

Titelbild

Chun-Ru Wang, Tsutomu Kai, Testuo Tomiyama, Takuya Yoshida, Yuji Kobayashi, Eiji Nishibori, Masaki Takata, Makoto Sakata, und Hisanori Shinohara*

Das Titelbild zeigt einen Teilbereich der Elektronendichteverteilung des ersten endohedralen Metallocarbid-Metallofullerens (Sc_2C_2)@ C_{84} , die durch Synchrotronstrahlungs-Pulverbeugungs-Untersuchungen nach der Maximum-Entropie-Methode (MEM) erhalten wurde. Die verschiedenen Dichtemaxima für die Scandium- und die Kohlenstoffatome sind deutlich im Innern des C_{84} -Käfigs zu erkennen. Die MEM-Ladungsdichteverteilung zeigt darüber hinaus, dass der C_{84} -Käfig D_{2d} -symmetrisch (Nr. 23) und die C_2 -Achse parallel zur $\langle 100 \rangle$ -Richtung der kubisch flächenzentrierten Elementarzelle ist. Aufgrund der lokalen $4mm$ -Symmetrie weist die C_2 -Achse in sechs äquivalente $\langle 100 \rangle$ -Richtungen und ist merohedral fehlgeordnet. Der $\text{Sc} \cdots \text{Sc}$ -Abstand und die C-C-Bindungslänge des Sc_2C_2 -Clusters betragen 0.429(2) bzw. 0.142(6) nm. Die C-C-Bindungslänge liegt damit zwischen der einer typischen Einfach- und der einer Doppelbindung und ähnelt sehr der Länge der C-C-Bindung zwischen zwei Fünfringen in C_{60} (0.143 nm). Mehr über die faszinierende Struktur dieses Metallofullerens finden Sie im Beitrag von Shinohara et al. auf S. 411 ff.

