

## A.1 Morphin

Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	-25.0	-25.0	-173.0	60.0	0.3	550	5s
2	-25.0	-25.0	-10.0	60.0	0.3	600	5s
3	-25.0	-25.0	-173.0	45.0	0.3	1153	5s
4	-25.0	-25.0	-173.0	30.0	0.3	1153	5s
5	-63.0	-45.0	-173.0	60.0	0.3	1153	60s
6	-63.0	-45.0	-173.0	45.0	0.3	1153	60s
7	-63.0	-45.0	-173.0	30.0	0.3	1153	60s
8	-86.0	-55.0	-173.0	10.0	0.3	1153	180s
9	-86.0	-55.0	-173.0	30.0	0.3	1153	180s
10	-86.0	-55.0	-173.0	0.0	0.3	1153	180s

Tabelle A.1: Messstrategie der hochaufgelösten Messung von Morphin

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
O(1)	C(3)	1	C(5)	C(13)	-1
O(2)	C(6)	2	C(6)	C(7)	1
O(3)	C(4)	-1	C(7)	C(8)	0
O(3)	C(5)	7	C(8)	C(14)	0
N(1)	C(9)	4	C(9)	C(10)	3
N(1)	C(16)	6	C(9)	C(14)	-1
N(1)	C(17)	7	C(10)	C(11)	-2
C(1)	C(2)	-2	C(11)	C(12)	-3
C(1)	C(11)	-4	C(12)	C(13)	5
C(2)	C(3)	-2	C(13)	C(14)	-1
C(3)	C(4)	-3	C(13)	C(15)	7
C(4)	C(12)	-3	C(15)	C(16)	1
C(5)	C(6)	-1			

Tabelle A.2: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{Å}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
O(1)	C(3)	X	O(1)	H(11)	Y
O(2)	C(6)	X	O(2)	H(21)	Y
O(3)	C(4)	X	O(3)	C(5)	Y
O(4)	DUM0	X	O(4)	H(42)	Y
N(1)	C(9)	Z	N(1)	C(16)	Y
C(1)	C(11)	X	C(1)	C(2)	Y
C(2)	C(1)	X	C(2)	C(3)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	O(1)	Y
C(4)	C(12)	X	C(4)	O(3)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	O(3)	Y
C(6)	C(7)	Z	C(6)	O(2)	Y
C(7)	C(6)	X	C(7)	C(8)	Y
C(8)	C(14)	X	C(8)	C(7)	Y
C(9)	C(14)	Z	C(9)	N(1)	Y
C(10)	C(9)	X	C(10)	C(11)	Y
C(11)	C(12)	X	C(11)	C(1)	Y
C(12)	C(4)	X	C(12)	C(11)	Y
C(13)	C(12)	Z	C(13)	C(15)	Y
C(14)	C(13)	Z	C(14)	C(8)	Y
C(15)	C(13)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(15)	Z	C(16)	N(1)	Y
C(17)	N(1)	Z	C(17)	C(16)	Y
H(1)	C(1)	Z	H(1)	C(2)	Y
H(2)	C(2)	Z	H(2)	C(1)	Y
H(5)	C(5)	Z	H(5)	O(3)	Y
H(6)	C(6)	Z	H(6)	O(2)	Y
H(7)	C(7)	Z	H(7)	C(8)	Y
H(8)	C(8)	Z	H(8)	C(14)	Y
H(9)	C(9)	Z	H(9)	N(1)	Y
H(10A)	C(10)	Z	H(10A)	C(9)	Y
H(10B)	C(10)	Z	H(10B)	C(9)	Y
H(11)	O(1)	Z	H(11)	C(3)	Y
H(14)	C(14)	Z	H(14)	C(8)	Y
H(15A)	C(15)	Z	H(15A)	C(16)	Y
H(15B)	C(15)	Z	H(15B)	C(16)	Y
H(16A)	C(16)	Z	H(16A)	C(15)	Y
H(16B)	C(16)	Z	H(16B)	C(15)	Y
H(17A)	C(17)	Z	H(17A)	N(1)	Y
H(17B)	C(17)	Z	H(17B)	N(1)	Y
H(17C)	C(17)	Z	H(17C)	N(1)	Y
H(21)	O(2)	Z	H(21)	C(6)	Y
H(41)	O(4)	Z	H(41)	O(3)	Y
H(42)	O(4)	Z	H(42)	O(3)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.3: Definition des lokalen Koordinatensystems von Morphin Monohydrat.

## A.2 Codein

Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	0.0	0.0	-170.0	55.0	0.3	999	1s
2	-10.0	0.0	-170.0	55.0	0.3	800	1s
3	-10.0	-10.0	-50.0	30.0	0.3	600	1s
4	-27.0	-27.0	-170.0	55.0	0.3	900	5s
5	-27.0	-27.0	-100.0	20.0	0.3	900	5s
6	-58.0	-45.0	-170.0	55.0	0.3	900	30s
7	-58.0	-45.0	-50.0	20.0	0.3	750	30s
8	-42.0	-42.0	-170.0	50.0	0.3	900	30s
9	-42.0	-30.0	-90.0	10.0	0.3	700	30s
10	-80.0	-55.0	-170.0	30.0	0.3	900	120s
11	-80.0	-55.0	-90.0	10.0	0.3	900	120s
12	-80.0	-55.0	-90.0	20.0	0.3	900	120s
13	-80.0	-55.0	-265.0	30.0	0.3	350	120s

Tabelle A.4: Messstrategie der hochauflösten Messung von Codein

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
O(1)	C(3)	1	C(5)	C(6)	1
O(1)	C(18)	6	C(5)	C(13)	-1
O(2)	C(6)	0	C(6)	C(7)	-1
O(3)	C(4)	-2	C(7)	C(8)	-2
O(3)	C(5)	3	C(8)	C(14)	-3
N(1)	C(9)	-1	C(9)	C(10)	1
N(1)	C(16)	3	C(9)	C(14)	-5
N(1)	C(17)	6	C(10)	C(11)	-4
C(1)	C(2)	-1	C(11)	C(12)	-2
C(1)	C(11)	-3	C(12)	C(13)	4
C(2)	C(3)	-1	C(13)	C(14)	2
C(3)	C(4)	1	C(13)	C(15)	6
C(4)	C(12)	-5	C(15)	C(16)	-1

Tabelle A.5: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{Å}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
O(1)	C(3)	X	O(1)	C(18)	Y
O(2)	C(6)	X	O(2)	H(21)	Y
O(3)	C(4)	X	O(3)	C(5)	Y
N(1)	C(9)	Z	N(1)	C(16)	Y
C(1)	C(11)	X	C(1)	C(2)	Y
C(2)	C(1)	X	C(2)	C(3)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	O(1)	Y
C(4)	C(12)	X	C(4)	O(3)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	O(3)	Y
C(6)	C(7)	Z	C(6)	O(2)	Y
C(7)	C(6)	X	C(7)	C(8)	Y
C(8)	C(14)	X	C(8)	C(7)	Y
C(9)	C(14)	Z	C(9)	N(1)	Y
C(10)	C(9)	X	C(10)	C(11)	Y
C(11)	C(12)	X	C(11)	C(1)	Y
C(12)	C(4)	X	C(12)	C(11)	Y
C(13)	C(12)	Z	C(13)	C(15)	Y
C(14)	C(13)	Z	C(14)	C(8)	Y
C(15)	C(13)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(15)	Z	C(16)	N(1)	Y
C(17)	N(1)	Z	C(17)	C(16)	Y
C(18)	O(1)	Z	C(18)	C(2)	Y
H(1)	C(1)	Z	H(1)	C(2)	Y
H(2)	C(2)	Z	H(2)	C(1)	Y
H(5)	C(5)	Z	H(5)	O(3)	Y
H(6)	C(6)	Z	H(6)	O(2)	Y
H(7)	C(7)	Z	H(7)	C(8)	Y
H(8)	C(8)	Z	H(8)	C(7)	Y
H(9)	C(9)	Z	H(9)	N(1)	Y
H(10A)	C(10)	Z	H(10A)	C(9)	Y
H(10B)	C(10)	Z	H(10B)	C(9)	Y
H(14)	C(14)	Z	H(14)	C(9)	Y
H(15A)	C(15)	Z	H(15A)	C(16)	Y
H(15B)	C(15)	Z	H(15B)	C(16)	Y
H(16A)	C(16)	Z	H(16A)	C(15)	Y
H(16B)	C(16)	Z	H(16B)	C(15)	Y
H(17A)	C(17)	Z	H(17A)	N(1)	Y
H(17B)	C(17)	Z	H(17B)	N(1)	Y
H(17C)	C(17)	Z	H(17C)	N(1)	Y
H(18A)	C(18)	Z	H(18A)	O(1)	Y
H(18B)	C(18)	Z	H(18B)	O(1)	Y
H(18C)	C(18)	Z	H(18C)	O(1)	Y
H(21)	O(2)	Z	H(21)	C(6)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.6: Definition des lokalen Koordinatensystems von Codein.

## A.3 Diprenorphin

Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	0.0	0.0	1.0	0.0	3.0	122	10s
2	0.0	0.0	1.0	30.0	5.0	122	5s
3	0.0	0.0	1.0	30.0	3.0	122	10s
4	-40.0	-20.0	1.0	0.0	3.0	122	100s
5	-40.0	-20.0	1.0	30.0	3.0	122	100s
6	-40.0	-20.0	1.0	15.0	3.0	122	100s
7	-40.0	-20.0	1.0	-15.0	3.0	122	100s
8	-40.0	-20.0	1.0	-15.0	1.5	244	100s
9	-40.0	-20.0	1.0	30.0	1.5	244	100s

Tabelle A.7: Messstrategie der hochaufgelösten Messung von Diprenorphin

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
O(1)	C(3)	-2	C(7)	C(20)	-1
O(2)	C(6)	1	C(8)	C(14)	-1
O(2)	C(21)	6	C(9)	C(10)	0
O(3)	C(4)	-3	C(9)	C(14)	-4
O(3)	C(5)	2	C(10)	C(11)	-3
O(4)	C(20)	1	C(11)	C(12)	0
N(1)	C(9)	2	C(12)	C(13)	2
N(1)	C(16)	-3	C(13)	C(14)	2
N(1)	C(17)	6	C(13)	C(15)	6
C(1)	C(2)	-1	C(14)	C(19)	1
C(1)	C(11)	-3	C(15)	C(16)	1
C(2)	C(3)	-1	C(17)	C(22)	-3
C(3)	C(4)	-2	C(18)	C(19)	-4
C(4)	C(12)	-2	C(20)	C(25)	2
C(5)	C(6)	4	C(20)	C(26)	-1
C(5)	C(13)	-4	C(22)	C(23)	1
C(6)	C(7)	-2	C(22)	C(24)	0
C(6)	C(18)	4	C(23)	C(24)	-2
C(7)	C(8)	3			

Tabelle A.8: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{Å}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
O(1)	H(11)	Z	O(1)	C(3)	Y
O(2)	C(21)	Z	O(2)	C(6)	Y
O(3)	C(4)	Z	O(3)	C(5)	Y
O(4)	H(41)	Z	O(4)	C(20)	Y
N(1)	C(17)	Z	N(1)	C(16)	Y
C(1)	C(11)	X	C(1)	C(2)	Y
C(2)	C(3)	X	C(2)	C(1)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	C(4)	Y
C(4)	C(3)	X	C(4)	C(12)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	O(2)	Y
C(6)	C(5)	Z	C(6)	C(7)	Y
C(7)	C(6)	Z	C(7)	C(8)	Y
C(8)	C(7)	Z	C(8)	C(14)	Y
C(9)	C(10)	Z	C(9)	N(1)	Y
C(10)	C(11)	Z	C(10)	C(9)	Y
C(11)	C(12)	X	C(11)	C(1)	Y
C(12)	C(4)	X	C(12)	C(11)	Y
C(13)	C(12)	Z	C(13)	C(15)	Y
C(14)	C(8)	Z	C(14)	C(19)	Y
C(15)	C(13)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(15)	Z	C(16)	N(1)	Y
C(17)	N(1)	Z	C(17)	C(22)	Y
C(18)	C(6)	Z	C(18)	C(19)	Y
C(19)	C(18)	Z	C(19)	C(14)	Y
C(20)	O(4)	Z	C(20)	C(7)	Y
C(21)	O(3)	Z	C(21)	H(122)	Y
C(22)	C(17)	X	C(22)	H(22)	Y
C(23)	C(22)	X	C(23)	C(24)	Y
C(24)	C(22)	X	C(24)	C(23)	Y
C(25)	C(20)	Z	C(25)	H(252)	Y
C(26)	C(20)	Z	C(26)	H(262)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.9: Definition des lokalen Koordinatensystems von Diprenorphin.

## A.4 Naltrexon

Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	0.0	0.0	1.0	0.0	2.0	180	15s
2	0.0	0.0	1.0	54.0	2.0	180	15s
3	-20.0	0.0	1.0	0.0	3.0	120	20s
4	-20.0	0.0	1.0	54.0	3.0	120	20s
5	-45.0	0.0	1.0	0.0	2.0	180	90s
6	-50.0	0.0	1.0	0.0	3.0	120	200s
7	-50.0	0.0	1.0	54.0	3.0	120	200s

Tabelle A.10: Messstrategie der hochauflösten Messung von Naltrexon

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
O(1)	C(3)	3	C(4)	C(12)	-2	C(2A)	C(3A)	-4
O(2)	C(6)	0	C(5)	C(6)	-3	C(3A)	C(4A)	-2
O(3)	C(4)	-3	C(5)	C(13)	-3	C(4A)	C(12A)	-3
O(3)	C(5)	6	C(6)	C(7)	4	C(5A)	C(6A)	-1
O(4)	C(14)	0	C(7)	C(8)	-4	C(5A)	C(13A)	-3
O(1A)	C(3A)	1	C(8)	C(14)	-3	C(6A)	C(7A)	4
O(2A)	C(6A)	3	C(9)	C(10)	2	C(7A)	C(8A)	-1
O(3A)	C(4A)	3	C(9)	C(14)	-3	C(8A)	C(14A)	-5
O(3A)	C(5A)	2	C(10)	C(11)	-5	C(9A)	C(10A)	-1
O(4A)	C(14A)	2	C(11)	C(12)	-2	C(9A)	C(14A)	0
N(1)	C(9)	4	C(12)	C(13)	4	C(10A)	C(11A)	-2
N(1)	C(16)	4	C(13)	C(14)	-1	C(11A)	C(12A)	-2
N(1)	C(17)	5	C(13)	C(15)	3	C(12A)	C(13A)	3
N(1A)	C(9A)	4	C(15)	C(16)	-2	C(13A)	C(14A)	2
N(1A)	C(16A)	4	C(17)	C(18)	1	C(13A)	C(15A)	4
N(1A)	C(17A)	5	C(18)	C(19)	7	C(15A)	C(16A)	1
C(1)	C(2)	-3	C(18)	C(20)	3	C(17A)	C(18A)	-2
C(1)	C(11)	-5	C(19)	C(20)	0	C(18A)	C(19A)	6
C(2)	C(3)	-1	C(1A)	C(2A)	4	C(18A)	C(20A)	-2
C(3)	C(4)	-3	C(1A)	C(11A)	-2	C(19A)	C(20A)	1

Tabelle A.11: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{Å}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
O(1)	C(3)	X	O(1)	H(11)	Y
O(2)	C(6)	X	O(2)	C(5)	Y
O(3)	C(4)	X	O(3)	C(5)	Y
O(4)	C(14)	X	O(4)	H(41)	Y
O(1W)	H(1W)	X	O(1W)	H(2W)	Y
O(2W)	H(4W)	X	O(2W)	H(3W)	Y
N(1)	C(9)	Z	N(1)	C(16)	Y
C(1)	C(11)	X	C(1)	C(2)	Y
C(2)	C(1)	X	C(2)	C(3)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	O(1)	Y
C(4)	C(12)	X	C(4)	O(3)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	O(3)	Y
C(6)	C(7)	X	C(6)	O(2)	Y
C(7)	C(6)	Z	C(7)	C(8)	Y
C(8)	C(14)	Z	C(8)	C(7)	Y
C(9)	C(14)	Z	C(9)	N(1)	Y
C(10)	C(9)	X	C(10)	C(11)	Y
C(11)	C(12)	X	C(11)	C(1)	Y
C(12)	C(4)	X	C(12)	C(11)	Y
C(13)	C(12)	Z	C(13)	C(15)	Y
C(14)	O(4)	Z	C(14)	C(8)	Y
C(15)	C(13)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(15)	Z	C(16)	N(1)	Y
C(17)	N(1)	Z	C(17)	C(18)	Y
C(18)	C(17)	X	C(18)	H(18)	Y
C(19)	C(20)	X	C(19)	C(18)	Y
C(20)	C(19)	X	C(20)	C(18)	Y
H(1)	C(1)	Z	H(1)	C(2)	Y
H(2)	C(2)	Z	H(2)	C(1)	Y
H(41)	O(4)	Z	H(41)	C(14)	Y
H(5)	C(5)	Z	H(5)	O(3)	Y
H(71)	C(7)	Z	H(71)	C(8)	Y
H(72)	C(7)	Z	H(72)	C(8)	Y
H(81)	C(8)	Z	H(81)	C(7)	Y
H(82)	C(8)	Z	H(82)	C(7)	Y
H(9)	C(9)	Z	H(9)	N(1)	Y
H(101)	C(10)	Z	H(101)	C(9)	Y
H(102)	C(10)	Z	H(102)	C(9)	Y
H(11)	O(1)	Z	H(11)	C(3)	Y
H(151)	C(15)	Z	H(151)	C(16)	Y
H(152)	C(15)	Z	H(152)	C(16)	Y
H(161)	C(16)	Z	H(161)	C(15)	Y
H(162)	C(16)	Z	H(162)	C(15)	Y
H(171)	C(17)	Z	H(171)	N(1)	Y
H(172)	C(17)	Z	H(172)	N(1)	Y
H(18)	C(18)	Z	H(18)	C(20)	Y
H(191)	C(19)	Z	H(191)	C(20)	Y
H(192)	C(19)	Z	H(192)	C(20)	Y
H(201)	C(20)	Z	H(201)	C(19)	Y
H(202)	C(20)	Z	H(202)	C(19)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.12: Definition des lokalen Koordinatensystems von Naltrexon.



Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	0.0	0.0	1.0	0.0	3.0	120	10s
2	-50.0	0.0	1.0	25.0	3.0	120	6s
3	-50.0	30.0	1.0	25.0	3.0	120	6s
4	-50.0	-30.0	1.0	25.0	3.0	120	6s
5	-50.0	0.0	1.0	54.0	3.0	120	10s
6	-50.0	0.0	1.0	0.0	3.0	120	150s
7	-50.0	40.0	1.0	54.0	3.0	120	150s
8	-50.0	-40.0	1.0	54.0	3.0	120	150s

Tabelle A.13: Messstrategie der hochaufgelösten Messung von Naltrexon Formiat

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
O(1)	C(3)	-5	C(6)	C(7)	8
O(2)	C(6)	-9	C(7)	C(8)	-3
O(3)	C(4)	-8	C(8)	C(14)	-7
O(3)	C(5)	-2	C(9)	C(10)	2
O(4)	C(14)	-1	C(9)	C(14)	-4
N(1)	C(9)	1	C(10)	C(11)	-9
N(1)	C(16)	3	C(11)	C(12)	1
N(1)	C(17)	0	C(12)	C(13)	3
C(1)	C(2)	1	C(13)	C(14)	4
C(1)	C(11)	5	C(13)	C(15)	-4
C(2)	C(3)	-1	C(15)	C(16)	0
C(3)	C(4)	-5	C(17)	C(18)	2
C(4)	C(12)	0	C(18)	C(19)	7
C(5)	C(6)	1	C(18)	C(20)	4
C(5)	C(13)	0	C(19)	C(20)	5

Tabelle A.14: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{ \AA}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
O(1)	C(3)	Z	O(1)	H(11)	Y
O(2)	C(6)	Z	O(2)	C(7)	Y
O(3)	C(4)	X	O(3)	C(5)	Y
O(4)	C(14)	X	O(4)	H(41)	Y
O(5)	C(21)	X	O(5)	O(6)	Y
O(6)	C(21)	Z	O(6)	O(5)	Y
O(7)	H(772)	Z	O(7)	H(771)	Y
O(10)	O(11)	Z	O(10)	H(121)	Y
N(1)	C(16)	Z	N(1)	C(17)	Y
C(1)	C(11)	X	C(1)	C(2)	Y
C(2)	C(3)	X	C(2)	C(1)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	C(4)	Y
C(4)	C(3)	X	C(4)	C(12)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	O(3)	Y
C(6)	O(2)	X	C(6)	C(7)	Y
C(7)	C(6)	Z	C(7)	C(8)	Y
C(8)	C(7)	Z	C(8)	C(14)	Y
C(9)	C(14)	Z	C(9)	N(1)	Y
C(10)	C(9)	Z	C(10)	C(11)	Y
C(11)	C(12)	X	C(11)	C(1)	Y
C(12)	C(4)	X	C(12)	C(11)	Y
C(13)	C(12)	Z	C(13)	C(15)	Y
C(14)	O(4)	Z	C(14)	C(8)	Y
C(15)	C(13)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(15)	Z	C(16)	N(1)	Y
C(17)	N(1)	Z	C(17)	C(18)	Y
C(18)	C(17)	X	C(18)	H(181)	Y
C(19)	C(18)	X	C(19)	C(20)	Y
C(20)	C(18)	X	C(20)	C(19)	Y
C(21)	O(5)	X	C(21)	O(6)	Y
H(1)	C(1)	Z	H(1)	C(2)	Y
H(2)	C(2)	Z	H(2)	C(1)	Y
H(5)	C(5)	Z	H(5)	O(3)	Y
H(9)	C(9)	Z	H(9)	N(1)	Y
H(11)	O(1)	Z	H(11)	C(3)	Y
H(41)	O(4)	Z	H(41)	C(14)	Y
H(71)	C(7)	Z	H(71)	C(8)	Y
H(72)	C(7)	Z	H(72)	C(8)	Y
H(81)	C(8)	Z	H(81)	C(7)	Y
H(82)	C(8)	Z	H(82)	C(7)	Y
H(101)	C(10)	Z	H(101)	C(9)	Y
H(102)	C(10)	Z	H(102)	C(9)	Y
H(111)	N(1)	Z	H(111)	C(9)	Y
H(121)	O(10)	Z	H(121)	O(11)	Y
H(122)	O(11)	Z	H(122)	O(10)	Y
H(151)	C(15)	Z	H(151)	C(16)	Y
H(152)	C(15)	Z	H(152)	C(16)	Y
H(161)	C(16)	Z	H(161)	C(15)	Y
H(162)	C(16)	Z	H(162)	C(15)	Y
H(171)	C(17)	Z	H(171)	N(1)	Y
H(172)	C(17)	Z	H(172)	N(1)	Y
H(181)	C(18)	Z	H(181)	C(20)	Y
H(191)	C(19)	Z	H(191)	C(20)	Y
H(192)	C(19)	Z	H(192)	C(20)	Y
H(201)	C(20)	Z	H(201)	C(19)	Y
H(202)	C(20)	Z	H(202)	C(19)	Y
H(211)	C(21)	Z	H(211)	O(6)	Y
H(771)	O(7)	Z	H(771)	H(772)	Y
H(772)	O(7)	Z	H(772)	H(771)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.15: Definition des lokalen Koordinatensystems von Naltrexon Formiat.

## A.5 Dextromethorphan

Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	0.0	0.0	-173.0	30.0	0.3	900	1s
2	-28.0	-28.0	-173.0	55.0	0.3	1150	5s
3	-28.0	-28.0	-173.0	25.0	0.3	1150	5s
4	-28.0	-28.0	-173.0	0.0	0.3	900	5s
5	-58.0	-49.0	-173.0	55.0	0.3	1150	30s
6	-58.0	-49.0	-173.0	25.0	0.3	1150	30s
7	-58.0	-49.0	-173.0	0.0	0.3	1150	30s
8	-80.0	-65.0	-173.0	30.0	0.3	1150	120s
9	-80.0	-65.0	-173.0	0.0	0.3	1150	120s
10	-80.0	-65.0	-100.0	15.0	0.3	900	120s

Tabelle A.16: Messstrategie der hochaufgelösten Messung von Dextromethorphan

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
O(1)	C(3)	1	C(6)	C(7)	0
O(1)	C(18)	4	C(7)	C(8)	-1
N(1)	C(9)	2	C(8)	C(14)	-5
N(1)	C(16)	4	C(9)	C(10)	-1
N(1)	C(17)	4	C(9)	C(14)	-1
C(1)	C(2)	-3	C(10)	C(11)	-5
C(1)	C(11)	-3	C(11)	C(12)	-1
C(2)	C(3)	-2	C(12)	C(13)	3
C(3)	C(4)	-1	C(13)	C(14)	3
C(4)	C(12)	1	C(13)	C(15)	4
C(5)	C(6)	3	C(15)	C(16)	1
C(5)	C(13)	-5			

Tabelle A.17: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{ \AA}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
O(1)	C(3)	X	O(1)	C(18)	Y
N(1)	C(9)	Z	N(1)	C(16)	Y
C(1)	C(11)	X	C(1)	C(2)	Y
C(2)	C(1)	X	C(2)	C(3)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	O(1)	Y
C(4)	C(12)	X	C(4)	C(3)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	C(13)	Y
C(6)	C(5)	Z	C(6)	C(7)	Y
C(7)	C(6)	Z	C(7)	C(8)	Y
C(8)	C(7)	Z	C(8)	C(14)	Y
C(9)	C(14)	Z	C(9)	N(1)	Y
C(10)	C(9)	Z	C(10)	C(11)	Y
C(11)	C(12)	X	C(11)	C(1)	Y
C(12)	C(11)	X	C(12)	C(4)	Y
C(13)	C(12)	Z	C(13)	C(15)	Y
C(14)	C(13)	Z	C(14)	C(8)	Y
C(15)	C(13)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(15)	Z	C(16)	N(1)	Y
C(17)	N(1)	Z	C(17)	C(16)	Y
C(18)	O(1)	Z	C(18)	C(4)	Y
H(1)	C(1)	Z	H(1)	C(2)	Y
H(2)	C(2)	Z	H(2)	C(1)	Y
H(4)	C(4)	Z	H(4)	C(12)	Y
H(9)	C(9)	Z	H(9)	N(1)	Y
H(14)	C(14)	Z	H(14)	C(9)	Y
H(51)	C(5)	Z	H(51)	C(6)	Y
H(52)	C(5)	Z	H(52)	C(6)	Y
H(61)	C(6)	Z	H(61)	C(5)	Y
H(62)	C(6)	Z	H(62)	C(5)	Y
H(71)	C(7)	Z	H(71)	C(8)	Y
H(72)	C(7)	Z	H(72)	C(8)	Y
H(81)	C(8)	Z	H(81)	C(7)	Y
H(82)	C(8)	Z	H(82)	C(7)	Y
H(101)	C(10)	Z	H(101)	C(9)	Y
H(102)	C(10)	Z	H(102)	C(9)	Y
H(151)	C(15)	Z	H(151)	C(13)	Y
H(152)	C(15)	Z	H(152)	C(13)	Y
H(161)	C(16)	Z	H(161)	N(1)	Y
H(162)	C(16)	Z	H(162)	N(1)	Y
H(171)	C(17)	Z	H(171)	N(1)	Y
H(172)	C(17)	Z	H(172)	N(1)	Y
H(173)	C(17)	Z	H(173)	N(1)	Y
H(181)	C(18)	Z	H(181)	O(1)	Y
H(182)	C(18)	Z	H(182)	O(1)	Y
H(183)	C(18)	Z	H(183)	O(1)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.18: Definition des lokalen Koordinatensystems von Dextromethorphan.

A.6 C<sub>60</sub>Cl<sub>30</sub>

Run	$2\theta$	$\omega$	$\phi$	$\chi$	$\phi$ -Inkrement	Frames	Messzeit
1	0.0	0.0	-173.0	30.0	0.3	900	1s
2	-28.0	-28.0	-173.0	55.0	0.3	1150	5s
3	-28.0	-28.0	-173.0	25.0	0.3	1150	5s
4	-28.0	-28.0	-173.0	0.0	0.3	1150	5s
5	-58.0	-49.0	-173.0	50.0	0.3	1150	20s
6	-58.0	-49.0	-173.0	20.0	0.3	1150	20s
7	-58.0	-49.0	-173.0	0.0	0.3	900	20s
8	-80.0	-65.0	-173.0	30.0	0.3	1150	90s
9	-80.0	-65.0	-173.0	15.0	0.3	1150	90s
10	-80.0	-65.0	-100.0	0.0	0.3	1150	90s

Tabelle A.19: Messstrategie der hochaufgelösten Messung von C<sub>60</sub>Cl<sub>30</sub>

Atom A	Atom B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA	ATOM A	ATOM B	DMSDA
Cl(1)	C(7)	4	C(2)	C(12)	1	C(13)	C(14)	0
Cl(2)	C(8)	3	C(3)	C(4)	0	C(13)	C(30)	-3
Cl(3)	C(9)	3	C(3)	C(14)	3	C(14)	C(15)	2
Cl(4)	C(10)	3	C(4)	C(5)	1	C(15)	C(16)	-2
Cl(5)	C(11)	6	C(4)	C(17)	1	C(16)	C(17)	-3
Cl(6)	C(12)	6	C(5)	C(6)	-2	C(17)	C(18)	0
Cl(7)	C(13)	6	C(5)	C(19)	2	C(18)	C(19)	2
Cl(8)	C(14)	4	C(6)	C(7)	4	C(19)	C(20)	2
Cl(9)	C(15)	8	C(7)	C(8)	0	C(20)	C(21)	-2
Cl(10)	C(16)	7	C(7)	C(21)	1	C(21)	C(22)	-4
Cl(11)	C(17)	5	C(8)	C(9)	0	C(22)	C(23)	1
Cl(12)	C(18)	4	C(8)	C(24)	-3	C(23)	C(24)	-2
Cl(13)	C(19)	4	C(9)	C(10)	2	C(24)	C(25)	2
Cl(14)	C(20)	8	C(10)	C(11)	0	C(25)	C(26)	0
Cl(15)	C(21)	6	C(10)	C(26)	-1	C(26)	C(27)	-2
C(1)	C(2)	1	C(11)	C(12)	-1	C(27)	C(28)	-1
C(1)	C(6)	1	C(11)	C(28)	-1	C(28)	C(29)	-1
C(1)	C(9)	2	C(12)	C(13)	1	C(29)	C(30)	0
C(2)	C(3)	2						

Tabelle A.20: Hirshfeld *rigid bond test*. Differenz der mittleren Verschiebungsparameter DMSDA (*different mean square displacement amplitudes*) für gebundene Atome in Einheiten von  $1 \cdot 10^4 \text{Å}^2$ .

Atom	Atom 0	Achse 1	Atom 1	Atom 2	Achse 2
CL(1)	C(7)	Z	CL(1)	C(6)	Y
CL(2)	C(8)	Z	CL(2)	C(24)	Y
CL(3)	C(9)	Z	CL(3)	C(1)	Y
CL(4)	C(10)	Z	CL(4)	C(26)	Y
CL(5)	C(11)	Z	CL(5)	C(28)	Y
CL(6)	C(12)	Z	CL(6)	C(2)	Y
CL(7)	C(13)	Z	CL(7)	C(30)	Y
CL(8)	C(14)	Z	CL(8)	C(3)	Y
CL(9)	C(15)	Z	CL(9)	C(14)	Y
CL(10)	C(16)	Z	CL(10)	C(17)	Y
CL(11)	C(17)	Z	CL(11)	C(4)	Y
CL(12)	C(18)	Z	CL(12)	C(19)	Y
CL(13)	C(19)	Z	CL(13)	C(5)	Y
CL(14)	C(20)	Z	CL(14)	C(19)	Y
CL(15)	C(21)	Z	CL(15)	C(22)	Y
CL(16)	CL(2)	Z	CL(16)	CL(15)	Y
C(1)	C(2)	Z	C(1)	C(6)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	C(3)	Y
C(3)	C(4)	Z	C(3)	C(2)	Y
C(4)	C(3)	Z	C(4)	C(5)	Y
C(5)	C(6)	Z	C(5)	C(4)	Y
C(6)	C(5)	Z	C(6)	C(1)	Y
C(7)	C(6)	Z	C(7)	C(21)	Y
C(8)	C(24)	Z	C(8)	C(9)	Y
C(9)	C(1)	Z	C(9)	C(10)	Y
C(10)	C(26)	Z	C(10)	C(9)	Y
C(11)	C(28)	Z	C(11)	C(12)	Y
C(12)	C(2)	Z	C(12)	C(11)	Y
C(13)	C(30)	Z	C(13)	C(12)	Y
C(14)	C(3)	Z	C(14)	C(15)	Y
C(15)	C(14)	Z	C(15)	C(16)	Y
C(16)	C(17)	Z	C(16)	C(15)	Y
C(17)	C(4)	Z	C(17)	C(16)	Y
C(18)	C(19)	Z	C(18)	C(17)	Y
C(19)	C(5)	Z	C(19)	C(20)	Y
C(20)	C(19)	Z	C(20)	C(21)	Y
C(21)	C(22)	Z	C(21)	C(7)	Y
C(22)	C(23)	Z	C(22)	C(21)	Y
C(23)	C(22)	Z	C(23)	C(24)	Y
C(24)	C(23)	Z	C(24)	C(25)	Y
C(25)	C(26)	Z	C(25)	C(24)	Y
C(26)	C(25)	Z	C(26)	C(27)	Y
C(27)	C(28)	Z	C(27)	C(26)	Y
C(28)	C(29)	Z	C(28)	C(27)	Y
C(29)	C(28)	Z	C(29)	C(30)	Y
C(30)	C(29)	Z	C(30)	C(13)	Y

Die Achse 1, Achse 2 Ebene ist durch die Atom 0-Atom und Atom 2-Atom 1 Vektoren definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

Tabelle A.21: Definition des lokalen Koordinatensystems von  $C_{60}Cl_{30}$ .

---

Bindung	Länge	$\rho$	$\nabla^2\rho$	$\epsilon$
C1 –C2	1.352	2.35	-27.5	0.24
	1.352	2.29	-24.3	0.20
	1.3717(5)	2.25 ( 2)	-18.6 ( 1)	0.17
C1 –C6	1.365	2.32	-26.7	0.24
	1.365	2.26	-23.4	0.20
	1.3800(5)	2.23 ( 2)	-18.1 ( 1)	0.21
C1 –C9	1.478	1.94	-20.2	0.02
	1.478	1.86	-16.8	0.02
	1.4776(5)	1.86 ( 4)	-13.5 ( 1)	0.02
C2 –C3	1.365	2.32	-26.7	0.24
	1.365	2.26	-23.4	0.21
	1.3805(4)	2.23 ( 1)	-18.1 ( 1)	0.21
C2 –C12	1.478	1.94	-20.2	0.02
	1.478	1.86	-16.8	0.02
	1.4781(4)	1.95 ( 4)	-15.2 ( 1)	0.04
C3 –C4	1.352	2.35	-27.5	0.24
	1.352	2.29	-24.2	0.20
	1.3752(4)	2.24 ( 1)	-18.3 ( 1)	0.17
C3 –C14	1.478	1.94	-20.2	0.02
	1.478	1.86	-16.8	0.02
	1.4803(4)	1.88 ( 1)	-14.8 ( 1)	0.13
C4 –C5	1.365	2.32	-26.7	0.24
	1.365	2.26	-23.4	0.21
	1.3820(4)	2.23 ( 1)	-18.0 ( 1)	0.13
C4 –C17	1.478	1.94	-20.2	0.02
	1.478	1.86	-16.8	0.02
	1.4807(3)	1.92 ( 4)	-16.4 ( 1)	0.05
C5 –C6	1.352	2.35	-27.5	0.24
	1.352	2.29	-24.2	0.20
	1.3737(3)	2.24 ( 1)	-18.4 ( 1)	0.17
C5 –C19	1.478	1.94	-20.2	0.02
	1.478	1.86	-16.8	0.02
	1.4787(4)	1.95 ( 4)	-17.0 ( 1)	0.09
C6 –C7	1.478	1.94	-20.2	0.02
	1.478	1.86	-16.8	0.02
	1.4808(3)	1.95 ( 4)	-17.7 ( 1)	0.05
C7 –C8	1.624	1.50	-12.4	0.02
	1.624	1.43	-9.9	0.02
	1.6308(3)	1.44 ( 4)	-6.3 ( 1)	0.08
C7 –C21	1.578	1.62	-14.4	0.02
	1.578	1.55	-11.6	0.02
	1.5835(5)	1.59 ( 2)	-11.3 ( 1)	0.07

---

Bindung	Länge	$\rho$	$\nabla^2\rho$	$\epsilon$
C8 –C9	1.623	1.50	-12.4	0.02
	1.623	1.43	-9.9	0.02
	1.6264(3)	1.39 ( 4)	-7.2 ( 1)	0.11
C8 –C24	1.494	1.87	-19.0	0.02
	1.494	1.79	-15.7	0.02
	1.4988(5)	1.76 ( 5)	-12.0 ( 1)	0.03
C9 –C10	1.578	1.62	-14.4	0.02
	1.578	1.55	-11.6	0.02
	1.5795(4)	1.56 ( 4)	-9.5 ( 1)	0.11
C10 –C11	1.687	1.32	-9.7	0.04
	1.687	1.26	-7.6	0.04
	1.6954(3)	1.20 ( 4)	-4.1 ( 1)	0.15
C10 –C26	1.512	1.82	-17.9	0.03
	1.512	1.75	-14.7	0.03
	1.5122(3)	1.81 ( 5)	-13.7 ( 2)	0.05
C11 –C12	1.578	1.62	-14.4	0.02
	1.578	1.55	-11.6	0.02
	1.5717(4)	1.58 ( 4)	-10.1 ( 1)	0.14
C11 –C28	1.512	1.82	-17.9	0.03
	1.512	1.75	-14.7	0.04
	1.5090(4)	1.79 ( 5)	-11.2 ( 2)	0.12
C12 –C13	1.622	1.50	-12.4	0.02
	1.622	1.43	-9.9	0.02
	1.6232(4)	1.44 ( 4)	-8.2 ( 1)	0.06
C13 –C14	1.622	1.50	-12.4	0.02
	1.622	1.43	-9.9	0.02
	1.6273(3)	1.51 ( 4)	-8.9 ( 1)	0.09
C13 –C30	1.494	1.87	-18.8	0.02
	1.494	1.79	-15.4	0.04
	1.4983(3)	1.80 ( 5)	-11.9 ( 2)	0.02
C14 –C15	1.578	1.62	-14.5	0.02
	1.578	1.55	-11.7	0.02
	1.5817(4)	1.60 ( 4)	-10.6 ( 1)	0.10
C15 –C16	1.687	1.32	-9.8	0.03
	1.687	1.26	-7.7	0.03
	1.7044(3)	1.26 ( 4)	-3.4 ( 1)	0.14
C15 -C'23	1.512	1.81	-17.4	0.05
	1.512	1.74	-14.5	0.04
	1.5139(3)	1.78 ( 7)	-11.3 ( 2)	0.10
C16 –C17	1.578	1.62	-14.4	0.02
	1.578	1.55	-11.7	0.02
	1.5860(3)	1.61 ( 4)	-11.4 ( 1)	0.14
C16 -C'25	1.512	1.82	-17.9	0.03



Bindung	Länge	$\rho$	$\nabla^2\rho$	$\epsilon$
	1.512	1.75	-14.7	0.04
	1.5112(5)	1.81 ( 6)	-12.4 ( 1)	0.04
C17 -C18	1.622	1.50	-12.4	0.02
	1.622	1.43	-9.9	0.02
	1.6299(5)	1.36 ( 4)	-7.2 ( 1)	0.12
C18 -C19	1.622	1.50	-12.4	0.02
	1.622	1.43	-9.9	0.02
	1.6258(5)	1.43 ( 4)	-6.8 ( 1)	0.11
C18 -C'27	1.494	1.87	-19.0	0.02
	1.494	1.79	-15.6	0.02
	1.4935(3)	1.79 ( 7)	-12.8 ( 2)	0.09
C19 -C20	1.579	1.62	-14.4	0.02
	1.579	1.55	-11.6	0.02
	1.5808(3)	1.54 ( 4)	-9.9 ( 1)	0.05
C20 -C21	1.687	1.32	-9.7	0.04
	1.687	1.26	-7.6	0.04
	1.6991(3)	1.12 ( 4)	-5.3 ( 1)	0.04
C20 -C'29	1.512	1.82	-17.9	0.03
	1.512	1.75	-14.7	0.03
	1.5067(3)	1.88 ( 7)	-15.4 ( 2)	0.08
C21 -C22	1.512	1.82	-17.9	0.03
	1.512	1.75	-14.7	0.03
	1.5160(4)	1.79 ( 5)	-11.6 ( 2)	0.05
C22 -C23	1.364	2.28	-25.8	0.25
	1.364	2.21	-22.4	0.23
	1.3881(4)	2.21 ( 5)	-17.0 ( 2)	0.17
C22 -C'30	1.377	2.24	-24.7	0.26
	1.377	2.18	-21.7	0.22
	1.3947(4)	2.10 ( 8)	-13.5 ( 2)	0.19
C23 -C24	1.377	2.24	-24.7	0.26
	1.377	2.18	-21.7	0.22
	1.3981(4)	2.18 ( 5)	-19.3 ( 2)	0.09
C23 -C'15	1.512	1.83	-18.0	0.02
	1.512	1.75	-14.8	0.03
	1.5139(5)	1.78 ( 6)	-11.6 ( 2)	0.10
C24 -C25	1.377	2.24	-24.8	0.25
	1.377	2.18	-21.6	0.23
	1.3984(5)	2.20 ( 5)	-17.9 ( 2)	0.36
C25 -C26	1.364	2.28	-25.6	0.27
	1.364	2.22	-22.6	0.22
	1.3861(3)	2.19 ( 5)	-18.2 ( 2)	0.11
C25 -C'16	1.512	1.83	-18.0	0.02
	1.512	1.75	-14.8	0.03

Bindung	Länge	$\rho$	$\nabla^2\rho$	$\epsilon$
	1.5112(3)	1.81 ( 6)	-12.4 ( 2)	0.04
C26 -C27	1.377	2.24	-24.8	0.25
	1.377	2.18	-21.6	0.23
	1.3975(4)	2.15 ( 5)	-17.4 ( 2)	0.25
C27 -C28	1.377	2.24	-24.6	0.27
	1.377	2.18	-21.7	0.22
	1.3932(5)	2.03 ( 5)	-15.2 ( 2)	0.31
C27 -C'18	1.494	1.88	-19.1	0.01
	1.494	1.80	-15.7	0.02
	1.4935(5)	1.79 ( 6)	-12.8 ( 2)	0.09
C28 -C29	1.364	2.27	-25.7	0.25
	1.364	2.21	-22.4	0.23
	1.3848(5)	2.18 ( 5)	-15.4 ( 2)	0.11
C29 -C30	1.377	2.23	-24.4	0.28
	1.377	2.17	-21.4	0.24
	1.3948(4)	2.20 ( 5)	-16.9 ( 2)	0.32
C29 -C'20	1.512	1.82	-18.0	0.03
	1.512	1.75	-14.8	0.03
	1.5067(4)	1.88 ( 6)	-15.4 ( 2)	0.08
C30 -C'22	1.377	2.24	-24.6	0.27
	1.377	2.16	-21.3	0.25
	1.3947(4)	2.09 ( 8)	-13.5 ( 2)	0.19
CL1 -C7	1.793	1.27	-7.1	0.00
	1.793	1.23	-5.1	0.00
	1.7898(3)	1.17 ( 3)	-0.7 ( 1)	0.08
CL2 -C8	1.780	1.31	-7.6	0.00
	1.780	1.26	-5.6	0.00
	1.7779(3)	1.22 ( 3)	0.6 ( 1)	0.09
CL3 -C9	1.793	1.27	-7.1	0.00
	1.793	1.23	-5.1	0.00
	1.7838(3)	1.16 ( 3)	-0.8 ( 1)	0.07
CL4 -C10	1.792	1.28	-7.2	0.00
	1.792	1.24	-5.2	0.00
	1.7874(3)	1.13 ( 3)	1.3 ( 1)	0.11
CL5 -C11	1.792	1.28	-7.2	0.00
	1.792	1.24	-5.2	0.00
	1.7857(3)	1.22 ( 3)	0.7 ( 1)	0.19
CL6 -C12	1.793	1.27	-7.1	0.00
	1.793	1.23	-5.1	0.00
	1.7836(3)	1.13 ( 3)	1.1 ( 1)	0.08
CL7 -C13	1.780	1.31	-7.7	0.00
	1.780	1.27	-5.6	0.00
	1.7693(3)	1.19 ( 4)	0.8 ( 1)	0.12

Bindung	Länge	$\rho$	$\nabla^2\rho$	$\epsilon$
CL8 –C14	1.792	1.27	-7.1	0.00
	1.792	1.23	-5.1	0.00
	1.7866(3)	1.12 ( 3)	1.9 ( 1)	0.07
CL9 –C15	1.792	1.28	-7.2	0.00
	1.792	1.24	-5.2	0.00
	1.7861(3)	1.10 ( 4)	0.9 ( 1)	0.05
CL10 –C16	1.792	1.28	-7.2	0.00
	1.792	1.24	-5.2	0.00
	1.7859(3)	1.20 ( 3)	0.1 ( 1)	0.08
CL11 –C17	1.792	1.27	-7.1	0.00
	1.792	1.23	-5.1	0.00
	1.7879(3)	1.17 ( 3)	0.4 ( 1)	0.06
CL12 –C18	1.780	1.31	-7.6	0.00
	1.780	1.26	-5.6	0.00
	1.7738(3)	1.29 ( 3)	-1.0 ( 1)	0.16
CL13 –C19	1.793	1.27	-7.1	0.00
	1.793	1.23	-5.1	0.00
	1.7891(5)	1.23 ( 3)	0.3 ( 1)	0.07
CL14 –C20	1.791	1.28	-7.2	0.00
	1.791	1.24	-5.2	0.00
	1.7896(5)	1.15 ( 3)	2.0 ( 1)	0.19
CL15 –C21	1.792	1.28	-7.2	0.00
	1.792	1.24	-5.2	0.00
	1.7840(5)	1.130 ( 3)	1.9.7 ( 1)	0.16

Tabelle A.22: Bindungstopologische Parameter für  $C_{60}Cl_{30}$ .  $\rho_{bcp}$  [ $e\text{\AA}^{-3}$ ] und  $\nabla^2 \rho_{bcp}$  [ $e\text{\AA}^{-5}$ ] bezeichnen die Elektronendichte und Laplacefunktion am bindungskritischen Punkt,  $\epsilon$  die Bindungselliptizität,  $l$  [ $\text{\AA}$ ] die Bindungslänge. Ersten Zeile: HF/6-31G\*; Zweite Zeile: B3LYP/6-31G\*; Dritte Zeile: experimentelle Ergebnisse.