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-alkoholát- <i>o</i> - karborán		4-alkoholát- <i>o</i> - karborán		8-alkoholát- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,556	-0,064	1,623	0,003	1,628	0,007
1	3	1,717	2,490	0,772	1,635	-0,082	1,731	0,014
1	4	1,694	1,629	-0,065	2,360	0,666	1,686	-0,008
1	5	1,694	1,699	0,005	1,655	-0,038	1,683	-0,011
1	6	1,717	1,712	-0,005	1,715	-0,002	1,710	-0,007
2	3	1,717	2,490	0,772	1,750	0,032	1,731	0,013
2	6	1,717	1,712	-0,005	1,709	-0,008	1,710	-0,007
2	7	1,694	1,629	-0,065	1,666	-0,028	1,686	-0,008
2	11	1,694	1,699	0,005	1,689	-0,005	1,683	-0,011
3	4	1,775	2,038	0,263	2,152	0,377	1,760	-0,015
3	7	1,775	2,038	0,263	1,794	0,019	1,760	-0,015
3	8	1,759	1,675	-0,084	1,762	0,003	1,890	0,131
4	5	1,780	1,796	0,016	2,108	0,328	1,782	0,002
4	8	1,776	1,827	0,051	1,808	0,032	1,906	0,131
4	9	1,773	1,772	-0,001	1,760	-0,013	1,781	0,008
5	6	1,775	1,760	-0,015	1,784	0,009	1,778	0,003
5	9	1,773	1,755	-0,017	1,781	0,008	1,768	-0,005
5	10	1,776	1,766	-0,010	1,776	0,000	1,770	-0,006
6	10	1,759	1,772	0,013	1,734	-0,024	1,766	0,007
6	11	1,775	1,760	-0,015	1,773	-0,002	1,778	0,003
7	8	1,776	1,827	0,051	1,773	-0,002	1,906	0,130
7	11	1,780	1,796	0,016	1,776	-0,004	1,782	0,002
7	12	1,773	1,772	-0,001	1,775	0,002	1,781	0,008
8	9	1,788	1,780	-0,007	1,852	0,064	1,896	0,108
8	12	1,788	1,780	-0,007	1,780	-0,007	1,896	0,108
9	10	1,788	1,790	0,002	1,786	-0,002	1,786	-0,002
9	12	1,779	1,819	0,040	1,776	-0,003	1,778	-0,001
10	11	1,776	1,766	-0,010	1,774	-0,002	1,770	-0,006
10	12	1,788	1,790	0,002	1,807	0,019	1,786	-0,002
11	12	1,773	1,755	-0,017	1,776	0,004	1,768	-0,005

7. táblázat Alkoholát-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-alkoholát- <i>o</i> - karborán		1-alkoholát- <i>o</i> - karborán		9,12-biszalkoholát- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,627	0,006	2,292	0,671	1,615	0,006
1	3	1,717	1,714	-0,003	1,991	0,274	1,719	-0,002
1	4	1,694	1,695	0,001	1,640	-0,054	1,706	-0,012
1	5	1,694	1,695	0,001	1,640	-0,054	1,706	-0,013
1	6	1,717	1,714	-0,004	1,991	0,274	1,719	-0,001
2	3	1,717	1,722	0,005	1,654	-0,063	1,719	-0,001
2	6	1,717	1,722	0,005	1,654	-0,063	1,719	-0,002
2	7	1,694	1,700	0,006	1,666	-0,028	1,706	-0,012
2	11	1,694	1,700	0,006	1,666	-0,028	1,706	-0,013
3	4	1,775	1,778	0,003	1,796	0,022	1,767	0,008
3	7	1,775	1,763	-0,012	1,794	0,019	1,767	0,008
3	8	1,759	1,746	-0,012	1,773	0,014	1,749	0,010
4	5	1,780	1,764	-0,015	1,875	0,096	1,754	0,026
4	8	1,776	1,780	0,004	1,776	0,001	1,776	0,000
4	9	1,773	1,901	0,128	1,787	0,014	1,904	-0,132
5	6	1,775	1,778	0,003	1,796	0,022	1,767	0,008
5	9	1,773	1,901	0,128	1,787	0,014	1,904	-0,132
5	10	1,776	1,780	0,004	1,776	0,000	1,776	0,000
6	10	1,759	1,746	-0,013	1,773	0,014	1,749	0,010
6	11	1,775	1,763	-0,012	1,794	0,019	1,767	0,008
7	8	1,776	1,767	-0,009	1,761	-0,015	1,776	0,000
7	11	1,780	1,781	0,001	1,765	-0,015	1,754	0,026
7	12	1,773	1,773	0,000	1,779	0,006	1,904	-0,132
8	9	1,788	1,910	0,123	1,792	0,004	1,907	-0,120
8	12	1,788	1,786	-0,002	1,784	-0,004	1,907	-0,120
9	10	1,788	1,910	0,123	1,792	0,004	1,907	-0,120
9	12	1,779	1,886	0,107	1,766	-0,013	1,976	-0,197
10	11	1,776	1,767	-0,009	1,761	-0,015	1,776	0,000
10	12	1,788	1,786	-0,002	1,784	-0,004	1,907	-0,120
11	12	1,773	1,773	0,000	1,779	0,006	1,904	-0,132

8. táblázat Alkoholát-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-tiolát- <i>o</i> -karborán		4-tiolát- <i>o</i> -karborán		8-tiolát- <i>o</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,553	-0,067	1,631	0,011	1,617	-0,003
1	3	1,717	2,197	0,480	1,673	-0,044	1,737	0,020
1	4	1,694	1,660	-0,034	1,846	0,152	1,694	0,001
1	5	1,694	1,684	-0,010	1,675	-0,018	1,683	-0,011
1	6	1,717	1,716	-0,001	1,722	0,005	1,712	-0,005
2	3	1,717	2,197	0,480	1,734	0,017	1,737	0,019
2	6	1,717	1,716	-0,001	1,706	-0,011	1,712	-0,005
2	7	1,694	1,660	-0,034	1,679	-0,015	1,695	0,001
2	11	1,694	1,684	-0,010	1,685	-0,009	1,683	-0,011
3	4	1,775	1,891	0,116	1,854	0,079	1,760	-0,015
3	7	1,775	1,891	0,116	1,788	0,013	1,760	-0,015
3	8	1,759	1,718	-0,041	1,755	-0,004	1,811	0,053
4	5	1,780	1,800	0,020	1,862	0,082	1,784	0,004
4	8	1,776	1,798	0,022	1,827	0,051	1,843	0,067
4	9	1,773	1,787	0,014	1,817	0,044	1,773	0,000
5	6	1,775	1,762	-0,013	1,777	0,002	1,776	0,002
5	9	1,773	1,763	-0,010	1,766	-0,007	1,774	0,001
5	10	1,776	1,774	-0,002	1,780	0,004	1,770	-0,006
6	10	1,759	1,764	0,005	1,750	-0,009	1,763	0,004
6	11	1,775	1,762	-0,013	1,770	-0,005	1,777	0,002
7	8	1,776	1,798	0,022	1,776	0,000	1,843	0,067
7	11	1,780	1,800	0,020	1,780	0,001	1,784	0,004
7	12	1,773	1,787	0,014	1,767	-0,006	1,773	0,000
8	9	1,788	1,780	-0,008	1,791	0,004	1,857	0,070
8	12	1,788	1,780	-0,008	1,783	-0,004	1,857	0,070
9	10	1,788	1,789	0,001	1,791	0,004	1,790	0,002
9	12	1,779	1,793	0,014	1,781	0,002	1,771	-0,007
10	11	1,776	1,774	-0,002	1,777	0,001	1,770	-0,006
10	12	1,788	1,788	0,001	1,787	-0,001	1,790	0,002
11	12	1,773	1,763	-0,010	1,779	0,006	1,774	0,001

9. táblázat Tiolát-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-tiolát- <i>o</i> -karborán		1-tiolát- <i>o</i> -karborán		9,12-bisztiolát- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,628	0,007	1,749	0,128	1,630	-0,009
1	3	1,717	1,709	-0,008	1,757	0,040	1,711	0,006
1	4	1,694	1,700	0,006	1,717	0,023	1,703	-0,010
1	5	1,694	1,700	0,006	1,717	0,023	1,704	-0,010
1	6	1,717	1,709	-0,008	1,757	0,040	1,710	0,007
2	3	1,717	1,720	0,003	1,691	-0,026	1,710	0,007
2	6	1,717	1,720	0,003	1,691	-0,026	1,711	0,006
2	7	1,694	1,697	0,003	1,686	-0,008	1,703	-0,010
2	11	1,694	1,697	0,003	1,686	-0,008	1,703	-0,010
3	4	1,775	1,780	0,005	1,766	-0,009	1,769	0,006
3	7	1,775	1,765	-0,010	1,783	0,008	1,769	0,006
3	8	1,759	1,754	-0,005	1,768	0,009	1,761	-0,002
4	5	1,780	1,766	-0,013	1,776	-0,004	1,766	0,014
4	8	1,776	1,773	-0,002	1,779	0,004	1,773	0,003
4	9	1,773	1,835	0,063	1,776	0,004	1,823	-0,050
5	6	1,775	1,780	0,005	1,766	-0,009	1,769	0,006
5	9	1,773	1,835	0,062	1,776	0,004	1,823	-0,050
5	10	1,776	1,773	-0,002	1,779	0,004	1,773	0,003
6	10	1,759	1,754	-0,005	1,768	0,009	1,761	-0,002
6	11	1,775	1,765	-0,010	1,783	0,008	1,769	0,006
7	8	1,776	1,772	-0,004	1,766	-0,009	1,773	0,003
7	11	1,780	1,779	-0,001	1,770	-0,009	1,765	0,014
7	12	1,773	1,777	0,004	1,771	-0,002	1,823	-0,050
8	9	1,788	1,861	0,073	1,779	-0,009	1,847	-0,060
8	12	1,788	1,780	-0,008	1,787	-0,001	1,847	-0,060
9	10	1,788	1,860	0,073	1,779	-0,009	1,847	-0,060
9	12	1,779	1,847	0,068	1,777	-0,002	1,938	-0,159
10	11	1,776	1,772	-0,003	1,766	-0,009	1,773	0,003
10	12	1,788	1,780	-0,008	1,787	-0,001	1,847	-0,060
11	12	1,773	1,777	0,004	1,771	-0,001	1,823	-0,050

10. táblázat Tiolát-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		o- karborán	3-metil-o- karborán		4-metil-o- karborán		8-metil-o- karborán		9-metil-o- karborán		1-metil-o- karborán	
			1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)
1	2	1,620	1,616	-0,004	1,624	0,004	1,623	0,002	1,623	0,003	1,645	0,024
1	3	1,717	1,736	0,019	1,707	-0,010	1,716	-0,002	1,716	-0,001	1,725	0,008
1	4	1,694	1,686	-0,008	1,711	0,018	1,689	-0,004	1,692	-0,002	1,704	0,011
1	5	1,694	1,693	-0,001	1,687	-0,006	1,692	-0,002	1,691	-0,002	1,704	0,011
1	6	1,717	1,718	0,000	1,719	0,002	1,716	-0,001	1,716	-0,001	1,725	0,008
2	3	1,717	1,736	0,018	1,712	-0,005	1,716	-0,001	1,716	-0,001	1,707	-0,010
2	6	1,717	1,718	0,001	1,715	-0,002	1,716	-0,001	1,716	-0,001	1,707	-0,010
2	7	1,694	1,686	-0,008	1,693	-0,001	1,690	-0,004	1,694	0,000	1,692	-0,001
2	11	1,694	1,693	-0,001	1,692	-0,002	1,691	-0,003	1,694	0,000	1,692	-0,001
3	4	1,775	1,788	0,014	1,790	0,015	1,769	-0,006	1,775	0,000	1,769	-0,005
3	7	1,775	1,788	0,014	1,775	0,000	1,771	-0,004	1,773	-0,002	1,774	-0,001
3	8	1,759	1,771	0,013	1,757	-0,002	1,774	0,015	1,758	-0,001	1,761	0,002
4	5	1,780	1,779	-0,001	1,794	0,015	1,780	0,000	1,776	-0,004	1,774	-0,006
4	8	1,776	1,773	-0,003	1,789	0,013	1,793	0,017	1,774	-0,002	1,776	0,000
4	9	1,773	1,773	0,000	1,787	0,014	1,771	-0,002	1,789	0,016	1,772	0,000
5	6	1,775	1,773	-0,002	1,773	-0,002	1,775	0,000	1,775	0,000	1,770	-0,005
5	9	1,773	1,774	0,001	1,768	-0,004	1,773	0,001	1,789	0,016	1,772	0,000
5	10	1,776	1,777	0,001	1,776	0,000	1,776	0,000	1,774	-0,002	1,776	0,000
6	10	1,759	1,758	0,000	1,758	-0,001	1,760	0,001	1,758	-0,001	1,761	0,002
6	11	1,775	1,773	-0,002	1,774	-0,001	1,775	0,000	1,773	-0,002	1,774	-0,001
7	8	1,776	1,773	-0,003	1,776	0,000	1,793	0,017	1,775	-0,001	1,775	-0,001
7	11	1,780	1,779	-0,001	1,780	0,001	1,780	0,000	1,780	0,000	1,779	0,000
7	12	1,773	1,773	0,000	1,772	-0,001	1,770	-0,002	1,772	-0,001	1,774	0,001
8	9	1,788	1,789	0,001	1,785	-0,002	1,802	0,014	1,803	0,015	1,785	-0,002
8	12	1,788	1,789	0,001	1,788	0,001	1,803	0,015	1,783	-0,005	1,788	0,000
9	10	1,788	1,789	0,001	1,787	-0,001	1,787	0,000	1,803	0,015	1,785	-0,002
9	12	1,779	1,779	0,000	1,778	-0,001	1,776	-0,002	1,792	0,014	1,778	-0,001
10	11	1,776	1,777	0,001	1,777	0,001	1,776	0,000	1,775	-0,001	1,775	-0,001
10	12	1,788	1,789	0,001	1,788	0,000	1,787	-0,001	1,783	-0,005	1,788	0,000
11	12	1,773	1,774	0,001	1,776	0,003	1,773	0,000	1,772	-0,001	1,773	0,001

11. táblázat Metil-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> - karborán	3-szilil- <i>o</i> - karborán		4-szilil- <i>o</i> - karborán		8-szilil- <i>o</i> - karborán		9-szilil- <i>o</i> - karborán		1-szilil- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,618	-0,002	1,623	0,002	1,619	-0,001	1,623	0,002	1,646	0,026
1	3	1,717	1,728	0,011	1,712	-0,005	1,718	0,001	1,716	-0,001	1,724	0,007
1	4	1,694	1,690	-0,004	1,702	0,008	1,693	-0,001	1,694	0,000	1,707	0,013
1	5	1,694	1,693	-0,001	1,688	-0,006	1,692	-0,002	1,694	0,000	1,707	0,013
1	6	1,717	1,717	0,000	1,716	-0,001	1,717	0,000	1,716	-0,001	1,724	0,007
2	3	1,717	1,728	0,011	1,719	0,002	1,718	0,000	1,693	-0,024	1,709	-0,008
2	6	1,717	1,717	0,000	1,714	-0,003	1,717	0,000	1,693	-0,024	1,709	-0,008
2	7	1,694	1,690	-0,004	1,692	-0,002	1,693	-0,001	1,775	0,082	1,691	-0,003
2	11	1,694	1,693	-0,001	1,693	-0,001	1,692	-0,002	1,176	-0,517	1,691	-0,003
3	4	1,775	1,782	0,007	1,778	0,003	1,772	-0,003	1,775	0,001	1,773	-0,002
3	7	1,775	1,782	0,007	1,778	0,003	1,772	-0,003	1,761	-0,014	1,777	0,002
3	8	1,759	1,772	0,013	1,761	0,002	1,763	0,004	1,779	0,021	1,763	0,004
4	5	1,780	1,782	0,002	1,786	0,006	1,781	0,001	1,775	-0,005	1,773	-0,007
4	8	1,776	1,774	-0,002	1,786	0,010	1,783	0,007	1,779	0,004	1,775	-0,001
4	9	1,773	1,777	0,004	1,785	0,012	1,773	0,000	1,779	0,006	1,772	0,000
5	6	1,775	1,774	-0,001	1,777	0,002	1,775	0,000	1,775	0,000	1,773	-0,002
5	9	1,773	1,774	0,001	1,774	0,001	1,775	0,002	1,777	0,004	1,772	0,000
5	10	1,776	1,778	0,002	1,780	0,004	1,777	0,001	1,780	0,004	1,775	-0,001
6	10	1,759	1,761	0,002	1,760	0,001	1,759	0,000	1,773	0,014	1,763	0,004
6	11	1,775	1,774	-0,001	1,775	0,000	1,775	0,000	1,795	0,020	1,777	0,002
7	8	1,776	1,774	-0,002	1,776	0,000	1,783	0,007	1,786	0,010	1,775	-0,001
7	11	1,780	1,782	0,002	1,782	0,002	1,781	0,001	1,795	0,015	1,780	0,000
7	12	1,773	1,777	0,004	1,774	0,002	1,774	0,001	1,787	0,014	1,774	0,001
8	9	1,788	1,787	0,000	1,784	-0,004	1,798	0,010	1,777	-0,011	1,787	-0,001
8	12	1,788	1,787	0,000	1,789	0,001	1,797	0,010	1,785	-0,002	1,789	0,001
9	10	1,788	1,788	0,000	1,787	-0,001	1,788	0,000	1,773	-0,015	1,787	-0,001
9	12	1,779	1,780	0,001	1,778	0,000	1,778	-0,001	0,000	-1,779	1,777	-0,002
10	11	1,776	1,778	0,002	1,778	0,002	1,777	0,001	0,000	-1,776	1,775	-0,001
10	12	1,788	1,788	0,000	1,788	0,001	1,788	0,001	0,000	-1,788	1,789	0,001
11	12	1,773	1,774	0,001	1,773	0,001	1,775	0,003	0,000	-1,773	1,774	0,001

12. táblázat Szilil-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> - karborán	3-klór- <i>o</i> - karborán		4-klór- <i>o</i> - karborán		8-klór- <i>o</i> - karborán		9-klór- <i>o</i> - karborán		1-klór- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,624	0,004	1,621	0,001	1,624	0,004	1,623	0,002	1,636	0,016
1	3	1,717	1,727	0,010	1,719	0,002	1,713	-0,004	1,717	0,000	1,728	0,011
1	4	1,694	1,694	0,000	1,702	0,008	1,689	-0,005	1,690	-0,004	1,701	0,007
1	5	1,694	1,690	-0,004	1,694	0,000	1,692	-0,002	1,690	-0,004	1,701	0,007
1	6	1,717	1,716	-0,001	1,717	-0,001	1,716	-0,001	1,717	0,000	1,728	0,011
2	3	1,717	1,727	0,010	1,712	-0,006	1,713	-0,004	1,716	-0,002	1,721	0,004
2	6	1,717	1,716	-0,001	1,717	0,000	1,716	-0,001	1,716	-0,001	1,721	0,004
2	7	1,694	1,694	0,000	1,694	0,001	1,689	-0,005	1,693	0,000	1,693	0,000
2	11	1,694	1,690	-0,004	1,692	-0,002	1,692	-0,002	1,693	0,000	1,693	0,000
3	4	1,775	1,779	0,004	1,785	0,010	1,778	0,003	1,774	-0,001	1,779	0,004
3	7	1,775	1,779	0,004	1,772	-0,003	1,778	0,003	1,773	-0,001	1,774	-0,001
3	8	1,759	1,761	0,002	1,761	0,002	1,768	0,009	1,757	-0,001	1,757	-0,002
4	5	1,780	1,781	0,001	1,789	0,009	1,779	-0,001	1,785	0,005	1,787	0,007
4	8	1,776	1,780	0,005	1,780	0,004	1,785	0,009	1,779	0,004	1,778	0,002
4	9	1,773	1,773	0,000	1,775	0,003	1,778	0,005	1,780	0,008	1,774	0,001
5	6	1,775	1,775	0,000	1,772	-0,003	1,775	0,000	1,774	-0,001	1,779	0,004
5	9	1,773	1,775	0,003	1,775	0,002	1,773	0,001	1,780	0,008	1,774	0,001
5	10	1,776	1,777	0,001	1,773	-0,003	1,776	0,001	1,779	0,004	1,778	0,002
6	10	1,759	1,759	0,000	1,760	0,001	1,760	0,001	1,757	-0,002	1,757	-0,002
6	11	1,775	1,775	0,000	1,774	-0,001	1,775	0,000	1,773	-0,001	1,774	-0,001
7	8	1,776	1,780	0,005	1,777	0,001	1,785	0,009	1,773	-0,002	1,776	0,000
7	11	1,780	1,781	0,001	1,780	0,000	1,779	-0,001	1,781	0,001	1,780	0,000
7	12	1,773	1,773	0,000	1,773	0,001	1,778	0,005	1,773	0,000	1,773	0,001
8	9	1,788	1,789	0,001	1,794	0,006	1,791	0,004	1,793	0,005	1,786	-0,002
8	12	1,788	1,789	0,001	1,787	0,000	1,791	0,004	1,791	0,003	1,787	0,000
9	10	1,788	1,788	0,001	1,789	0,001	1,786	-0,001	1,793	0,005	1,786	-0,002
9	12	1,779	1,780	0,001	1,779	0,000	1,783	0,004	1,780	0,001	1,778	-0,001
10	11	1,776	1,777	0,001	1,777	0,001	1,776	0,001	1,773	-0,002	1,776	0,000
10	12	1,788	1,788	0,001	1,789	0,001	1,786	-0,001	1,791	0,003	1,787	0,000
11	12	1,773	1,775	0,003	1,776	0,004	1,773	0,001	1,773	0,000	1,773	0,001

13. táblázat Klór-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-nitro- <i>o</i> -karborán		4-nitro- <i>o</i> -karborán		8-nitro- <i>o</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,627	-0,007	1,613	0,008	1,622	-0,002
1	3	1,717	1,701	0,016	1,732	-0,015	1,710	0,007
1	4	1,694	1,707	-0,013	1,680	0,014	1,692	0,002
1	5	1,694	1,685	0,008	1,702	-0,008	1,696	-0,002
1	6	1,717	1,714	0,003	1,711	0,006	1,717	0,000
2	3	1,717	1,701	0,016	1,714	0,003	1,710	0,008
2	6	1,717	1,714	0,003	1,719	-0,002	1,717	0,000
2	7	1,694	1,707	-0,013	1,699	-0,005	1,692	0,002
2	11	1,694	1,686	0,008	1,694	0,000	1,696	-0,002
3	4	1,775	1,761	0,014	1,767	0,008	1,785	-0,010
3	7	1,775	1,760	0,015	1,768	0,007	1,785	-0,010
3	8	1,759	1,749	0,010	1,769	-0,010	1,762	-0,003
4	5	1,780	1,783	-0,003	1,769	0,011	1,779	0,001
4	8	1,776	1,784	-0,008	1,766	0,010	1,767	0,009
4	9	1,773	1,774	-0,001	1,763	0,009	1,786	-0,013
5	6	1,775	1,778	-0,003	1,775	0,000	1,776	-0,001
5	9	1,773	1,779	-0,007	1,785	-0,012	1,773	0,000
5	10	1,776	1,779	-0,003	1,773	0,003	1,778	-0,003
6	10	1,759	1,761	-0,002	1,764	-0,005	1,757	0,002
6	11	1,775	1,778	-0,003	1,776	-0,001	1,776	-0,001
7	8	1,776	1,784	-0,008	1,777	-0,002	1,767	0,009
7	11	1,780	1,783	-0,003	1,781	-0,001	1,779	0,001
7	12	1,773	1,774	-0,001	1,776	-0,003	1,786	-0,013
8	9	1,788	1,788	-0,001	1,793	-0,005	1,777	0,011
8	12	1,788	1,788	-0,001	1,787	0,000	1,777	0,011
9	10	1,788	1,787	0,001	1,789	-0,001	1,787	0,001
9	12	1,779	1,780	-0,001	1,779	0,000	1,783	-0,004
10	11	1,776	1,779	-0,003	1,778	-0,002	1,779	-0,003
10	12	1,788	1,787	0,001	1,789	-0,001	1,787	0,001
11	12	1,773	1,779	-0,007	1,773	0,000	1,773	0,000

14. táblázat Nitro-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-nitro- <i>o</i> -karborán		1-nitro- <i>o</i> -karborán		1,2-bisznitro- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,622	-0,002	1,618	0,003	1,651	-0,030
1	3	1,717	1,716	0,001	1,721	-0,004	1,732	-0,015
1	4	1,694	1,688	0,006	1,700	-0,006	1,695	-0,001
1	5	1,694	1,690	0,003	1,700	-0,006	1,695	-0,002
1	6	1,717	1,720	-0,003	1,721	-0,004	1,732	-0,015
2	3	1,717	1,715	0,002	1,727	-0,010	1,732	-0,015
2	6	1,717	1,718	-0,001	1,727	-0,010	1,732	-0,015
2	7	1,694	1,693	0,000	1,692	0,002	1,693	0,001
2	11	1,694	1,690	0,003	1,692	0,002	1,693	0,001
3	4	1,775	1,771	0,004	1,789	-0,014	1,790	-0,015
3	7	1,775	1,778	-0,003	1,775	0,000	1,781	-0,006
3	8	1,759	1,762	-0,003	1,756	0,003	1,759	0,000
4	5	1,780	1,789	-0,010	1,786	-0,007	1,786	-0,006
4	8	1,776	1,784	-0,009	1,777	-0,001	1,774	0,002
4	9	1,773	1,772	0,000	1,772	0,001	1,773	-0,001
5	6	1,775	1,773	0,002	1,789	-0,014	1,790	-0,015
5	9	1,773	1,764	0,008	1,772	0,001	1,773	-0,001
5	10	1,776	1,789	-0,013	1,777	-0,001	1,774	0,001
6	10	1,759	1,757	0,002	1,756	0,003	1,759	0,000
6	11	1,775	1,777	-0,002	1,775	0,000	1,781	-0,006
7	8	1,776	1,777	-0,001	1,780	-0,004	1,777	-0,001
7	11	1,780	1,781	-0,001	1,780	-0,001	1,792	-0,012
7	12	1,773	1,772	0,001	1,774	-0,001	1,774	-0,001
8	9	1,788	1,774	0,013	1,788	0,000	1,788	0,000
8	12	1,788	1,800	-0,012	1,789	-0,001	1,788	-0,001
9	10	1,788	1,777	0,011	1,788	0,000	1,788	0,000
9	12	1,779	1,769	0,009	1,777	0,001	1,775	0,004
10	11	1,776	1,776	0,000	1,780	-0,004	1,777	-0,001
10	12	1,788	1,791	-0,004	1,789	-0,001	1,788	-0,001
11	12	1,773	1,773	0,000	1,774	-0,001	1,774	-0,001

15. táblázat Nitro-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	3-trifluorometil- <i>o</i> - karborán		4-trifluorometil- <i>o</i> - karborán		8-trifluorometil- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,630	-0,010	1,618	0,003	1,625	-0,004
1	3	1,717	1,707	0,010	1,724	-0,007	1,710	0,007
1	4	1,694	1,698	-0,004	1,688	0,006	1,691	0,003
1	5	1,694	1,689	0,005	1,696	-0,002	1,693	0,000
1	6	1,717	1,714	0,004	1,713	0,004	1,717	0,000
2	3	1,717	1,707	0,010	1,712	0,005	1,710	0,007
2	6	1,717	1,714	0,003	1,718	-0,001	1,717	0,000
2	7	1,694	1,698	-0,004	1,697	-0,004	1,690	0,004
2	11	1,694	1,689	0,005	1,694	0,000	1,694	0,000
3	4	1,775	1,770	0,005	1,774	0,001	1,781	-0,006
3	7	1,775	1,770	0,005	1,772	0,003	1,780	-0,005
3	8	1,759	1,759	0,000	1,764	-0,005	1,762	-0,003
4	5	1,780	1,781	-0,001	1,776	0,003	1,779	0,001
4	8	1,776	1,780	-0,004	1,774	0,002	1,775	0,001
4	9	1,773	1,774	-0,001	1,772	0,001	1,779	-0,006
5	6	1,775	1,778	-0,003	1,774	0,001	1,775	0,000
5	9	1,773	1,776	-0,004	1,778	-0,005	1,774	-0,001
5	10	1,776	1,778	-0,002	1,775	0,001	1,778	-0,002
6	10	1,759	1,762	-0,003	1,762	-0,003	1,759	0,000
6	11	1,775	1,778	-0,003	1,776	-0,001	1,776	-0,001
7	8	1,776	1,780	-0,004	1,777	-0,001	1,776	0,000
7	11	1,780	1,781	-0,001	1,781	-0,001	1,778	0,001
7	12	1,773	1,774	-0,001	1,774	-0,001	1,779	-0,006
8	9	1,788	1,788	0,000	1,791	-0,003	1,787	0,001
8	12	1,788	1,788	0,000	1,788	0,000	1,785	0,003
9	10	1,788	1,788	0,000	1,788	0,000	1,786	0,002
9	12	1,779	1,780	-0,001	1,777	0,001	1,782	-0,004
10	11	1,776	1,778	-0,002	1,777	-0,001	1,778	-0,002
10	12	1,788	1,788	0,000	1,790	-0,002	1,787	0,001
11	12	1,773	1,776	-0,004	1,775	-0,002	1,774	-0,001

16. táblázat Trimetilfluor-származékok; *o*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>o</i> -karborán	9-trifluorometil- <i>o</i> - karborán		1-trifluorometil- <i>o</i> - karborán		1,2- bisztrifluorometil- <i>o</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,620	1,623	-0,003	1,636	-0,016	1,665	-0,045
1	3	1,717	1,718	-0,001	1,724	-0,007	1,733	-0,016
1	4	1,694	1,689	0,004	1,707	-0,013	1,715	-0,022
1	5	1,694	1,690	0,003	1,707	-0,013	1,703	-0,010
1	6	1,717	1,718	-0,001	1,724	-0,007	1,741	-0,024
2	3	1,717	1,716	0,001	1,720	-0,003	1,741	-0,024
2	6	1,717	1,717	0,000	1,720	-0,003	1,733	-0,016
2	7	1,694	1,693	0,001	1,689	0,005	1,703	-0,010
2	11	1,694	1,693	0,001	1,689	0,005	1,715	-0,022
3	4	1,775	1,773	0,002	1,781	-0,006	1,774	0,001
3	7	1,775	1,776	-0,001	1,775	0,000	1,781	-0,006
3	8	1,759	1,760	-0,001	1,759	0,000	1,757	0,002
4	5	1,780	1,787	-0,008	1,782	-0,002	1,781	-0,001
4	8	1,776	1,780	-0,004	1,776	0,000	1,769	0,007
4	9	1,773	1,774	-0,001	1,771	0,002	1,767	0,006
5	6	1,775	1,773	0,002	1,781	-0,006	1,781	-0,006
5	9	1,773	1,773	0,000	1,771	0,002	1,775	-0,002
5	10	1,776	1,781	-0,005	1,776	0,000	1,773	0,003
6	10	1,759	1,759	0,000	1,759	0,000	1,757	0,002
6	11	1,775	1,776	-0,001	1,775	0,000	1,774	0,001
7	8	1,776	1,776	0,000	1,776	0,000	1,773	0,003
7	11	1,780	1,781	-0,002	1,780	-0,001	1,781	-0,001
7	12	1,773	1,771	0,002	1,774	-0,001	1,775	-0,002
8	9	1,788	1,784	0,004	1,786	0,001	1,786	0,001
8	12	1,788	1,792	-0,004	1,788	-0,001	1,782	0,005
9	10	1,788	1,785	0,003	1,786	0,001	1,782	0,005
9	12	1,779	1,776	0,003	1,776	0,002	1,774	0,005
10	11	1,776	1,775	0,001	1,776	0,000	1,769	0,007
10	12	1,788	1,791	-0,003	1,788	-0,001	1,787	0,001
11	12	1,773	1,772	0,001	1,774	-0,001	1,767	0,006

17. táblázat Trimetilfluor-származékok; *o*-karborán

Meta-karboránok

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-amino- <i>m</i> - karborán		4-amino- <i>m</i> - karborán		5-amino- <i>m</i> - karborán		9-amino- <i>m</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,616	-0,004	1,624	0,004	1,623	0,002	1,623	0,003
1	3	1,689	1,736	0,019	1,707	-0,010	1,716	-0,002	1,716	-0,001
1	4	1,709	1,686	-0,008	1,711	0,018	1,689	-0,004	1,692	-0,002
1	5	1,707	1,693	-0,001	1,687	-0,006	1,692	-0,002	1,691	-0,002
1	6	1,709	1,718	0,000	1,719	0,002	1,716	-0,001	1,716	-0,001
2	3	1,785	1,736	0,018	1,712	-0,005	1,716	-0,001	1,716	-0,001
2	6	1,763	1,718	0,001	1,715	-0,002	1,716	-0,001	1,716	-0,001
2	7	1,690	1,686	-0,008	1,693	-0,001	1,690	-0,004	1,694	0,000
2	11	1,763	1,693	-0,001	1,692	-0,002	1,691	-0,003	1,694	0,000
3	4	1,764	1,788	0,014	1,790	0,015	1,769	-0,006	1,775	0,000
3	7	1,689	1,788	0,014	1,775	0,000	1,771	-0,004	1,773	-0,002
3	8	1,763	1,771	0,013	1,757	-0,002	1,774	0,015	1,758	-0,001
4	5	1,777	1,779	-0,001	1,794	0,015	1,780	0,000	1,776	-0,004
4	8	1,765	1,773	-0,003	1,789	0,013	1,793	0,017	1,774	-0,002
4	9	1,776	1,773	0,000	1,787	0,014	1,771	-0,002	1,789	0,016
5	6	1,779	1,773	-0,002	1,773	-0,002	1,775	0,000	1,775	0,000
5	9	1,773	1,774	0,001	1,768	-0,004	1,773	0,001	1,789	0,016
5	10	1,774	1,777	0,001	1,776	0,000	1,776	0,000	1,774	-0,002
6	10	1,777	1,758	0,000	1,758	-0,001	1,760	0,001	1,758	-0,001
6	11	1,767	1,773	-0,002	1,774	-0,001	1,775	0,000	1,773	-0,002
7	8	1,710	1,773	-0,003	1,776	0,000	1,793	0,017	1,775	-0,001
7	11	1,710	1,779	-0,001	1,780	0,001	1,780	0,000	1,780	0,000
7	12	1,708	1,773	0,000	1,772	-0,001	1,770	-0,002	1,772	-0,001
8	9	1,776	1,789	0,001	1,785	-0,002	1,802	0,014	1,803	0,015
8	12	1,778	1,789	0,001	1,788	0,001	1,803	0,015	1,783	-0,005
9	10	1,790	1,789	0,001	1,787	-0,001	1,787	0,000	1,803	0,015
9	12	1,772	1,779	0,000	1,778	-0,001	1,776	-0,002	1,792	0,014
10	11	1,777	1,777	0,001	1,777	0,001	1,776	0,000	1,775	-0,001
10	12	1,775	1,789	0,001	1,788	0,000	1,787	-0,001	1,783	-0,005
11	12	1,780	1,774	0,001	1,776	0,003	1,773	0,000	1,772	-0,001

18. táblázat Amin-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	1,7-biszamino- <i>m</i> - karborán		1-amino- <i>m</i> -karborán		9,10-biszamino- <i>m</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,596	-0,025	1,614	-0,006	1,630	0,010
1	3	1,689	1,777	0,060	1,698	-0,019	1,713	-0,004
1	4	1,709	1,693	-0,001	1,762	0,068	1,684	-0,010
1	5	1,707	1,685	-0,009	1,685	-0,009	1,694	0,000
1	6	1,709	1,719	0,002	1,709	-0,008	1,721	0,004
2	3	1,785	1,777	0,059	1,719	0,002	1,720	0,003
2	6	1,763	1,719	0,002	1,710	-0,007	1,709	-0,008
2	7	1,690	1,693	-0,001	1,694	0,000	1,683	-0,011
2	11	1,763	1,685	-0,009	1,689	-0,005	1,686	-0,008
3	4	1,764	1,780	0,005	1,799	0,024	1,782	0,007
3	7	1,689	1,780	0,005	1,777	0,002	1,766	-0,009
3	8	1,763	1,771	0,012	1,762	0,004	1,782	0,023
4	5	1,777	1,781	0,001	1,796	0,016	1,784	0,004
4	8	1,765	1,776	0,000	1,789	0,013	1,800	0,025
4	9	1,776	1,780	0,007	1,787	0,015	1,768	-0,005
5	6	1,779	1,771	-0,004	1,776	0,002	1,771	-0,004
5	9	1,773	1,777	0,004	1,775	0,002	1,769	-0,004
5	10	1,774	1,781	0,005	1,778	0,003	1,772	-0,004
6	10	1,777	1,754	-0,005	1,762	0,003	1,764	0,005
6	11	1,767	1,771	-0,004	1,774	-0,001	1,775	0,001
7	8	1,710	1,776	0,000	1,772	-0,004	1,813	0,038
7	11	1,710	1,781	0,001	1,784	0,004	1,773	-0,007
7	12	1,708	1,780	0,007	1,773	0,001	1,774	0,002
8	9	1,776	1,781	-0,007	1,786	-0,002	1,819	0,031
8	12	1,778	1,781	-0,006	1,788	0,001	1,796	0,009
9	10	1,790	1,787	-0,001	1,783	-0,005	1,778	-0,010
9	12	1,772	1,778	-0,001	1,777	-0,002	1,780	0,002
10	11	1,777	1,781	0,005	1,780	0,004	1,780	0,004
10	12	1,775	1,787	-0,001	1,788	0,000	1,792	0,005
11	12	1,780	1,777	0,004	1,772	-0,001	1,776	0,003

19. táblázat Amin-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-hidroxi- <i>m</i> - karborán		4-hidroxi- <i>m</i> - karborán		5-hidroxi- <i>m</i> - karborán		9-hidroxi- <i>m</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,717	0,028	1,682	-0,008	1,682	-0,008	1,687	-0,002
1	3	1,689	1,684	-0,005	1,688	-0,001	1,689	0,000	1,688	-0,002
1	4	1,709	1,707	-0,002	1,758	0,049	1,699	-0,010	1,706	-0,004
1	5	1,707	1,707	0,000	1,700	-0,008	1,753	0,046	1,704	-0,004
1	6	1,709	1,708	0,000	1,706	-0,002	1,710	0,001	1,712	0,004
2	3	1,785	1,806	0,021	1,786	0,001	1,783	-0,002	1,786	0,001
2	6	1,763	1,773	0,010	1,760	-0,003	1,762	-0,001	1,765	0,001
2	7	1,690	1,717	0,028	1,694	0,004	1,692	0,002	1,690	0,000
2	11	1,763	1,774	0,011	1,763	0,000	1,765	0,002	1,762	-0,001
3	4	1,764	1,761	-0,003	1,783	0,020	1,759	-0,005	1,758	-0,006
3	7	1,689	1,684	-0,005	1,686	-0,003	1,687	-0,002	1,690	0,001
3	8	1,763	1,761	-0,003	1,763	0,000	1,763	0,000	1,762	-0,002
4	5	1,777	1,777	0,000	1,796	0,019	1,803	0,026	1,774	-0,003
4	8	1,765	1,769	0,004	1,780	0,015	1,761	-0,005	1,771	0,006
4	9	1,776	1,777	0,001	1,786	0,010	1,777	0,001	1,804	0,028
5	6	1,779	1,776	-0,002	1,777	-0,002	1,794	0,016	1,776	-0,002
5	9	1,773	1,772	-0,001	1,773	0,000	1,782	0,009	1,795	0,022
5	10	1,774	1,773	0,000	1,771	-0,003	1,787	0,013	1,777	0,003
6	10	1,777	1,773	-0,003	1,778	0,002	1,774	-0,002	1,771	-0,006
6	11	1,767	1,764	-0,003	1,765	-0,003	1,766	-0,002	1,765	-0,003
7	8	1,710	1,707	-0,003	1,705	-0,006	1,712	0,001	1,709	-0,001
7	11	1,710	1,709	-0,001	1,709	-0,001	1,709	-0,001	1,709	-0,001
7	12	1,708	1,708	0,000	1,707	-0,001	1,708	0,000	1,699	-0,009
8	9	1,776	1,777	0,001	1,781	0,005	1,774	-0,002	1,795	0,019
8	12	1,778	1,777	-0,001	1,779	0,001	1,779	0,002	1,778	0,000
9	10	1,790	1,788	-0,001	1,785	-0,004	1,793	0,003	1,803	0,013
9	12	1,772	1,772	0,000	1,769	-0,003	1,772	0,000	1,798	0,026
10	11	1,777	1,773	-0,004	1,778	0,001	1,772	-0,005	1,773	-0,004
10	12	1,775	1,773	-0,001	1,772	-0,003	1,770	-0,005	1,772	-0,002
11	12	1,780	1,776	-0,004	1,776	-0,004	1,776	-0,004	1,777	-0,004

20. táblázat Hidroxi-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	1,7-biszhidroxi- <i>m</i> - karborán		1-hidroxi- <i>m</i> -karborán		9,10-biszhidroxi- <i>m</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,697	0,007	1,700	0,010	1,690	0,001
1	3	1,689	1,700	0,011	1,701	0,012	1,694	0,004
1	4	1,709	1,730	0,021	1,731	0,022	1,717	0,007
1	5	1,707	1,715	0,008	1,704	-0,003	1,690	-0,017
1	6	1,709	1,731	0,022	1,732	0,023	1,705	-0,004
2	3	1,785	1,798	0,014	1,792	0,007	1,784	-0,001
2	6	1,763	1,762	-0,001	1,761	-0,002	1,761	-0,002
2	7	1,690	1,700	0,010	1,687	-0,003	1,685	-0,004
2	11	1,763	1,762	-0,001	1,768	0,005	1,762	-0,001
3	4	1,764	1,762	-0,002	1,759	-0,004	1,760	-0,004
3	7	1,689	1,697	0,008	1,686	-0,003	1,691	0,002
3	8	1,763	1,762	-0,001	1,768	0,004	1,761	-0,003
4	5	1,777	1,778	0,001	1,780	0,003	1,776	-0,001
4	8	1,765	1,761	-0,005	1,759	-0,006	1,766	0,001
4	9	1,776	1,767	-0,009	1,770	-0,006	1,788	0,012
5	6	1,779	1,776	-0,002	1,778	0,000	1,781	0,002
5	9	1,773	1,775	0,003	1,774	0,002	1,798	0,025
5	10	1,774	1,776	0,002	1,774	0,000	1,790	0,016
6	10	1,777	1,767	-0,010	1,770	-0,007	1,791	0,014
6	11	1,767	1,761	-0,007	1,759	-0,008	1,764	-0,004
7	8	1,710	1,731	0,021	1,710	0,000	1,715	0,004
7	11	1,710	1,730	0,020	1,711	0,001	1,701	-0,009
7	12	1,708	1,715	0,007	1,711	0,003	1,698	-0,010
8	9	1,776	1,767	-0,009	1,773	-0,003	1,789	0,013
8	12	1,778	1,776	-0,001	1,775	-0,003	1,777	-0,001
9	10	1,790	1,789	0,000	1,792	0,003	1,824	0,034
9	12	1,772	1,776	0,004	1,773	0,001	1,800	0,028
10	11	1,777	1,767	-0,010	1,773	-0,004	1,799	0,022
10	12	1,775	1,775	0,001	1,773	-0,001	1,788	0,013
11	12	1,780	1,778	-0,003	1,776	-0,004	1,778	-0,003

21. táblázat Hidroxi-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-tiol- <i>m</i> -karborán		4-tiol- <i>m</i> -karborán		5-tiol- <i>m</i> -karborán		9-tiol- <i>m</i> -karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,708	0,018	1,683	-0,006	1,683	-0,007	1,688	-0,002
1	3	1,689	1,688	-0,001	1,688	-0,002	1,686	-0,004	1,686	-0,003
1	4	1,709	1,705	-0,005	1,740	0,030	1,704	-0,005	1,703	-0,006
1	5	1,707	1,706	-0,001	1,703	-0,004	1,737	0,030	1,711	0,004
1	6	1,709	1,705	-0,004	1,704	-0,005	1,708	-0,001	1,713	0,004
2	3	1,785	1,789	0,004	1,788	0,003	1,781	-0,003	1,784	-0,001
2	6	1,763	1,770	0,007	1,759	-0,004	1,766	0,003	1,766	0,003
2	7	1,690	1,708	0,018	1,694	0,004	1,689	-0,001	1,693	0,003
2	11	1,763	1,770	0,007	1,762	-0,002	1,765	0,002	1,760	-0,003
3	4	1,764	1,765	0,001	1,769	0,006	1,765	0,002	1,759	-0,005
3	7	1,689	1,688	-0,001	1,689	0,000	1,688	-0,001	1,692	0,002
3	8	1,763	1,765	0,001	1,768	0,005	1,764	0,001	1,765	0,001
4	5	1,777	1,776	-0,001	1,784	0,007	1,785	0,008	1,776	-0,001
4	8	1,765	1,771	0,006	1,774	0,008	1,766	0,000	1,767	0,001
4	9	1,776	1,777	0,002	1,783	0,007	1,780	0,005	1,794	0,018
5	6	1,779	1,781	0,002	1,781	0,003	1,783	0,004	1,780	0,001
5	9	1,773	1,771	-0,001	1,776	0,003	1,778	0,005	1,776	0,003
5	10	1,774	1,772	-0,001	1,774	0,000	1,781	0,008	1,778	0,005
6	10	1,777	1,775	-0,002	1,779	0,002	1,780	0,003	1,772	-0,005
6	11	1,767	1,770	0,002	1,765	-0,002	1,768	0,001	1,763	-0,004
7	8	1,710	1,705	-0,006	1,706	-0,005	1,713	0,003	1,708	-0,002
7	11	1,710	1,705	-0,005	1,711	0,001	1,710	0,000	1,709	-0,001
7	12	1,708	1,706	-0,002	1,708	-0,001	1,704	-0,004	1,703	-0,005
8	9	1,776	1,777	0,001	1,774	-0,002	1,774	-0,002	1,780	0,004
8	12	1,778	1,776	-0,002	1,779	0,001	1,778	0,000	1,784	0,006
9	10	1,790	1,791	0,001	1,786	-0,004	1,787	-0,003	1,800	0,011
9	12	1,772	1,771	-0,001	1,773	0,000	1,774	0,002	1,783	0,011
10	11	1,777	1,775	-0,002	1,779	0,002	1,773	-0,004	1,776	0,000
10	12	1,775	1,772	-0,002	1,771	-0,003	1,772	-0,003	1,769	-0,006
11	12	1,780	1,781	0,000	1,775	-0,005	1,777	-0,004	1,780	-0,001

22. táblázat Tiol-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	1,7-bisztiol- <i>m</i> - karborán		1-tiol- <i>m</i> -karborán		9,10-bisztiol- <i>m</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,697	0,007	1,701	0,011	1,686	-0,004
1	3	1,689	1,700	0,011	1,700	0,011	1,693	0,004
1	4	1,709	1,730	0,021	1,731	0,022	1,717	0,008
1	5	1,707	1,715	0,008	1,712	0,005	1,704	-0,003
1	6	1,709	1,731	0,022	1,731	0,022	1,700	-0,009
2	3	1,785	1,798	0,014	1,792	0,007	1,785	0,000
2	6	1,763	1,762	-0,001	1,760	-0,004	1,761	-0,002
2	7	1,690	1,700	0,010	1,687	-0,003	1,686	-0,004
2	11	1,763	1,762	-0,001	1,766	0,002	1,765	0,002
3	4	1,764	1,762	-0,002	1,760	-0,004	1,762	-0,001
3	7	1,689	1,697	0,008	1,688	-0,001	1,693	0,004
3	8	1,763	1,762	-0,001	1,766	0,002	1,759	-0,005
4	5	1,777	1,778	0,001	1,781	0,004	1,778	0,001
4	8	1,765	1,761	-0,005	1,763	-0,002	1,768	0,003
4	9	1,776	1,767	-0,009	1,771	-0,004	1,775	0,000
5	6	1,779	1,777	-0,002	1,781	0,002	1,779	0,000
5	9	1,773	1,775	0,003	1,775	0,002	1,790	0,017
5	10	1,774	1,776	0,002	1,775	0,001	1,775	0,001
6	10	1,777	1,767	-0,010	1,772	-0,005	1,789	0,013
6	11	1,767	1,761	-0,007	1,763	-0,004	1,766	-0,001
7	8	1,710	1,731	0,021	1,709	-0,001	1,714	0,004
7	11	1,710	1,730	0,020	1,709	-0,001	1,702	-0,008
7	12	1,708	1,715	0,007	1,710	0,002	1,704	-0,004
8	9	1,776	1,767	-0,009	1,772	-0,004	1,781	0,005
8	12	1,778	1,777	-0,001	1,776	-0,002	1,774	-0,003
9	10	1,790	1,789	0,000	1,790	0,000	1,812	0,022
9	12	1,772	1,776	0,004	1,773	0,001	1,785	0,012
10	11	1,777	1,767	-0,010	1,772	-0,004	1,785	0,008
10	12	1,775	1,775	0,001	1,773	-0,001	1,783	0,009
11	12	1,780	1,778	-0,003	1,776	-0,005	1,782	0,001

23. táblázat Tiol-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötési hossz vált számított		<i>m</i> - karborán	2-alkoholát- <i>m</i> - karborán anion		4-alkoholát- <i>m</i> - karborán anion		5-alkoholát- <i>m</i> - karborán anion		9-alkoholát- <i>m</i> - karborán anion	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	2,576	0,886	1,667	-0,023	1,670	-0,020	1,692	0,002
1	3	1,689	1,627	-0,062	1,655	-0,035	1,670	-0,019	1,681	-0,009
1	4	1,709	1,698	-0,011	2,226	0,516	1,668	-0,042	1,707	-0,003
1	5	1,707	1,664	-0,044	1,670	-0,037	2,285	0,577	1,715	0,008
1	6	1,709	1,663	-0,045	1,688	-0,021	1,668	-0,041	1,713	0,004
2	3	1,785	2,797	1,013	1,809	0,024	1,780	-0,005	1,784	0,000
2	6	1,763	1,785	0,021	1,754	-0,009	1,778	0,015	1,766	0,002
2	7	1,690	2,575	0,885	1,679	-0,011	1,696	0,006	1,692	0,002
2	11	1,763	1,783	0,020	1,763	0,000	1,743	-0,020	1,766	0,003
3	4	1,764	1,792	0,028	2,026	0,262	1,778	0,014	1,761	-0,002
3	7	1,689	1,627	-0,062	1,702	0,013	1,696	0,007	1,680	-0,009
3	8	1,763	1,792	0,028	1,750	-0,014	1,743	-0,020	1,761	-0,002
4	5	1,777	1,761	-0,016	2,006	0,229	2,066	0,289	1,764	-0,013
4	8	1,765	1,744	-0,021	1,802	0,036	1,768	0,002	1,774	0,008
4	9	1,776	1,794	0,019	1,785	0,009	1,778	0,002	1,901	0,125
5	6	1,779	1,812	0,034	1,796	0,018	2,063	0,285	1,788	0,009
5	9	1,773	1,758	-0,015	1,777	0,004	1,789	0,016	1,884	0,111
5	10	1,774	1,800	0,027	1,781	0,007	1,788	0,014	1,775	0,002
6	10	1,777	1,780	0,004	1,764	-0,013	1,778	0,001	1,761	-0,015
6	11	1,767	1,820	0,052	1,767	0,000	1,768	0,000	1,750	-0,017
7	8	1,710	1,699	-0,012	1,712	0,002	1,709	-0,001	1,707	-0,003
7	11	1,710	1,664	-0,046	1,704	-0,006	1,709	-0,001	1,712	0,002
7	12	1,708	1,663	-0,045	1,710	0,001	1,712	0,004	1,715	0,007
8	9	1,776	1,794	0,018	1,826	0,050	1,773	-0,003	1,901	0,125
8	12	1,778	1,761	-0,017	1,779	0,001	1,786	0,008	1,764	-0,014
9	10	1,790	1,788	-0,002	1,784	-0,006	1,844	0,054	1,915	0,125
9	12	1,772	1,758	-0,015	1,762	-0,010	1,765	-0,007	1,885	0,112
10	11	1,777	1,781	0,004	1,777	0,000	1,773	-0,004	1,762	-0,015
10	12	1,775	1,801	0,026	1,776	0,001	1,765	-0,009	1,775	0,001
11	12	1,780	1,813	0,032	1,778	-0,002	1,786	0,006	1,788	0,007

24. táblázat Alkoholát-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	1,7-biszalkoholát- <i>m</i> - karborán dianion		1-alkoholát- <i>m</i> - karborán anion		9,10-biszalkoholát- <i>m</i> - karborán dianion	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,769	0,080	1,772	0,082	1,686	-0,004
1	3	1,689	1,770	0,080	1,772	0,082	1,686	-0,003
1	4	1,709	1,771	0,061	1,796	0,086	1,705	-0,004
1	5	1,707	1,780	0,073	1,777	0,070	1,729	0,022
1	6	1,709	1,771	0,062	1,796	0,087	1,705	-0,004
2	3	1,785	1,754	-0,030	1,768	-0,016	1,767	-0,017
2	6	1,763	1,761	-0,003	1,761	-0,002	1,770	0,007
2	7	1,690	1,770	0,080	1,693	0,003	1,686	-0,004
2	11	1,763	1,761	-0,003	1,770	0,007	1,770	0,007
3	4	1,764	1,761	-0,003	1,761	-0,003	1,770	0,007
3	7	1,689	1,770	0,080	1,693	0,004	1,686	-0,003
3	8	1,763	1,761	-0,003	1,770	0,007	1,770	0,007
4	5	1,777	1,770	-0,007	1,774	-0,003	1,779	0,002
4	8	1,765	1,768	0,003	1,759	-0,007	1,750	-0,016
4	9	1,776	1,770	-0,006	1,771	-0,005	1,888	0,112
5	6	1,779	1,770	-0,009	1,774	-0,005	1,779	0,000
5	9	1,773	1,772	0,000	1,776	0,003	1,884	0,111
5	10	1,774	1,772	-0,001	1,776	0,002	1,884	0,111
6	10	1,777	1,770	-0,007	1,771	-0,005	1,888	0,111
6	11	1,767	1,768	0,001	1,759	-0,009	1,750	-0,017
7	8	1,710	1,771	0,061	1,704	-0,007	1,705	-0,005
7	11	1,710	1,771	0,061	1,703	-0,007	1,705	-0,005
7	12	1,708	1,780	0,072	1,705	-0,003	1,729	0,021
8	9	1,776	1,770	-0,006	1,764	-0,012	1,888	0,112
8	12	1,778	1,770	-0,008	1,777	-0,001	1,779	0,001
9	10	1,790	1,775	-0,015	1,785	-0,005	2,023	0,233
9	12	1,772	1,773	0,000	1,774	0,002	1,884	0,112
10	11	1,777	1,770	-0,007	1,764	-0,012	1,888	0,111
10	12	1,775	1,773	-0,002	1,774	0,000	1,884	0,110
11	12	1,780	1,770	-0,010	1,776	-0,004	1,779	-0,002

25. táblázat Alkoholát-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-tiolát- <i>m</i> - karborán anion		4-tiolát- <i>m</i> - karborán anion		5-tiolát- <i>m</i> - karborán anion		9-tiolát- <i>m</i> - karborán anion	
			1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	2,576	0,886	1,667	-0,023	1,670	-0,020	1,692	0,002
1	3	1,689	1,627	-0,062	1,655	-0,035	1,670	-0,019	1,681	-0,009
1	4	1,709	1,698	-0,011	2,226	0,516	1,668	-0,042	1,707	-0,003
1	5	1,707	1,664	-0,044	1,670	-0,037	2,285	0,577	1,715	0,008
1	6	1,709	1,663	-0,045	1,688	-0,021	1,668	-0,041	1,713	0,004
2	3	1,785	2,797	1,013	1,809	0,024	1,780	-0,005	1,784	0,000
2	6	1,763	1,785	0,021	1,754	-0,009	1,778	0,015	1,766	0,002
2	7	1,690	2,575	0,885	1,679	-0,011	1,696	0,006	1,692	0,002
2	11	1,763	1,783	0,020	1,763	0,000	1,743	-0,020	1,766	0,003
3	4	1,764	1,792	0,028	2,026	0,262	1,778	0,014	1,761	-0,002
3	7	1,689	1,627	-0,062	1,702	0,013	1,696	0,007	1,680	-0,009
3	8	1,763	1,792	0,028	1,750	-0,014	1,743	-0,020	1,761	-0,002
4	5	1,777	1,761	-0,016	2,006	0,229	2,066	0,289	1,764	-0,013
4	8	1,765	1,744	-0,021	1,802	0,036	1,768	0,002	1,774	0,008
4	9	1,776	1,794	0,019	1,785	0,009	1,778	0,002	1,901	0,125
5	6	1,779	1,812	0,034	1,796	0,018	2,063	0,285	1,788	0,009
5	9	1,773	1,758	-0,015	1,777	0,004	1,789	0,016	1,884	0,111
5	10	1,774	1,800	0,027	1,781	0,007	1,788	0,014	1,775	0,002
6	10	1,777	1,780	0,004	1,764	-0,013	1,778	0,001	1,761	-0,015
6	11	1,767	1,820	0,052	1,767	0,000	1,768	0,000	1,750	-0,017
7	8	1,710	1,699	-0,012	1,712	0,002	1,709	-0,001	1,707	-0,003
7	11	1,710	1,664	-0,046	1,704	-0,006	1,709	-0,001	1,712	0,002
7	12	1,708	1,663	-0,045	1,710	0,001	1,712	0,004	1,715	0,007
8	9	1,776	1,794	0,018	1,826	0,050	1,773	-0,003	1,901	0,125
8	12	1,778	1,761	-0,017	1,779	0,001	1,786	0,008	1,764	-0,014
9	10	1,790	1,788	-0,002	1,784	-0,006	1,844	0,054	1,915	0,125
9	12	1,772	1,758	-0,015	1,762	-0,010	1,765	-0,007	1,885	0,112
10	11	1,777	1,781	0,004	1,777	0,000	1,773	-0,004	1,762	-0,015
10	12	1,775	1,801	0,026	1,776	0,001	1,765	-0,009	1,775	0,001
11	12	1,780	1,813	0,032	1,778	-0,002	1,786	0,006	1,788	0,007

26. táblázat Tiolát-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	1,7-bisztiolát- <i>m</i> - karborán dianion		1-tiolát- <i>m</i> -karborán anion		9,10-bisztiolát- <i>m</i> - karborán dianion	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,769	0,080	1,772	0,082	1,686	-0,004
1	3	1,689	1,770	0,080	1,772	0,082	1,686	-0,003
1	4	1,709	1,771	0,061	1,796	0,086	1,705	-0,004
1	5	1,707	1,780	0,073	1,777	0,070	1,729	0,022
1	6	1,709	1,771	0,062	1,796	0,087	1,705	-0,004
2	3	1,785	1,754	-0,030	1,768	-0,016	1,767	-0,017
2	6	1,763	1,761	-0,003	1,761	-0,002	1,770	0,007
2	7	1,690	1,770	0,080	1,693	0,003	1,686	-0,004
2	11	1,763	1,761	-0,003	1,770	0,007	1,770	0,007
3	4	1,764	1,761	-0,003	1,761	-0,003	1,770	0,007
3	7	1,689	1,770	0,080	1,693	0,004	1,686	-0,003
3	8	1,763	1,761	-0,003	1,770	0,007	1,770	0,007
4	5	1,777	1,770	-0,007	1,774	-0,003	1,779	0,002
4	8	1,765	1,768	0,003	1,759	-0,007	1,750	-0,016
4	9	1,776	1,770	-0,006	1,771	-0,005	1,888	0,112
5	6	1,779	1,770	-0,009	1,774	-0,005	1,779	0,000
5	9	1,773	1,772	0,000	1,776	0,003	1,884	0,111
5	10	1,774	1,772	-0,001	1,776	0,002	1,884	0,111
6	10	1,777	1,770	-0,007	1,771	-0,005	1,888	0,111
6	11	1,767	1,768	0,001	1,759	-0,009	1,750	-0,017
7	8	1,710	1,771	0,061	1,704	-0,007	1,705	-0,005
7	11	1,710	1,771	0,061	1,703	-0,007	1,705	-0,005
7	12	1,708	1,780	0,072	1,705	-0,003	1,729	0,021
8	9	1,776	1,770	-0,006	1,764	-0,012	1,888	0,112
8	12	1,778	1,770	-0,008	1,777	-0,001	1,779	0,001
9	10	1,790	1,775	-0,015	1,785	-0,005	2,023	0,233
9	12	1,772	1,773	0,000	1,774	0,002	1,884	0,112
10	11	1,777	1,770	-0,007	1,764	-0,012	1,888	0,111
10	12	1,775	1,773	-0,002	1,774	0,000	1,884	0,110
11	12	1,780	1,770	-0,010	1,776	-0,004	1,779	-0,002

27. táblázat Tiolát-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-klór- <i>m</i> -karborán		4-klór- <i>m</i> -karborán		5-klór- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,695	0,005	1,689	0,000	1,690	0,000
1	3	1,689	1,690	0,001	1,692	0,003	1,690	0,001
1	4	1,709	1,712	0,002	1,718	0,009	1,712	0,003
1	5	1,707	1,709	0,001	1,711	0,004	1,716	0,009
1	6	1,709	1,715	0,007	1,708	-0,001	1,712	0,003
2	3	1,785	1,798	0,013	1,783	-0,002	1,786	0,001
2	6	1,763	1,767	0,004	1,763	-0,001	1,761	-0,003
2	7	1,690	1,695	0,005	1,691	0,001	1,689	-0,001
2	11	1,763	1,767	0,004	1,762	-0,001	1,763	0,000
3	4	1,764	1,759	-0,004	1,773	0,009	1,761	-0,003
3	7	1,689	1,690	0,001	1,684	-0,005	1,689	0,000
3	8	1,763	1,759	-0,004	1,765	0,001	1,763	0,000
4	5	1,777	1,778	0,001	1,784	0,007	1,786	0,009
4	8	1,765	1,768	0,003	1,771	0,005	1,763	-0,003
4	9	1,776	1,776	0,000	1,779	0,004	1,777	0,001
5	6	1,779	1,777	-0,001	1,777	-0,002	1,786	0,008
5	9	1,773	1,774	0,001	1,774	0,001	1,775	0,002
5	10	1,774	1,773	-0,001	1,770	-0,003	1,775	0,002
6	10	1,777	1,774	-0,002	1,777	0,001	1,777	0,000
6	11	1,767	1,765	-0,002	1,767	0,000	1,763	-0,005
7	8	1,710	1,712	0,001	1,709	-0,001	1,708	-0,002
7	11	1,710	1,715	0,005	1,709	-0,001	1,708	-0,002
7	12	1,708	1,709	0,000	1,708	0,000	1,709	0,000
8	9	1,776	1,776	0,000	1,781	0,006	1,777	0,001
8	12	1,778	1,778	0,000	1,778	0,000	1,777	0,000
9	10	1,790	1,786	-0,003	1,788	-0,002	1,794	0,004
9	12	1,772	1,774	0,001	1,771	-0,001	1,771	-0,001
10	11	1,777	1,774	-0,003	1,776	0,000	1,776	0,000
10	12	1,775	1,773	-0,002	1,772	-0,003	1,771	-0,003
11	12	1,780	1,777	-0,003	1,779	-0,002	1,778	-0,003

28. táblázat Klór-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	9-klór- <i>m</i> -karborán		1,2-diklór- <i>m</i> - karborán		1-klór- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,690	0,000	1,699	0,009	1,699	0,010
1	3	1,689	1,689	0,000	1,699	0,010	1,699	0,010
1	4	1,709	1,705	-0,004	1,719	0,009	1,719	0,010
1	5	1,707	1,706	-0,001	1,714	0,007	1,715	0,008
1	6	1,709	1,711	0,002	1,719	0,010	1,719	0,011
2	3	1,785	1,784	-0,001	1,796	0,012	1,791	0,006
2	6	1,763	1,763	0,000	1,766	0,003	1,767	0,004
2	7	1,690	1,690	0,000	1,699	0,009	1,688	-0,002
2	11	1,763	1,763	0,000	1,766	0,003	1,762	-0,001
3	4	1,764	1,762	-0,002	1,766	0,003	1,768	0,004
3	7	1,689	1,689	0,000	1,699	0,010	1,688	-0,001
3	8	1,763	1,762	-0,002	1,766	0,003	1,762	-0,001
4	5	1,777	1,782	0,005	1,782	0,005	1,783	0,006
4	8	1,765	1,770	0,005	1,764	-0,001	1,765	0,000
4	9	1,776	1,784	0,008	1,772	-0,004	1,775	-0,001
5	6	1,779	1,778	-0,001	1,782	0,003	1,784	0,006
5	9	1,773	1,777	0,004	1,773	0,000	1,773	0,000
5	10	1,774	1,775	0,002	1,773	-0,001	1,773	-0,001
6	10	1,777	1,773	-0,004	1,772	-0,005	1,774	-0,003
6	11	1,767	1,764	-0,003	1,764	-0,003	1,765	-0,002
7	8	1,710	1,705	-0,005	1,719	0,008	1,709	-0,002
7	11	1,710	1,711	0,001	1,719	0,009	1,709	-0,001
7	12	1,708	1,706	-0,002	1,714	0,006	1,707	-0,001
8	9	1,776	1,784	0,008	1,772	-0,004	1,775	-0,001
8	12	1,778	1,782	0,004	1,782	0,004	1,777	-0,001
9	10	1,790	1,793	0,003	1,786	-0,003	1,789	-0,001
9	12	1,772	1,777	0,005	1,772	0,000	1,773	0,000
10	11	1,777	1,773	-0,004	1,772	-0,005	1,774	-0,003
10	12	1,775	1,775	0,001	1,772	-0,002	1,773	-0,002
11	12	1,780	1,778	-0,003	1,782	0,001	1,777	-0,003

29. táblázat Klór-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-metil- <i>m</i> -karborán		4-metil- <i>m</i> -karborán		5-metil- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,708	0,018	1,691	0,001	1,691	0,001
1	3	1,689	1,682	-0,007	1,685	-0,004	1,691	0,002
1	4	1,709	1,711	0,001	1,728	0,019	1,705	-0,004
1	5	1,707	1,708	0,000	1,702	-0,005	1,728	0,020
1	6	1,709	1,705	-0,004	1,710	0,002	1,704	-0,005
2	3	1,785	1,799	0,014	1,783	-0,001	1,784	-0,001
2	6	1,763	1,775	0,011	1,761	-0,002	1,761	-0,003
2	7	1,690	1,706	0,016	1,689	-0,001	1,688	-0,001
2	11	1,763	1,776	0,012	1,762	-0,001	1,762	-0,001
3	4	1,764	1,761	-0,002	1,778	0,014	1,761	-0,002
3	7	1,689	1,684	-0,005	1,687	-0,002	1,688	-0,001
3	8	1,763	1,762	-0,001	1,757	-0,006	1,762	-0,002
4	5	1,777	1,778	0,001	1,793	0,016	1,793	0,016
4	8	1,765	1,766	0,001	1,779	0,014	1,765	-0,001
4	9	1,776	1,776	0,000	1,789	0,014	1,770	-0,005
5	6	1,779	1,777	-0,001	1,776	-0,003	1,794	0,015
5	9	1,773	1,774	0,001	1,767	-0,006	1,786	0,013
5	10	1,774	1,771	-0,002	1,771	-0,002	1,785	0,011
6	10	1,777	1,776	0,000	1,777	0,000	1,771	-0,005
6	11	1,767	1,760	-0,007	1,767	-0,001	1,764	-0,003
7	8	1,710	1,711	0,001	1,709	-0,001	1,709	-0,001
7	11	1,710	1,705	-0,005	1,709	-0,001	1,709	-0,001
7	12	1,708	1,709	0,000	1,708	0,000	1,709	0,001
8	9	1,776	1,776	0,000	1,774	-0,002	1,776	0,000
8	12	1,778	1,778	0,000	1,779	0,001	1,777	-0,001
9	10	1,790	1,788	-0,002	1,788	-0,001	1,787	-0,003
9	12	1,772	1,774	0,001	1,771	-0,001	1,771	-0,001
10	11	1,777	1,774	-0,002	1,776	-0,001	1,777	0,000
10	12	1,775	1,772	-0,003	1,772	-0,003	1,772	-0,003
11	12	1,780	1,776	-0,004	1,779	-0,001	1,777	-0,003

30. táblázat Metil-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	9-metil- <i>m</i> -karborán		1,2-dimetil- <i>m</i> - karborán		1-metil- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,689	-0,001	1,699	0,009	1,701	0,011
1	3	1,689	1,688	-0,001	1,699	0,010	1,701	0,012
1	4	1,709	1,708	-0,002	1,719	0,010	1,720	0,011
1	5	1,707	1,707	-0,001	1,722	0,015	1,723	0,015
1	6	1,709	1,710	0,002	1,719	0,011	1,721	0,012
2	3	1,785	1,786	0,001	1,768	-0,017	1,777	-0,008
2	6	1,763	1,763	0,000	1,758	-0,005	1,758	-0,005
2	7	1,690	1,689	-0,001	1,699	0,009	1,687	-0,003
2	11	1,763	1,763	0,000	1,758	-0,005	1,763	0,000
3	4	1,764	1,762	-0,001	1,758	-0,006	1,758	-0,005
3	7	1,689	1,688	-0,001	1,699	0,010	1,688	-0,001
3	8	1,763	1,762	-0,001	1,758	-0,006	1,763	0,000
4	5	1,777	1,773	-0,004	1,771	-0,006	1,772	-0,005
4	8	1,765	1,764	-0,001	1,766	0,000	1,766	0,001
4	9	1,776	1,791	0,015	1,772	-0,004	1,776	0,000
5	6	1,779	1,778	-0,001	1,771	-0,008	1,772	-0,007
5	9	1,773	1,786	0,013	1,770	-0,003	1,770	-0,003
5	10	1,774	1,768	-0,006	1,770	-0,004	1,770	-0,004
6	10	1,777	1,773	-0,004	1,772	-0,005	1,777	0,000
6	11	1,767	1,763	-0,004	1,766	-0,002	1,766	-0,001
7	8	1,710	1,708	-0,002	1,719	0,009	1,709	-0,002
7	11	1,710	1,710	0,000	1,719	0,009	1,708	-0,002
7	12	1,708	1,707	-0,002	1,722	0,014	1,707	-0,001
8	9	1,776	1,791	0,015	1,772	-0,004	1,773	-0,003
8	12	1,778	1,773	-0,005	1,771	-0,007	1,778	0,000
9	10	1,790	1,802	0,012	1,786	-0,004	1,788	-0,001
9	12	1,772	1,786	0,014	1,770	-0,003	1,773	0,000
10	11	1,777	1,773	-0,004	1,772	-0,005	1,774	-0,003
10	12	1,775	1,768	-0,006	1,770	-0,005	1,772	-0,002
11	12	1,780	1,778	-0,002	1,771	-0,009	1,778	-0,002

31. táblázat Metil-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-metilén- <i>m</i> -karborán anion		4-metilén- <i>m</i> -karborán anion		5-metilén- <i>m</i> -karborán anion	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	2,320	0,630	1,641	-0,049	1,644	-0,045
1	3	1,689	1,625	-0,064	1,649	-0,040	1,644	-0,045
1	4	1,709	1,672	-0,037	2,342	0,632	1,666	-0,043
1	5	1,707	1,654	-0,053	1,668	-0,039	2,358	0,651
1	6	1,709	1,677	-0,032	1,663	-0,046	1,666	-0,043
2	3	1,785	2,050	0,265	1,867	0,082	1,775	-0,010
2	6	1,763	1,919	0,156	1,748	-0,015	1,828	0,065
2	7	1,690	1,708	0,018	1,684	-0,006	1,688	-0,002
2	11	1,763	1,721	-0,042	1,754	-0,009	1,745	-0,019
3	4	1,764	1,812	0,049	1,928	0,165	1,828	0,065
3	7	1,689	1,693	0,004	1,741	0,052	1,688	-0,001
3	8	1,763	1,777	0,014	1,777	0,014	1,745	-0,019
4	5	1,777	1,765	-0,012	1,985	0,208	1,985	0,208
4	8	1,765	1,755	-0,010	1,740	-0,026	1,800	0,035
4	9	1,776	1,769	-0,007	1,759	-0,017	1,791	0,016
5	6	1,779	1,844	0,065	1,846	0,068	1,985	0,207
5	9	1,773	1,775	0,002	1,785	0,013	1,753	-0,020
5	10	1,774	1,764	-0,010	1,811	0,037	1,753	-0,020
6	10	1,777	1,821	0,045	1,766	-0,010	1,791	0,015
6	11	1,767	1,771	0,004	1,757	-0,010	1,800	0,033
7	8	1,710	1,711	0,001	1,700	-0,010	1,718	0,008
7	11	1,710	1,749	0,039	1,719	0,009	1,718	0,008
7	12	1,708	1,714	0,006	1,714	0,006	1,702	-0,006
8	9	1,776	1,791	0,015	1,818	0,042	1,768	-0,008
8	12	1,778	1,781	0,003	1,778	0,000	1,787	0,009
9	10	1,790	1,791	0,002	1,778	-0,012	1,824	0,035
9	12	1,772	1,756	-0,017	1,765	-0,007	1,766	-0,006
10	11	1,777	1,757	-0,020	1,785	0,008	1,768	-0,009
10	12	1,775	1,775	0,000	1,773	-0,001	1,766	-0,008
11	12	1,780	1,778	-0,002	1,771	-0,010	1,787	0,006

32. táblázat Metilén-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	9-metilén- <i>m</i> -karborán anion		1,2-metilén- <i>m</i> - karborán dianion		1-metilén- <i>m</i> -karborán anion	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,706	0,016	1,659	-0,031	2,271	0,581
1	3	1,689	1,672	-0,018	2,443	0,754	2,268	0,579
1	4	1,709	1,698	-0,011	2,010	0,301	1,687	-0,022
1	5	1,707	1,729	0,022	1,642	-0,065	1,647	-0,061
1	6	1,709	1,738	0,030	1,688	-0,021	1,688	-0,020
2	3	1,785	1,783	-0,002	1,780	-0,005	1,681	-0,103
2	6	1,763	1,761	-0,002	1,757	-0,007	1,851	0,088
2	7	1,690	1,706	0,016	2,443	0,753	1,701	0,011
2	11	1,763	1,761	-0,002	1,834	0,071	1,731	-0,032
3	4	1,764	1,765	0,001	1,834	0,071	1,851	0,087
3	7	1,689	1,672	-0,017	1,659	-0,030	1,702	0,013
3	8	1,763	1,765	0,002	1,757	-0,007	1,731	-0,033
4	5	1,777	1,778	0,001	1,827	0,050	1,822	0,045
4	8	1,765	1,764	-0,002	1,730	-0,036	1,801	0,035
4	9	1,776	1,830	0,054	1,752	-0,024	1,832	0,056
5	6	1,779	1,809	0,031	1,816	0,037	1,822	0,043
5	9	1,773	1,843	0,070	1,783	0,010	1,745	-0,028
5	10	1,774	1,766	-0,008	1,830	0,056	1,745	-0,029
6	10	1,777	1,743	-0,033	1,746	-0,030	1,832	0,055
6	11	1,767	1,732	-0,035	1,730	-0,038	1,801	0,034
7	8	1,710	1,698	-0,012	1,688	-0,023	1,692	-0,018
7	11	1,710	1,738	0,028	2,011	0,301	1,692	-0,018
7	12	1,708	1,729	0,021	1,642	-0,066	1,684	-0,025
8	9	1,776	1,830	0,054	1,746	-0,030	1,774	-0,002
8	12	1,778	1,778	0,000	1,816	0,038	1,798	0,020
9	10	1,790	1,973	0,183	1,794	0,004	1,785	-0,004
9	12	1,772	1,843	0,070	1,830	0,057	1,757	-0,016
10	11	1,777	1,743	-0,033	1,752	-0,025	1,774	-0,003
10	12	1,775	1,766	-0,009	1,783	0,008	1,757	-0,018
11	12	1,780	1,809	0,029	1,827	0,046	1,798	0,017

33. táblázat Metilén-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-szilil- <i>m</i> -karborán		4-szilil- <i>m</i> -karborán		5-szilil- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,702	0,013	1,689	-0,001	1,689	-0,001
1	3	1,689	1,687	-0,002	1,686	-0,003	1,689	-0,001
1	4	1,709	1,708	-0,002	1,722	0,013	1,707	-0,003
1	5	1,707	1,707	0,000	1,704	-0,003	1,721	0,014
1	6	1,709	1,704	-0,005	1,709	0,000	1,707	-0,002
2	3	1,785	1,788	0,003	1,787	0,002	1,784	0,000
2	6	1,763	1,772	0,009	1,763	-0,001	1,765	0,002
2	7	1,690	1,702	0,013	1,688	-0,002	1,688	-0,001
2	11	1,763	1,772	0,009	1,763	0,000	1,763	0,000
3	4	1,764	1,767	0,003	1,767	0,003	1,765	0,002
3	7	1,689	1,687	-0,002	1,693	0,004	1,688	-0,001
3	8	1,763	1,767	0,003	1,763	-0,001	1,763	-0,001
4	5	1,777	1,778	0,001	1,785	0,009	1,784	0,007
4	8	1,765	1,767	0,001	1,774	0,008	1,768	0,003
4	9	1,776	1,777	0,002	1,785	0,010	1,777	0,001
5	6	1,779	1,780	0,001	1,780	0,001	1,784	0,005
5	9	1,773	1,773	0,000	1,773	0,000	1,781	0,008
5	10	1,774	1,772	-0,002	1,775	0,001	1,781	0,007
6	10	1,777	1,776	0,000	1,776	0,000	1,777	0,000
6	11	1,767	1,766	-0,001	1,767	-0,001	1,768	0,001
7	8	1,710	1,708	-0,002	1,708	-0,002	1,710	0,000
7	11	1,710	1,704	-0,006	1,710	0,000	1,710	0,000
7	12	1,708	1,707	-0,001	1,707	-0,001	1,706	-0,002
8	9	1,776	1,777	0,001	1,771	-0,005	1,775	-0,001
8	12	1,778	1,778	0,000	1,778	0,001	1,778	0,000
9	10	1,790	1,790	0,000	1,789	-0,001	1,785	-0,005
9	12	1,772	1,773	0,000	1,773	0,001	1,772	0,000
10	11	1,777	1,777	0,000	1,777	0,000	1,775	-0,001
10	12	1,775	1,772	-0,002	1,773	-0,001	1,773	-0,002
11	12	1,780	1,780	-0,001	1,777	-0,003	1,778	-0,002

34. táblázat Szilil-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	9-szilil- <i>m</i> -karborán		1,2-biszszilil- <i>m</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,689	-0,001	1,700	0,010
1	3	1,689	1,689	0,000	1,700	0,011
1	4	1,709	1,711	0,002	1,720	0,010
1	5	1,707	1,708	0,000	1,726	0,019
1	6	1,709	1,709	0,000	1,720	0,011
2	3	1,785	1,786	0,002	1,774	-0,011
2	6	1,763	1,763	0,000	1,760	-0,003
2	7	1,690	1,689	-0,001	1,700	0,010
2	11	1,763	1,763	0,000	1,760	-0,003
3	4	1,764	1,764	0,000	1,760	-0,003
3	7	1,689	1,689	0,000	1,700	0,011
3	8	1,763	1,764	0,001	1,760	-0,003
4	5	1,777	1,776	-0,001	1,774	-0,003
4	8	1,765	1,766	0,000	1,769	0,004
4	9	1,776	1,782	0,006	1,776	0,000
5	6	1,779	1,778	-0,001	1,774	-0,004
5	9	1,773	1,780	0,007	1,770	-0,003
5	10	1,774	1,771	-0,003	1,770	-0,004
6	10	1,777	1,777	0,001	1,776	-0,001
6	11	1,767	1,767	-0,001	1,769	0,002
7	8	1,710	1,712	0,001	1,720	0,009
7	11	1,710	1,709	-0,001	1,720	0,010
7	12	1,708	1,708	-0,001	1,726	0,018
8	9	1,776	1,782	0,006	1,776	0,000
8	12	1,778	1,776	-0,002	1,774	-0,004
9	10	1,790	1,795	0,005	1,787	-0,002
9	12	1,772	1,780	0,008	1,770	-0,003
10	11	1,777	1,777	0,000	1,776	-0,001
10	12	1,775	1,770	-0,004	1,770	-0,005
11	12	1,780	1,778	-0,003	1,774	-0,006

35. táblázat Szilil-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-nitro- <i>m</i> -karborán		4-nitro- <i>m</i> -karborán		5-nitro- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,671	-0,019	1,686	-0,003	1,686	-0,004
1	3	1,689	1,700	0,011	1,697	0,008	1,686	-0,003
1	4	1,709	1,708	-0,001	1,694	-0,015	1,719	0,010
1	5	1,707	1,707	-0,001	1,717	0,010	1,692	-0,015
1	6	1,709	1,717	0,009	1,707	-0,002	1,719	0,010
2	3	1,785	1,773	-0,012	1,783	-0,002	1,785	0,001
2	6	1,763	1,754	-0,009	1,763	0,000	1,763	0,000
2	7	1,690	1,671	-0,019	1,697	0,007	1,689	-0,001
2	11	1,763	1,754	-0,009	1,762	-0,001	1,768	0,005
3	4	1,764	1,760	-0,003	1,754	-0,010	1,763	-0,001
3	7	1,689	1,700	0,011	1,683	-0,006	1,689	0,000
3	8	1,763	1,760	-0,003	1,778	0,015	1,768	0,004
4	5	1,777	1,779	0,002	1,766	-0,011	1,767	-0,010
4	8	1,765	1,774	0,009	1,759	-0,006	1,763	-0,003
4	9	1,776	1,778	0,002	1,766	-0,009	1,788	0,012
5	6	1,779	1,779	0,000	1,779	0,000	1,767	-0,012
5	9	1,773	1,773	0,000	1,783	0,010	1,763	-0,010
5	10	1,774	1,776	0,002	1,770	-0,004	1,763	-0,011
6	10	1,777	1,773	-0,003	1,782	0,005	1,788	0,011
6	11	1,767	1,777	0,010	1,767	0,000	1,763	-0,005
7	8	1,710	1,708	-0,002	1,708	-0,002	1,710	-0,001
7	11	1,710	1,717	0,007	1,711	0,001	1,710	0,000
7	12	1,708	1,707	-0,002	1,710	0,001	1,707	-0,001
8	9	1,776	1,777	0,002	1,780	0,004	1,776	0,000
8	12	1,778	1,779	0,001	1,777	-0,001	1,779	0,002
9	10	1,790	1,789	0,000	1,789	-0,001	1,794	0,004
9	12	1,772	1,773	0,001	1,772	0,000	1,772	-0,001
10	11	1,777	1,773	-0,003	1,778	0,001	1,776	0,000
10	12	1,775	1,776	0,002	1,774	0,000	1,772	-0,003
11	12	1,780	1,779	-0,001	1,778	-0,003	1,779	-0,001

36. táblázat Nitro-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	9-nitro- <i>m</i> -karborán		1,2-bisznitro- <i>m</i> - karborán		1-nitro- <i>m</i> -karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,689	-0,001	1,698	0,008	1,618	-0,072
1	3	1,689	1,692	0,003	1,693	0,003	1,721	0,032
1	4	1,709	1,708	-0,001	1,716	0,007	1,700	-0,010
1	5	1,707	1,704	-0,003	1,714	0,006	1,700	-0,007
1	6	1,709	1,710	0,001	1,713	0,004	1,721	0,012
2	3	1,785	1,786	0,001	1,814	0,029	1,727	-0,058
2	6	1,763	1,763	-0,001	1,767	0,004	1,727	-0,036
2	7	1,690	1,688	-0,001	1,698	0,008	1,692	0,002
2	11	1,763	1,764	0,001	1,767	0,004	1,692	-0,071
3	4	1,764	1,761	-0,002	1,774	0,010	1,789	0,025
3	7	1,689	1,692	0,002	1,693	0,004	1,775	0,086
3	8	1,763	1,760	-0,004	1,774	0,010	1,756	-0,008
4	5	1,777	1,787	0,010	1,784	0,007	1,786	0,009
4	8	1,765	1,777	0,012	1,761	-0,005	1,777	0,012
4	9	1,776	1,767	-0,009	1,775	-0,001	1,772	-0,004
5	6	1,779	1,775	-0,004	1,792	0,013	1,789	0,010
5	9	1,773	1,769	-0,004	1,769	-0,003	1,772	-0,001
5	10	1,774	1,781	0,007	1,770	-0,004	1,777	0,003
6	10	1,777	1,777	0,001	1,777	0,000	1,756	-0,021
6	11	1,767	1,770	0,002	1,767	0,000	1,775	0,008
7	8	1,710	1,706	-0,004	1,716	0,006	1,780	0,070
7	11	1,710	1,712	0,002	1,713	0,003	1,780	0,070
7	12	1,708	1,703	-0,005	1,714	0,006	1,774	0,066
8	9	1,776	1,769	-0,007	1,775	-0,001	1,788	0,012
8	12	1,778	1,785	0,007	1,784	0,006	1,789	0,011
9	10	1,790	1,775	-0,015	1,789	-0,001	1,788	-0,002
9	12	1,772	1,767	-0,005	1,769	-0,003	1,777	0,005
10	11	1,777	1,777	0,000	1,777	0,000	1,780	0,004
10	12	1,775	1,783	0,009	1,770	-0,005	1,789	0,015
11	12	1,780	1,775	-0,006	1,792	0,011	1,774	-0,007

37. táblázat Nitro-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	2-trifluorometil- <i>m</i> - karborán		4-trifluorometil- <i>m</i> - karborán		5-trifluorometil- <i>m</i> - karborán	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,687	-0,002	1,701	0,011	1,701	0,011
1	3	1,689	1,711	0,022	1,710	0,021	1,701	0,012
1	4	1,709	1,723	0,013	1,707	-0,002	1,731	0,022
1	5	1,707	1,722	0,014	1,729	0,022	1,707	-0,001
1	6	1,709	1,729	0,020	1,721	0,013	1,731	0,022
2	3	1,785	1,792	0,008	1,805	0,021	1,811	0,027
2	6	1,763	1,767	0,003	1,781	0,018	1,777	0,014
2	7	1,690	1,687	-0,003	1,708	0,018	1,705	0,015
2	11	1,763	1,767	0,004	1,780	0,017	1,781	0,018
3	4	1,764	1,777	0,013	1,765	0,002	1,777	0,014
3	7	1,689	1,711	0,022	1,700	0,011	1,705	0,016
3	8	1,763	1,777	0,013	1,785	0,022	1,781	0,017
4	5	1,777	1,796	0,019	1,780	0,003	1,779	0,003
4	8	1,765	1,785	0,020	1,771	0,006	1,778	0,013
4	9	1,776	1,792	0,016	1,778	0,002	1,794	0,019
5	6	1,779	1,793	0,014	1,792	0,014	1,779	0,001
5	9	1,773	1,788	0,015	1,791	0,018	1,775	0,002
5	10	1,774	1,789	0,015	1,784	0,010	1,775	0,001
6	10	1,777	1,788	0,012	1,793	0,016	1,794	0,018
6	11	1,767	1,786	0,018	1,782	0,015	1,778	0,011
7	8	1,710	1,723	0,012	1,722	0,012	1,726	0,016
7	11	1,710	1,729	0,019	1,726	0,016	1,726	0,016
7	12	1,708	1,722	0,014	1,726	0,018	1,723	0,015
8	9	1,776	1,792	0,016	1,790	0,014	1,789	0,013
8	12	1,778	1,796	0,018	1,791	0,013	1,795	0,017
9	10	1,790	1,801	0,012	1,800	0,010	1,801	0,011
9	12	1,772	1,788	0,015	1,786	0,013	1,785	0,012
10	11	1,777	1,788	0,011	1,791	0,014	1,789	0,012
10	12	1,775	1,789	0,015	1,788	0,014	1,785	0,011
11	12	1,780	1,793	0,013	1,793	0,013	1,795	0,014

38. táblázat Trifluormetil-származékok; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>m</i> - karborán	9-trifluorometil- <i>m</i> - karborán		1,2- bisztrifluorometil- <i>m</i> - karborán		1-trifluorometil- <i>m</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,690	1,705	0,016	1,700	0,010	1,705	0,015
1	3	1,689	1,707	0,017	1,700	0,011	1,705	0,016
1	4	1,709	1,722	0,012	1,719	0,009	1,718	0,009
1	5	1,707	1,719	0,012	1,727	0,020	1,729	0,022
1	6	1,709	1,728	0,019	1,719	0,010	1,718	0,010
2	3	1,785	1,810	0,026	1,798	0,013	1,794	0,009
2	6	1,763	1,779	0,016	1,765	0,002	1,770	0,006
2	7	1,690	1,705	0,016	1,700	0,010	1,685	-0,005
2	11	1,763	1,779	0,016	1,765	0,002	1,759	-0,004
3	4	1,764	1,776	0,013	1,765	0,002	1,770	0,006
3	7	1,689	1,707	0,018	1,700	0,011	1,684	-0,005
3	8	1,763	1,776	0,013	1,765	0,002	1,759	-0,005
4	5	1,777	1,799	0,022	1,783	0,006	1,784	0,007
4	8	1,765	1,785	0,020	1,769	0,003	1,767	0,002
4	9	1,776	1,779	0,003	1,773	-0,002	1,777	0,001
5	6	1,779	1,789	0,011	1,783	0,004	1,784	0,005
5	9	1,773	1,778	0,005	1,766	-0,007	1,767	-0,006
5	10	1,774	1,790	0,016	1,766	-0,007	1,767	-0,007
6	10	1,777	1,789	0,013	1,773	-0,003	1,776	0,000
6	11	1,767	1,782	0,015	1,769	0,001	1,767	0,000
7	8	1,710	1,722	0,011	1,719	0,008	1,710	0,000
7	11	1,710	1,728	0,018	1,719	0,009	1,710	0,000
7	12	1,708	1,719	0,011	1,727	0,019	1,707	-0,002
8	9	1,776	1,779	0,003	1,773	-0,003	1,773	-0,003
8	12	1,778	1,799	0,021	1,783	0,005	1,779	0,001
9	10	1,790	1,784	-0,006	1,788	-0,001	1,789	-0,001
9	12	1,772	1,778	0,005	1,766	-0,006	1,772	-0,001
10	11	1,777	1,789	0,013	1,773	-0,003	1,773	-0,004
10	12	1,775	1,790	0,016	1,766	-0,008	1,771	-0,003
11	12	1,780	1,790	0,009	1,783	0,002	1,779	-0,002

39. táblázat Trifluormetil-származékok; *m*-karborán

Para-karboránok

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>p</i> - karborán	2-amino- <i>p</i> - karborán		2-hidroxi- <i>p</i> - karborán		2-tiol- <i>p</i> -karborán		2-alkoholát- <i>p</i> - karborán anion	
		1 (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)	1 (Å)	Δl (Å)
1	2	1,704	1,763	0,059	1,743	0,039	1,729	0,025	1,665	-0,038
1	3	1,703	1,693	-0,010	1,701	-0,002	1,701	-0,003	1,688	-0,016
1	4	1,703	1,695	-0,008	1,698	-0,005	1,699	-0,005	1,688	-0,016
1	5	1,703	1,695	-0,009	1,703	0,000	1,700	-0,003	1,665	-0,038
1	6	1,703	1,694	-0,010	1,696	-0,007	1,699	-0,005	1,785	0,082
2	3	1,782	1,798	0,016	1,797	0,015	1,785	0,004	1,787	0,006
2	6	1,781	1,798	0,016	1,802	0,021	1,787	0,006	1,793	0,011
2	7	1,762	1,781	0,018	1,780	0,017	1,773	0,010	1,766	0,003
2	11	1,763	1,781	0,018	1,777	0,014	1,769	0,006	1,761	-0,002
3	4	1,782	1,784	0,002	1,780	-0,002	1,784	0,003	1,776	-0,005
3	7	1,763	1,764	0,001	1,762	-0,001	1,765	0,002	1,745	-0,018
3	8	1,762	1,763	0,001	1,760	-0,002	1,764	0,002	1,767	0,004
4	5	1,781	1,778	-0,004	1,781	0,000	1,779	-0,002	1,792	0,011
4	8	1,763	1,764	0,001	1,762	-0,001	1,764	0,001	1,767	0,004
4	9	1,763	1,763	0,000	1,764	0,001	1,763	-0,001	1,745	-0,018
5	6	1,781	1,784	0,003	1,778	-0,003	1,783	0,002	1,761	-0,020
5	9	1,763	1,763	0,000	1,762	-0,001	1,762	0,000	1,765	0,003
5	10	1,763	1,765	0,002	1,763	0,000	1,765	0,002	1,783	0,020
6	10	1,762	1,763	0,001	1,757	-0,004	1,763	0,001	1,826	0,064
6	11	1,763	1,764	0,001	1,762	-0,001	1,766	0,003	1,697	-0,067
7	8	1,781	1,776	-0,005	1,778	-0,003	1,778	-0,004	1,779	-0,003
7	11	1,781	1,775	-0,006	1,784	0,003	1,778	-0,003	1,715	-0,066
7	12	1,703	1,703	-0,001	1,701	-0,002	1,703	-0,001	1,779	0,076
8	9	1,782	1,784	0,002	1,781	-0,001	1,782	0,000	1,705	-0,077
8	12	1,704	1,701	-0,003	1,702	-0,001	1,702	-0,002	1,783	0,079
9	10	1,782	1,784	0,002	1,781	0,000	1,784	0,002	1,715	-0,066
9	12	1,704	1,700	-0,004	1,704	0,000	1,701	-0,003	1,697	-0,007
10	11	1,781	1,777	-0,005	1,781	-0,001	1,780	-0,002	1,787	0,006
10	12	1,703	1,701	-0,002	1,704	0,001	1,701	-0,002	1,698	-0,006
11	12	1,703	1,703	0,000	1,700	-0,003	1,704	0,001	1,708	0,005

40. táblázat *Para*- karborán származékok

Atomok amelyek közt a kötési hossz vált számított		<i>p</i> - karborán	2-tiolát- <i>p</i> - karborán anion		2-metil- <i>p</i> - karborán		2-klór- <i>p</i> -karborán		2-szilil- <i>p</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,704	1,838	0,134	1,723	0,020	1,709	0,005	1,718	0,014
1	3	1,703	1,684	-0,020	1,697	-0,006	1,706	0,003	1,699	-0,004
1	4	1,703	1,704	0,001	1,704	0,001	1,704	0,001	1,703	-0,001
1	5	1,703	1,704	0,001	1,704	0,001	1,704	0,001	1,703	-0,001
1	6	1,703	1,684	-0,020	1,697	-0,006	1,706	0,002	1,699	-0,004
2	3	1,782	1,860	0,079	1,795	0,014	1,789	0,007	1,787	0,005
2	6	1,781	1,862	0,080	1,795	0,014	1,788	0,007	1,787	0,005
2	7	1,762	1,810	0,047	1,775	0,013	1,768	0,005	1,770	0,007
2	11	1,763	1,810	0,047	1,775	0,012	1,768	0,005	1,770	0,007
3	4	1,782	1,784	0,002	1,779	-0,003	1,777	-0,004	1,784	0,002
3	7	1,763	1,756	-0,007	1,758	-0,005	1,763	0,000	1,762	-0,001
3	8	1,762	1,763	0,001	1,762	0,000	1,759	-0,003	1,766	0,003
4	5	1,781	1,777	-0,004	1,782	0,000	1,783	0,001	1,781	-0,001
4	8	1,763	1,752	-0,012	1,761	-0,002	1,763	0,000	1,762	-0,001
4	9	1,763	1,762	-0,002	1,763	0,000	1,764	0,000	1,763	-0,001
5	6	1,781	1,783	0,002	1,779	-0,002	1,778	-0,003	1,784	0,003
5	9	1,763	1,762	-0,001	1,763	0,000	1,763	0,000	1,763	0,000
5	10	1,763	1,752	-0,010	1,761	-0,002	1,762	0,000	1,762	0,000
6	10	1,762	1,763	0,002	1,762	0,000	1,759	-0,003	1,766	0,004
6	11	1,763	1,755	-0,008	1,758	-0,005	1,763	0,000	1,762	-0,001
7	8	1,781	1,788	0,006	1,781	0,000	1,781	0,000	1,780	-0,001
7	11	1,781	1,776	-0,004	1,777	-0,004	1,787	0,006	1,777	-0,004
7	12	1,703	1,709	0,005	1,702	-0,001	1,701	-0,002	1,704	0,001
8	9	1,782	1,780	-0,002	1,781	-0,001	1,780	-0,002	1,782	0,000
8	12	1,704	1,699	-0,005	1,702	-0,002	1,703	-0,001	1,702	-0,001
9	10	1,782	1,780	-0,002	1,781	-0,001	1,780	-0,001	1,782	0,001
9	12	1,704	1,707	0,003	1,704	0,001	1,705	0,001	1,702	-0,001
10	11	1,781	1,787	0,006	1,781	0,000	1,781	0,000	1,780	-0,001
10	12	1,703	1,698	-0,006	1,702	-0,001	1,703	0,000	1,702	-0,001
11	12	1,703	1,708	0,005	1,702	-0,001	1,701	-0,002	1,704	0,001

41. táblázat *Para*- karborán származékok

Atomok amelyek közt a kötéshossz volt számítva		<i>p</i> -karborán	2-metilén- <i>p</i> -karborán anion		2-nitro- <i>p</i> -karborán		2-trifluormetil- <i>p</i> - karborán	
		l (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)	l (Å)	Δl (Å)
1	2	1,704	2,343	0,639	1,686	-0,018	1,697	-0,007
1	3	1,703	1,660	-0,044	1,712	0,008	1,707	0,004
1	4	1,703	1,659	-0,044	1,701	-0,002	1,702	-0,002
1	5	1,703	1,659	-0,044	1,701	-0,002	1,702	-0,002
1	6	1,703	1,660	-0,044	1,712	0,008	1,707	0,004
2	3	1,782	1,991	0,209	1,769	-0,012	1,777	-0,004
2	6	1,781	1,991	0,210	1,769	-0,012	1,777	-0,004
2	7	1,762	1,744	-0,018	1,755	-0,007	1,761	-0,001
2	11	1,763	1,744	-0,019	1,755	-0,008	1,761	-0,002
3	4	1,782	1,850	0,069	1,781	-0,001	1,780	-0,002
3	7	1,763	1,776	0,013	1,773	0,010	1,766	0,003
3	8	1,762	1,795	0,033	1,760	-0,002	1,761	-0,001
4	5	1,781	1,763	-0,018	1,782	0,001	1,783	0,001
4	8	1,763	1,755	-0,008	1,768	0,005	1,764	0,001
4	9	1,763	1,757	-0,007	1,763	0,000	1,763	0,000
5	6	1,781	1,850	0,069	1,781	0,000	1,780	-0,001
5	9	1,763	1,757	-0,006	1,763	0,001	1,763	0,001
5	10	1,763	1,755	-0,008	1,768	0,005	1,764	0,002
6	10	1,762	1,795	0,033	1,760	-0,002	1,761	-0,001
6	11	1,763	1,776	0,012	1,773	0,009	1,766	0,003
7	8	1,781	1,771	-0,011	1,780	-0,002	1,780	-0,002
7	11	1,781	1,822	0,041	1,789	0,008	1,786	0,005
7	12	1,703	1,703	0,000	1,701	-0,002	1,701	-0,002
8	9	1,782	1,790	0,008	1,782	0,000	1,781	-0,001
8	12	1,704	1,709	0,005	1,705	0,001	1,704	0,000
9	10	1,782	1,790	0,009	1,782	0,001	1,781	0,000
9	12	1,704	1,695	-0,009	1,704	0,000	1,704	0,000
10	11	1,781	1,771	-0,010	1,780	-0,001	1,780	-0,001
10	12	1,703	1,709	0,006	1,705	0,001	1,704	0,001
11	12	1,703	1,703	0,000	1,701	-0,002	1,701	-0,002

42. táblázat *Para*- karborán származékok

6.3 Kísérleti és számított kötéhossz eredmények összehasonlítása

Az alábbi táblázat tartalmazza az egykristály röntgendiffrakciós módszerrel megállapított, illetve a számított kötéhossz értékeket (B3LYP/aug-cc-pVTZ).

Jelmagyarázat

l_{sz} : számított kötéhossz

l_k : egykristály röntgendiffrakciós módszerrel megállapított kötéhossz

Δl : számított és kísérleti kötéhosszok különbségének abszolút értéke

Atomok, amelyek közt a kötéshossz lett megállapítva		9,12-bisz(tiol)- <i>o</i> -karborán			9,10-bisz(tiol)- <i>m</i> - karborán			9,10-bisz(amino)- <i>m</i> - karborán		
		l_{sz} (Å)	l_k (Å)	Δl (Å)	l_{sz} (Å)	l_k (Å)	Δl (Å)	l_{sz} (Å)	l_k (Å)	Δl (Å)
1	2	1,625	1,624	0,001	1,686	1,699	0,013	1,684	1,691	0,007
1	3	1,711	1,714	0,002	1,693	1,697	0,004	1,691	1,687	0,004
1	4	1,693	1,680	0,013	1,717	1,711	0,006	1,712	1,712	0,000
1	5	1,696	1,692	0,003	1,704	1,704	0,001	1,704	1,697	0,007
1	6	1,712	1,712	0,000	1,700	1,712	0,012	1,701	1,711	0,010
2	3	1,720	1,704	0,016	1,785	1,793	0,008	1,781	1,771	0,010
2	6	1,719	1,714	0,005	1,761	1,767	0,005	1,768	1,757	0,011
2	7	1,691	1,690	0,001	1,686	1,697	0,011	1,687	1,691	0,004
2	11	1,688	1,700	0,012	1,765	1,769	0,004	1,758	1,765	0,007
3	4	1,767	1,773	0,006	1,762	1,769	0,007	1,755	1,765	0,010
3	7	1,780	1,768	0,012	1,693	1,699	0,006	1,698	1,691	0,007
3	8	1,756	1,761	0,005	1,759	1,767	0,008	1,764	1,767	0,003
4	5	1,780	1,778	0,001	1,778	1,781	0,003	1,772	1,781	0,009
4	8	1,774	1,773	0,000	1,768	1,775	0,008	1,762	1,758	0,004
4	9	1,787	1,776	0,010	1,775	1,770	0,005	1,795	1,790	0,006
5	6	1,767	1,771	0,004	1,779	1,779	0,000	1,782	1,773	0,009
5	9	1,786	1,771	0,015	1,790	1,790	0,000	1,791	1,788	0,003
5	10	1,774	1,784	0,010	1,775	1,789	0,014	1,792	1,784	0,008
6	10	1,756	1,764	0,007	1,789	1,778	0,011	1,795	1,794	0,002
6	11	1,779	1,779	0,000	1,766	1,775	0,009	1,758	1,762	0,004
7	8	1,776	1,775	0,000	1,714	1,712	0,002	1,724	1,699	0,025
7	11	1,785	1,777	0,008	1,702	1,711	0,009	1,695	1,713	0,018
7	12	1,775	1,779	0,003	1,704	1,704	0,000	1,696	1,705	0,009
8	9	1,790	1,785	0,005	1,781	1,778	0,003	1,775	1,800	0,025
8	12	1,807	1,792	0,015	1,774	1,779	0,004	1,781	1,778	0,003
9	10	1,795	1,787	0,007	1,812	1,815	0,003	1,842	1,845	0,003
9	12	1,799	1,791	0,008	1,785	1,789	0,004	1,806	1,784	0,022
10	11	1,774	1,782	0,008	1,785	1,770	0,014	1,807	1,794	0,013
10	12	1,804	1,786	0,018	1,783	1,790	0,007	1,779	1,801	0,023
11	12	1,778	1,783	0,005	1,782	1,781	0,000	1,778	1,785	0,007

43. táblázat Kísérleti és számított eredmények összehasonlítása

6.4 Scan számítások eredményei

A táblázatok kiolvasása következő módon történik: a kívánt kötés kiválasztható a zöld mezőből, a relatív kötéshossz változtatás a sárga mezőből. A kettő kiválasztott sor és oszlop metszéspontja adja az energaváltozást a fehér mezőben. Példa (**44. táblázat**): B3-B4 kötés nyújtása 0,2 Å-mel 4,353 kcal/mol energianövekedéssel jár.

Atomok amelyek közt a kötéshossz rögzítve volt	Energia minimumban kötéshossz [Å]	Relatív kötéshosszváltozás: $l(\text{rögzített kötés}) - l(\text{energiaminimum})$ [Å]											
		-0,15	-0,1	-0,05	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,4	0,5
C1-C2	1,622	4,090	1,622	0,355	0,000	0,286	1,034	2,102	3,389	4,820	6,384	9,470	12,566
C1-B3	1,716	3,538	1,409	0,310	0,000	0,241	1,023	2,291	3,681	5,378	7,287	11,576	16,293
C1-B4	1,694	3,784	1,483	0,400	0,000	0,308	1,134	2,325	3,876	5,618	7,547	11,683	16,220
B3-B4	1,775	3,792	1,570	0,363	0,000	0,334	1,222	2,593	4,353	6,487	8,870	14,228	20,258
B3-B8	1,76	3,861	1,596	0,371	0,000	0,278	1,216	2,521	4,267	6,315	8,582	13,596	19,145
B4-B5	1,78	3,752	1,564	0,365	0,000	0,319	1,232	2,604	4,386	6,492	8,862	14,314	20,472
B4-B8	1,776	3,775	1,585	0,340	0,000	0,280	1,177	2,451	4,143	6,161	8,403	13,449	19,077
B4-B9	1,773	3,745	1,555	0,341	0,000	0,283	1,132	2,463	4,147	6,055	8,247	13,262	18,772
B8-B9	1,788	3,583	1,496	0,324	0,000	0,252	1,108	2,398	4,011	5,953	8,157	13,179	18,743
B9-B12	1,779	3,722	1,522	0,338	0,000	0,296	1,200	2,545	4,267	6,294	8,566	13,671	19,314
		Relatív energiaváltozás: $E(\text{rögzített kötés}) - E(\text{energiaminimum})$ [kcal/mol]											

44. táblázat Scan számítások eredményei; o-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz rögzítve volt	Energia minimumban kötéshossz [Å]	Relatív kötéshosszváltozás: $l(\text{rögzített kötés}) - l(\text{energiaminimum})$ [Å]											
		-0,15	-0,1	-0,05	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,4	0,5
C1-B2	1,690	4,083	1,681	0,410	0,000	0,265	1,149	2,422	4,046	5,908	7,949	12,376	17,014
C1-B4	1,710	3,718	1,570	0,313	0,000	0,316	1,153	2,290	3,813	5,569	7,441	11,664	16,250
C1-B5	1,707	3,687	1,526	0,297	0,000	0,271	1,041	2,273	3,780	5,475	7,307	11,399	15,856
B2-B3	1,785	3,791	1,527	0,326	0,000	0,271	1,205	2,645	4,516	6,754	9,308	15,228	22,018
B2-B6	1,763	3,985	1,698	0,418	0,000	0,363	1,309	2,803	4,656	6,869	9,341	15,006	21,362
B4-B5	1,778	3,809	1,589	0,354	0,000	0,353	1,285	2,691	4,464	6,574	8,984	14,421	20,604
B4-B8	1,765	3,890	1,548	0,443	0,000	0,320	1,268	2,679	4,481	6,508	8,807	14,009	19,773
B4-B9	1,776	3,761	1,524	0,369	0,000	0,353	1,189	2,499	4,210	6,224	8,476	13,559	19,228
B5-B9	1,773	3,752	1,659	0,383	0,000	0,312	1,159	2,510	4,268	6,310	8,584	13,694	19,370
B9-B10	1,789	3,608	1,443	0,350	0,000	0,264	1,142	2,484	4,162	6,157	8,397	13,463	19,159
		Relatív energiaváltozás: $E(\text{rögzített kötés}) - E(\text{energiaminimum})$ [kcal/mol]											

45. táblázat Scan számítások eredményei; *m*-karborán

Atomok amelyek közt a kötéshossz rögzítve volt	Energia minimumban kötéshossz [Å]	Relatív kötéshosszváltozás: $l(\text{rögzített kötés}) - l(\text{energiaminimum})$ [Å]											
		-0,15	-0,1	-0,05	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,4	0,5
C1-B2	1,704	3,686	1,556	0,216	0,000	0,290	1,061	2,276	3,808	5,578	7,533	11,807	16,503
B2-B3	1,782	3,738	1,524	0,262	0,000	0,328	1,226	2,594	4,372	6,485	8,878	14,359	20,582
B2-B7	1,762	3,867	1,556	0,286	0,000	0,153	1,112	2,661	4,348	6,292	8,575	13,850	19,545
		Relatív energiaváltozás: $E(\text{rögzített kötés}) - E(\text{energiaminimum})$ [kcal/mol]											

46. táblázat Scan számítások eredményei; *p*-karborán

A kritikus pontok vizsgálatát az alábbi táblázat foglalja össze. A sárga mezőben azok az atomok vannak, amelyek között az analízis történt. A zöld mező a kötés hosszára utal, opt. esetén a kötéshossz a megkötések nélküli kötéshosszt jelenti, alatta sorban a növekvő kötéshossz különbségek vannak megadva az eredeti kötéshosszhoz képest Å-ben. $\rho(r)$ az elektronsűrűség a kritikus pontban (atomi egységben), fehér mezőben a kritikus pont típusa látható: BCP-kötés kritikus pont; RCP- gyűrű kritikus pont.

Atomok amelyek közötti kötés vizsgálva volt	$\rho(r)$	kritikus pont típusa	Atomok amelyek közötti kötés vizsgálva volt	$\rho(r)$	kritikus pont típusa	Atomok amelyek közötti kötés vizsgálva volt	$\rho(r)$	kritikus pont típusa	Atomok amelyek közötti kötés vizsgálva volt	$\rho(r)$	kritikus pont típusa
geometria			geometria			geometria			geometria		
C1-C2			B9-B12			C1-B4			B4-B5		
opt.	0,187	BCP	opt.	0,120	BCP	opt.	0,124	BCP	opt.	0,117	BCP
0,1	0,153	BCP	0,1	0,103	BCP	0,1	0,106	BCP	0,1	0,099	RCP
0,2	0,128	BCP	0,2	0,089	BCP	0,2	0,092	RCP	0,2	0,086	RCP
0,3	0,108	BCP	0,3	0,078	RCP	0,3	0,080	RCP	0,3	0,077	RCP
0,4	0,093	RCP	0,4	0,069	RCP	0,4	0,070	RCP	0,4	0,067	RCP
0,5	0,082	RCP	0,5	0,062	RCP	0,5	0,062	RCP	0,5	0,060	RCP

47. táblázat Kritikus pontok vizsgálatának eredményei

7. Hivatkozások

- [1] Tamás Veszprémi, *Általános Kémia*, Akadémiai Kiadó, Budapest, **2015**.
- [2] Linus Pauling, *J. Am. Chem. Soc.* **1931**, 53, 1367–1400.
- [3] Laura Howes, “The fight over the longest carbon-carbon bond is redefining what a bond is,” can be found under <https://cen.acs.org/physical-chemistry/chemical-bonding/fight-over-longest-carbon-carbon/97/i10>, **2019**.
- [4] B. W. Hutton, F. MacIntosh, D. Ellis, F. Herisse, S. A. Macgregor, D. McKay, V. Petrie-Armstrong, G. M. Rosair, D. S. Perekalin, H. Tricas, A. J. Welch, *Chemical Communications* **2008**, 5345–5347.
- [5] E. Wiberg, H. Nöth, • Walter, *Translation from the German By*, Pergamon Press, **1977**.
- [6] T. R. Schmidt, M. U. Shik Jhon, H. Eyringt, *National Academy of Sciences* **1968**, 387–393.
- [7] S. H. Bauer, V. 59, *J. Am. Chem. Soc.* **1937**, 59, 1096–1103.
- [8] H. C. Longuet-Higgins, R. P. Bell, *J. Chem. Soc.* **1943**, 250–255.
- [9] W. C. Price, *J Chem Phys* **1948**, 16, 894–902.
- [10] H. Wu, Y. H. Wang, Z. H. Yang, F. Li, *Chinese Physics Letters* **2018**, 35.
- [11] J. H. Bian, B. Jin, X. F. Zhao, R. Sun, C. Yuan, C. Y. Zhou, Y. B. Wu, *RSC Adv* **2021**, 11, 15841–15846.
- [12] K. Hofmann, M. H. Prosenc, B. R. Albert, *Chemical Communications* **2007**, 3097–3099.
- [13] R. N. Grimes, in *Carboranes*, Elsevier, **2016**, pp. 7–18.
- [14] B. P. Dash, R. Satapathy, B. R. Swain, C. S. Mahanta, B. B. Jena, N. S. Hosmane, *J Organomet Chem* **2017**, 849–850, 170–194.
- [15] K. Wade, *J. Chem. Soc. D* **1971**, 792–793.
- [16] Robert E. Williams, P. Donald, Katherine B Loker, *Chem. Rev* **1992**, 92, 177–207.
- [17] R. N. Grimes, in *Carboranes*, Elsevier, **2016**, pp. 7–18.
- [18] H. C. Longuet- Higgins, M. de v Roberts, *Proc R Soc Lond A Math Phys Sci* **1955**, 230, 110–119.
- [19] J. W. Ager, S. L. Clark, D. J. Mangold, H. L. Goldstein, M. Hillman, R. J. Polak, J. W. Szymanski, *Inorg. Chem.* **1963**, 2, 1089–1092.
- [20] U. Kusari, Y. Li, M. G. Bradley, L. G. Sneddon, *J Am Chem Soc* **2004**, 126, 8662–8663.
- [21] V. I. Bregadze, *Chem. Rev* **1992**, 92, 209–223.

- [22] B. M. Gimarc, J. J. Ott, *J. Am. Chem. Soc* **1987**, *109*, 1388–1392.
- [23] F. H. Allen, O. Kennard, D. G. Watson, L. Brammer, A. G. Orpen, R. Taylor, *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2* **1987**, S1–S19.
- [24] Y. Wu, J. Zhang, Z. Xie, *Chinese Chemical Letters* **2019**, *30*, 1530–1532.
- [25] P. T. Brain, M. Buhl, J. Cowie, Z. G. Lewis, A. J. Welch, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1996**, 231–237.
- [26] J. Llop, C. Viñ As, J. M. Oliva, F. Teixidor, M. A. Flores, R. Kivekas, R. Sillanpää, *Journal of Organometallic Chemistry* **2002**, 232–238.
- [27] J. M. Oliva, N. L. Allan, P. V. R. Schleyer, C. Viñas, F. Teixidor, *J Am Chem Soc* **2005**, *127*, 13538–13547.
- [28] J. Li, R. Pang, Z. Li, G. Lai, X. Xiao, T. Müller, *Angewandte Chemie* **2018**.
- [29] C. R. Wick, T. Clark, *J Mol Model* **2018**, *24*.
- [30] M. D. Gould, C. Taylor, S. K. Wolff, G. S. Chandler, D. Jayatilaka, *Theor Chem Acc* **2008**, *119*, 275–290.
- [31] K. B. Wiberg, *Tetrahedron* **1968**, *24*, 1083–1096.
- [32] I. Mayer, *J Comput Chem* **2007**, *28*, 204–221.
- [33] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski and D. J. Fox, Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian Inc., Wallingford, CT, 2010, p.
- [34] G. Schaftenaar, J. H. Noordik, *J Comput Aided Mol Des* **2000**, *14*, 123–134.
- [35] J. Poater, C. Viñas, M. Solà, F. Teixidor, *Nat Commun* **2022**, *13*.
- [36] D. Buzsáki, M. B. Kovács, E. Hümpfner, Z. Harcsa-Pintér, Z. Kelemen, *Chem Sci* **2022**, *13*, 11388–11393.
- [37] L. I. Zakharkin, I. v Pisareva, *J Organomet Chem* **1984**, *267*, 13–79.

- [38] Z. Kelemen, A. Pepiol, M. Lupu, R. Sillanpää, M. M. Hänninen, F. Teixidor, C. Viñas, *Chemical Communications* **2019**, 55, 8927–8930.