A.1 Morphin

| Run | 2θ | ω | ϕ | χ | ϕ -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) | $\mathrm{C}(7)$ | 1 |
| O(3) | C(4) | -1 | $\mathrm{C}(7)$ | 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 $1 \cdot 10^4 \text{\AA}^2$.

| 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) | Х | O(2) | H(21) | Y |
| O(3) | C(4) | Х | O(3) | C(5) | Υ |
| O(4) | DUM0 | Х | O(4) | H(42) | Υ |
| N(1) | C(9) | Z | N(1) | C(16) | Υ |
| C (1) | C (11) | Х | C (1) | C(2) | Υ |
| C(2) | C (1) | Х | C(2) | C(3) | Υ |
| C(3) | C(2) | Х | C(3) | O (1) | Υ |
| C(4) | C(12) | Х | C(4) | O(3) | Υ |
| C(5) | C(6) | Z | C(5) | O(3) | Υ |
| C(6) | C(7) | Z | C(6) | O(2) | Υ |
| C(7) | C(6) | Х | C(7) | C(8) | Υ |
| C (8) | C(14) | Х | C(8) | C(7) | Υ |
| C(9) | C(14) | Ζ | C(9) | N(1) | Υ |
| C(10) | C(9) | Х | C (10) | C (11) | Υ |
| C (11) | C(12) | Х | C(11) | C(1) | Υ |
| C(12) | C(4) | Х | C(12) | C (11) | Υ |
| C(13) | C(12) | Z | C(13) | C(15) | Υ |
| C(14) | C(13) | Z | C(14) | C(8) | Υ |
| C(15) | C(13) | Z | C(15) | C(16) | Υ |
| C(16) | C(15) | Z | C(16) | N(1) | Υ |
| C(17) | N(1) | Z | C(17) | C(16) | Υ |
| H(1) | C(1) | Z | H(1) | C(2) | Υ |
| H(2) | C(2) | Z | H(2) | C (1) | Υ |
| H(5) | C(5) | Z | H(5) | O(3) | Υ |
| H(6) | C(6) | Z | H(6) | O(2) | Υ |
| H(7) | C(7) | Z | H(7) | C(8) | Υ |
| H(8) | C(8) | Z | H(8) | C(14) | Υ |
| H(9) | C(9) | Z | H(9) | N(1) | Υ |
| H(10A) | C(10) | Z | H(10A) | C(9) | Υ |
| H(10B) | C(10) | Z | H(10B) | C(9) | Υ |
| H(11) | O (1) | Z | H(11) | C(3) | Υ |
| H(14) | C(14) | Ζ | H(14) | C(8) | Υ |
| H(15A) | C(15) | Z | H(15A) | C(16) | Υ |
| H(15B) | C(15) | Z | H(15B) | C(16) | Υ |
| H(16A) | C(16) | Z | H(16A) | C(15) | Υ |
| H(16B) | C(16) | Ζ | H(16B) | C(15) | Υ |
| H(17A) | C(17) | Z | H(17A) | N(1) | Υ |
| H(17B) | C(17) | Z | H(17B) | N(1) | Y |
| H(17C) | C(17) | Z | H(17C) | N(1) | Y |
| H(21) | O(2) | Ζ | H(21) | C (6) | Υ |
| H(41) | O (4) | Z | H(41) | O(3) | Υ |
| H(42) | O(4) | Ζ | H(42) | O(3) | Υ |

Die Achse1,Achse2Ebene ist durch die Atom $0\text{-}\mathrm{Atom}$ und Atom $2\text{-}\mathrm{Atom}$ l 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 | 2θ | ω | ϕ | χ | ϕ -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 hochaufgelösten 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) | $\mathrm{C}(7)$ | -1 |
| O(3) | C(4) | -2 | $\mathrm{C}(7)$ | $\mathrm{C}(8)$ | -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 $1 \cdot 10^4 \text{\AA}^2$.

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

Die Achse1,Achse2Ebene ist durch die Atom $0\text{-}\mathrm{Atom}$ und Atom $2\text{-}\mathrm{Atom}$ l 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 | 2θ | ω | ϕ | χ | ϕ -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 |
| $\mathrm{C}(7)$ | 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 $1 \cdot 10^4 \text{\AA}^2$.

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

Die Achse1,Achse2Ebene ist durch die Atom $0\text{-}\mathrm{Atom}$ und Atom $2\text{-}\mathrm{Atom}$ 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 | 2θ | ω | ϕ | χ | $\phi\text{-Inkrement}$ | 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 |
| $\overline{7}$ | -50.0 | 0.0 | 1.0 | 54.0 | 3.0 | 120 | 200s |

Tabelle A.10: Messstrategie der hochaufgelösten 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) | $\hat{C(7)}$ | 4 | C(5A) | $\dot{C}(6A)$ | -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 |
| $\dot{N}(1)$ | $\dot{C}(9)$ | 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 |
| $\mathbf{C}(1)$ | $\dot{C}(2)$ | -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 |
| $\mathrm{C}(3)$ | 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) | Х | O(1) | H(11) | Y |
| O(2) | C(6) | Х | O(2) | C(5) | Y |
| O(3) | C(4) | Х | O(3) | C(5) | Y |
| O(4) | C(14) | Х | O(4) | H(41) | Y |
| O(1W) | H(1W) | Х | 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) | | C(2) | C(3) | Y V |
| C(3) | C(2) | Λ V | C(3) | O(1) | I V |
| C(4) | C(12) | Λ 7 | C(4) | O(3) | I V |
| C(3) | C(0) | X X | C(5) | O(3) | I V |
| C(0) | C(f) | Z | C(0) | C(8) | V I |
| C(8) | C(14) | Z | C(8) | $\mathbf{C}(0)$ | Ý |
| $\mathbf{C}(9)$ | C(14) | Z | $\mathbf{C}(9)$ | $\mathbf{N}(1)$ | Ý |
| C(10) | C(9) | Ā | C(10) | C(11) | Ŷ |
| $\dot{C(11)}$ | C(12) | Х | $\mathbf{C}(11)$ | $\dot{C}(1)$ | Y |
| $\dot{C(12)}$ | $\dot{C}(4)$ | Х | $\dot{C(12)}$ | 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) | | C(18) | H(18) | Y V |
| C(19) | C(20) | Λ V | C(19) | C(18) | Y V |
| H(1) | C(19) | Λ | H(1) | C(10) | I V |
| H(2) | C(1) | Z | H(2) | C(2) | V I |
| H(41) | O(4) | Z | H(41) | C(14) | Ý |
| H(5) | C(5) | Z | H(5) | O(3) | Ý |
| H(71) | $\mathbf{C}(7)$ | Z | H(71) | C(8) | Ŷ |
| 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 V |
| п(101) П(169) | C(10) | ム フ | $\Pi(101)$ $\Pi(160)$ | C(15) | ľ V |
| H(102) H(171) | C(10) C(17) | ム 7 | H(102) H(171) | $\mathbf{U}(10)$ $\mathbf{N}(1)$ | I V |
| H(172) | C(17) | ∠ 7 | H(172) | N(1) | I V |
| H(18) | C(17) | Z | H(18) | C(20) | Y |
| H(191) | C(19) | Z | H(191) | C(20) | Ý |
| H(192) | C(19) | Z | H(192) | C(20) | Ÿ |
| H(201) | $\dot{C(20)}$ | Ζ | H(201) | C (19) | Y |
| $\dot{H(202)}$ | C (20) | Ζ | 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 | 2θ | ω | ϕ | χ | $\phi\text{-Inkrement}$ | 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) | $\mathrm{C}(7)$ | 8 |
| O(2) | C(6) | -9 | $\mathrm{C}(7)$ | 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 $1 \cdot 10^4 \text{Å}^2$.

| Atom | Atom 0 | Achse 1 | Atom 1 | Atom 2 | Achse 2 |
|------------------|-----------------|---------|------------------|-------------------------------------|---------|
| O (1) | C(3) | Ζ | O (1) | H(11) | Y |
| O(2) | C(6) | Z | O(2) | C(7) | Y |
| O(3) | C(4) | | O(3) | C(5) H(41) | Y V |
| O(4) O(5) | C(14) C(21) | X | O(4) O(5) | O(6) | Ý |
| O(6) | C(21) | Z | O (6) | O(5) | Ý |
| O(7) | H(772) | Z | O(7) | H(771) | Y |
| O(10) | O(11) | Z | O(10) | H(121) | Y |
| $\mathbf{C}(1)$ | C(10) C(11) | X | $\mathbf{C}(1)$ | C(17) C(2) | V I |
| $\tilde{C}(2)$ | C(3) | X | $\tilde{C}(2)$ | $\tilde{C}(1)$ | Ŷ |
| C(3) | C(2) | Х | C(3) | C(4) | Y |
| C(4) | C(3) | X | C(4) | C(12) | Y |
| C(5) C(6) | O(2) | X | C(5) | C(3) | Y I |
| C(0) | C(6) | Z | C(7) | C(8) | Ý |
| C(8) | C(7) | Ζ | C(8) | C(14) | Y |
| C(9) | C(14) | Z | C(9) | N(1) | Y |
| C(10) C(11) | C(9) | Z X | C(10) C(11) | C(11) | Y V |
| C(11) C(12) | C(12) C(4) | X | C(11) C(12) | C(11) | Ý |
| C(13) | C(12) | Z | C(13) | C(15) | Y |
| C(14) | O(4) | Z | C(14) | C(8) | Y |
| C(15) C(16) | C(13) C(15) | | C(15) C(16) | $\mathbf{C}(16)$ $\mathbf{N}(1)$ | Y V |
| C(10) C(17) | N(1) | Z | C(10) C(17) | C(18) | Ý |
| C(18) | C(17) | Х | C(18) | H(181) | Y |
| C(19) | C(18) | X | C(19) | C(20) | Y |
| C(20) C(21) | O(18) | | C(20) C(21) | O(19) | Y V |
| H(1) | $\mathbf{C}(1)$ | Z | H(1) | $\mathbf{C}(2)$ | Ý |
| H(2) | C(2) | Z | H(2) | C(1) | Y |
| H(5) | C(5) | Z | H(5) | O(3) | Y |
| H(11) | O(1) | | H(11) | C(3) | Y |
| H(41) | O(4) | Z | H(41) | C(14) | Ý |
| H(71) | C(7) | Ζ | H(71) | C(8) | Y |
| H(72) | C(7) | Z | H(72) | C(8) | Y |
| H(81) H(82) | C(8) | | H(81) H(82) | C(7) | Y V |
| H(101) | C(10) | Z | H(101) | C(9) | Ý |
| H(102) | C (10) | Z | H(102) | C(9) | Y |
| H(111) | N(1) | Z | H(111) | C(9) | Y |
| H(121) H(122) | O(10) O(11) | | H(121) H(122) | O(11) O(10) | Y V |
| H(122) H(151) | C(11) | Z | H(151) | C(10) | Ý |
| H(152) | C(15) | Ζ | H(152) | C(16) | Υ |
| H(161) | C(16) | Z | H(161) | C(15) | Y |
| H(162) H(171) | C(10) | Z 7 | H(162) H(171) | C(15) N(1) | Y V |
| H(172) | C(17) C(17) | Z | H(172) | N(1) | Ý |
| H(181) | Č(18) | Z | H(181) | C(20) | Ÿ |
| H(191) | C(19) | Z | H(191) | C(20) | Y |
| H(192) | C(19) | Z | H(192) H(201) | C(20) | Y V |
| H(201) | C(20) C(20) | | H(201) H(202) | C(19) C(19) | Y |
| H(211) | $\tilde{C}(21)$ | Z | H(211) | O(6) | Ŷ |
| 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 | 2θ | ω | ϕ | χ | ϕ -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 | $\mathrm{C}(7)$ | $\mathrm{C}(8)$ | -1 |
| N(1) | C(9) | 2 | $\mathrm{C}(8)$ | 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 $1 \cdot 10^4 \text{\AA}^2$.

| 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 $C(2)$ $C(11)$ X $C(2)$ $C(3)$ Y $C(3)$ $C(2)$ X $C(4)$ $C(23)$ Y $C(4)$ $C(12)$ X $C(4)$ $C(3)$ Y $C(5)$ $C(6)$ Z $C(5)$ C(11) Y $C(6)$ $C(5)$ Z $C(6)$ C(7) Y $C(7)$ $C(6)$ Z $C(7)$ $C(8)$ $C(11)$ Y $C(10)$ $C(9)$ Z $C(10)$ $C(11)$ Y $C(11)$ $C(12)$ Z $C(13)$ Z $C(13)$ Z $C(14)$ $C(13)$ Z $C(13)$ Z $C(14)$ Z $C(15)$ Z $C(16)$ $N(1)$ <t< th=""><th>Atom</th><th>Atom 0</th><th>Achse 1</th><th>Atom 1</th><th>Atom 2</th><th>Achse 2</th></t<> | Atom | Atom 0 | Achse 1 | Atom 1 | Atom 2 | Achse 2 |
|---|---------------|--------------|---------|---------------|---------------|---------|
| 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(10) C(9) Z C(10) C(11) Y C(11) C(12) Z C(13) C(12) C(14) Y C(13) C(12) Z C(13) C(14) Y Y C(14) C(13) Z C(14) C(8) Y C(14) C(13) Z C(16) N(1) Y C(14) C(13) Z C(16) <td>O(1)</td> <td>C(3)</td> <td>Х</td> <td>O(1)</td> <td>C(18)</td> <td>Y</td> | O(1) | C(3) | Х | O (1) | C(18) | Y |
| C(1) C(1) 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(3) O(1) Y C(4) C(12) X C(4) C(3) Y C(5) C(12) X C(4) C(3) Y C(6) C(5) Z C(6) C(11) Y C(7) C(6) Z C(7) C(8) Y C(10) C(9) Z C(10) C(11) Y C(11) C(12) Z C(13) C(15) Y C(11) C(13) Z C(14) C(8) Y C(15) C C(13) Z C(16) Y C(16) C(13) Z C(16) N(1) Y C(16) C(13) Z C(16) N(1) Y | N(1) | C(9) | Ζ | N(1) | C(16) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C(1) | C(11) | Х | C(1) | C(2) | 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(6) C(5) Z C(6) C(7) Y C(7) C(6) Z C(7) C(8) Y C(9) C(14) Z C(9) N(1) Y C(10) C(12) X C(11) C(11) Y C(11) C(12) Z C(13) C(15) Y C(14) C(13) Z C(14) C(8) Y C(15) C(13) Z C(16) N(1) Y C(16) C(13) Z C(16) N(1) Y C(16) C(13) Z C(16) N(1) Y C(16) C(1) Z H(1) C(2) Y H(1) C(1) Z H(2) C(1) Y | C(2) | C (1) | Х | C(2) | C(3) | Υ |
| 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) Z C(13) C(15) Y C(13) C(12) Z C(13) Z C(16) Y C(14) C(13) Z C(15) C(16) Y Y C(16) C(15) Z C(16) N(1) Y C(18) C(1) Z H(2) C(12) Y H(1) C(1) Z H(2) C(1) Y H(10) C(1) Z H(2) C(1) Y H(10) C(1) Z H(2) C(1) | C(3) | C(2) | Х | C(3) | O (1) | Υ |
| C(5) C(6) Z C(5) Z 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(12) Y C(13) C(12) Z C(13) C(15) Y C(14) C(13) Z C(14) C(8) Y C(13) C(13) Z C(16) N(1) Y C(16) C(13) Z C(16) N(1) Y C(14) C(1) Z H(1) C(2) Y H(1) C(1) Z H(1) C(2) Y H(1) C(1) Z H(2) Y | C(4) | C(12) | Х | C (4) | C(3) | Υ |
| 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(12) X C(11) C(11) Y C(11) C(12) X C(11) C(12) Y C(13) C(12) Z C(13) Y C(14) C(14) C(13) Z C(15) Y C(16) Y C(14) C(13) Z C(15) C(16) Y Y C(16) C(13) Z C(17) C(16) Y Y C(16) C(1) Z H(1) C(2) Y Y H(1) C(1) Z H(2) C(1) Y H(4) C(4) Z H(4) C(12) Y H(14) C(14) | C(5) | C (6) | Ζ | C(5) | C(13) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C(6) | C(5) | Ζ | C (6) | C(7) | Υ |
| 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(16) Y C(16) Y C(15) C(16) N(1) Y Y C(16) Y Y C(16) C(15) Z C(16) N(1) Y Y C(16) C(15) Z C(16) Y Y H(1) Y C(18) O(1) Z H(2) C(2) Y H(1) Y H(1) C(14) Z H(2) C(1) Y Y H(10) C(10) Z H(2) | C(7) | C(6) | Ζ | C(7) | C(8) | Υ |
| 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(16) N(1) 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(10) C(10) Z H(2) C(1) <td< td=""><td>C(8)</td><td>C(7)</td><td>Ζ</td><td>C(8)</td><td>C(14)</td><td>Υ</td></td<> | C(8) | C(7) | Ζ | C(8) | C(14) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C(9) | C(14) | Ζ | C(9) | N (1) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C (10) | C(9) | Ζ | C (10) | C (11) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C (11) | C(12) | Х | C(11) | C (1) | Υ |
| $\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $ | C(12) | C(11) | Х | C(12) | C(4) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C(13) | C(12) | Ζ | C(13) | C(15) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C(14) | C(13) | Z | C(14) | C(8) | Υ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | C(15) | C(13) | Z | C(15) | C(16) | Υ |
| 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(2) C(12) Y H(9) C(9) Z H(9) N(1) Y H(14) C(14) Z H(14) C(9) 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(61) C(5) Y H(61) C(6) Z H(61) C(5) Y H(71) C(7) Z H(71) C(8) Y H(81) C(8) Z H(81) C(7) Y H(81) C(10) Z H(101) C(9) Y H(101) C(15) Z H(161) C(13) Y <t< td=""><td>C(16)</td><td>C(15)</td><td>Z</td><td>C(16)</td><td>N(1)</td><td>Υ</td></t<> | C(16) | C(15) | Z | C(16) | N(1) | Υ |
| 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(61) C(5) Y H(61) C(6) Z H(61) C(5) Y H(71) C(7) Z H(71) C(8) Y H(71) C(7) Z H(71) C(8) Y H(81) C(8) Z H(81) C(7) Y H(81) C(10) Z H(101) C(9) Y H(101) C(10) Z H(102) C(13) Y H(152) C(15) Z H(151) C(13) Y | C(17) | N(1) | Ζ | 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 $H(4)$ $C(4)$ 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 $H(151)$ $C(5)$ 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 $H(72)$ $C(8)$ Y $H(72)$ $C(7)$ Z $H(72)$ $C(8)$ Y $H(81)$ $C(8)$ Z $H(81)$ $C(7)$ 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 $H(161)$ $C(16)$ Z $H(162)$ $N(1)$ Y $H(162)$ $C(16)$ Z $H(162)$ $N(1)$ Y $H(172)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(173)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(181)$ $C(18)$ Z $H(183)$ $O(1)$ Y $H(182)$ $C(18)$ Z $H(183)$ $O(1)$ Y | C(18) | O(1) | Z | C(18) | C(4) | Υ |
| H(2)C(2)ZH(2)C(1)YH(4)C(4)ZH(4)C(12)YH(9)C(9)ZH(9)N(1)YH(14)C(14)ZH(14)C(9)YH(51)C(5)ZH(51)C(6)YH(52)C(5)ZH(52)C(6)YH(61)C(6)ZH(61)C(5)YH(62)C(6)ZH(62)C(5)YH(71)C(7)ZH(71)C(8)YH(72)C(7)ZH(72)C(8)YH(81)C(8)ZH(81)C(7)YH(101)C(10)ZH(101)C(9)YH(102)C(10)ZH(102)C(13)YH(161)C(15)ZH(161)N(1)YH(161)C(16)ZH(161)N(1)YH(162)C(16)ZH(162)N(1)YH(161)C(16)ZH(162)N(1)YH(162)C(16)ZH(162)N(1)YH(162)C(16)ZH(162)N(1)YH(161)C(17)ZH(171)N(1)YH(172)C(17)ZH(173)N(1)YH(173)C(17)ZH(173)N(1)YH(181)C(18)ZH(181)O(1)YH(183)C(18)ZH(183)O(1)Y< | H(1) | C(1) | Z | H(1) | C(2) | Υ |
| H(4)C(4)ZH(4)C(12)YH(9)C(9)ZH(9)N(1)YH(14)C(14)ZH(14)C(9)YH(14)C(14)ZH(14)C(9)YH(51)C(5)ZH(51)C(6)YH(52)C(5)ZH(51)C(6)YH(61)C(6)ZH(61)C(5)YH(62)C(6)ZH(62)C(5)YH(71)C(7)ZH(71)C(8)YH(72)C(7)ZH(72)C(8)YH(81)C(8)ZH(81)C(7)YH(82)C(8)ZH(81)C(7)YH(101)C(10)ZH(101)C(9)YH(102)C(10)ZH(101)C(9)YH(151)C(15)ZH(151)C(13)YH(161)C(16)ZH(161)N(1)YH(162)C(16)ZH(162)N(1)YH(171)C(17)ZH(171)N(1)YH(172)C(17)ZH(173)N(1)YH(181)C(18)ZH(182)O(1)YH(182)C(18)ZH(183)O(1)YH(183)C(18)ZH(183)O(1)Y | H(2) | C(2) | Z | H(2) | C(1) | 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 $H(81)$ $C(8)$ 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 $H(161)$ $N(1)$ Y $H(161)$ $C(16)$ Z $H(161)$ $N(1)$ Y $H(171)$ $C(17)$ Z $H(172)$ $N(1)$ Y $H(173)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(181)$ $C(18)$ Z $H(182)$ $O(1)$ Y $H(183)$ $C(18)$ Z $H(183)$ $O(1)$ Y | H(4) | C(4) | Z | H(4) | C(12) | Υ |
| 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 $H(161)$ $C(16)$ Z $H(161)$ $N(1)$ Y $H(162)$ $C(16)$ Z $H(161)$ $N(1)$ Y $H(171)$ $C(17)$ Z $H(171)$ $N(1)$ Y $H(173)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(181)$ $C(18)$ Z $H(182)$ $O(1)$ Y $H(183)$ $C(18)$ Z $H(183)$ $O(1)$ Y | H(9) | C(9) | Z | H(9) | N(1) | Υ |
| H(51) $C(5)$ Z $H(51)$ $C(6)$ Y $H(52)$ $C(5)$ Z $H(51)$ $C(6)$ 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 $H(71)$ $C(7)$ 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 $H(81)$ $C(7)$ Y $H(101)$ $C(10)$ Z $H(101)$ $C(9)$ Y $H(102)$ $C(10)$ Z $H(101)$ $C(9)$ Y $H(151)$ $C(15)$ Z $H(152)$ $C(13)$ 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 $H(171)$ $N(1)$ Y $H(172)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(173)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(181)$ $C(18)$ Z $H(182)$ $O(1)$ Y $H(183)$ $C(18)$ Z $H(183)$ $O(1)$ Y | H(14) | C(14) | Z | H(14) | C(9) | Υ |
| 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 $H(161)$ $N(1)$ Y $H(161)$ $C(16)$ Z $H(162)$ $N(1)$ Y $H(172)$ $C(17)$ Z $H(171)$ $N(1)$ Y $H(172)$ $C(17)$ Z $H(171)$ $N(1)$ Y $H(162)$ $C(16)$ Z $H(162)$ $N(1)$ Y $H(173)$ $C(17)$ Z $H(173)$ $N(1)$ Y $H(181)$ $C(18)$ Z $H(182)$ $O(1)$ Y $H(183)$ $C(18)$ Z $H(183)$ $O(1)$ Y | H(51) | C(5) | Z | H(51) | 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 $H(81)$ $C(7)$ 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 $H(152)$ $C(13)$ Y $H(152)$ $C(15)$ Z $H(161)$ $N(1)$ Y $H(161)$ $C(16)$ Z $H(162)$ $N(1)$ Y $H(162)$ $C(16)$ Z $H(171)$ $N(1)$ Y $H(172)$ $C(17)$ Z $H(172)$ $N(1)$ Y $H(173)$ $C(17)$ 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 | H(52) | C(5) | Z | H(52) | C(6) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(61) | C(6) | Z | H(61) | C(5) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(62) | C(6) | Z | H(62) | C(5) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(71) | C(7) | Z | H(71) | C(8) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(72) | C(7) | Z | H(72) | C(8) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(81) | C(8) | Z | H(81) | C(7) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(82) | C(8) | Z | H(82) | C(7) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(101) | C(10) | Ζ | H(101) | C(9) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(102) | C(10) | Ζ | H(102) | C(9) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(151) | C(15) | Z | H(151) | C(13) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(152) | C(15) | Z | H(152) | C(13) | Y |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(161) | C(16) | _ Z | H(161) | N(1) | Ÿ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(162) | C(16) | Z | H(162) | N(1) | Ŷ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(171) | C(17) | Z | H(171) | N(1) | Ŷ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(172) | C(17) | Z | H(172) | N(1) | Ŷ |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(173) | C(17) | 7. | H(173) | N(1) | v |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(181) | C(18) | 7 | H(181) | O(1) | ı V |
| $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ | H(189) | C(10) | 7 | H(182) | O(1) | ı V |
| | H(183) | C(10) | 7. | H(183) | O(1) | I V |

Die Achse1, Achse2Ebene ist durch die Atom0-Atomund Atom2-Atoml Vektoren

definiert. Die dritte Achse steht senkrecht auf ihr und bildet ein Rechtssystem.

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

A.6 $C_{60}Cl_{30}$

| Run | 2θ | ω | ϕ | χ | ϕ -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 |
| $\overline{7}$ | -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: Mess
strategie der hochaufgelösten Messung von $\mathrm{C}_{60}\mathrm{Cl}_{30}$

| 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) | $\hat{C}(6)$ | -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) | $\dot{C}(7)$ | 4 | C(19) | C(20) | 2 |
| Cl(9) | $\dot{C(15)}$ | 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) | $\dot{C(17)}$ | 5 | C(8) | $\dot{C}(9)$ | 0 | C(22) | $\dot{C(23)}$ | 1 |
| Cl(12) | C(18) | 4 | C(8) | C(24) | -3 | C(23) | $\dot{C(24)}$ | -2 |
| Cl(13) | $\dot{C(19)}$ | 4 | C(9) | C(10) | 2 | C(24) | C(25) | 2 |
| Cl(14) | $\dot{C(20)}$ | 8 | C(10) | C(11) | 0 | C(25) | $\dot{C(26)}$ | 0 |
| Cl(15) | $\dot{C(21)}$ | 6 | $\dot{C(10)}$ | C(26) | -1 | C(26) | $\dot{C(27)}$ | -2 |
| $\dot{C(1)}$ | $\dot{C(2)}$ | 1 | C(11) | $\dot{C(12)}$ | -1 | C(27) | $\dot{C(28)}$ | -1 |
| C(1) | C(6) | 1 | C(11) | C(28) | -1 | C(28) | $\dot{C(29)}$ | -1 |
| C(1) | C(9) | 2 | C(12) | C(13) | 1 | C(29) | $\dot{C(30)}$ | 0 |
| $\dot{C(2)}$ | $\dot{C(3)}$ | 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) | Ζ | CL(1) | C (6) | Y |
| CL(2) | C(8) | Ζ | CL(2) | C(24) | Υ |
| CL(3) | C (9) | Z | CL(3) | C (1) | Υ |
| CL(4) | C(10) | Z | CL(4) | C(26) | Υ |
| CL(5) | C(11) | Ζ | CL(5) | C(28) | Υ |
| CL(6) | C(12) | Ζ | CL(6) | C(2) | Υ |
| CL(7) | C(13) | Z | CL(7) | C(30) | Υ |
| CL(8) | C(14) | Z | CL(8) | C(3) | Υ |
| CL(9) | C(15) | Z | CL(9) | C(14) | Υ |
| 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) | Υ |
| 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) | Υ |
| C(1) | C(2) | Z | C (1) | C(6) | Υ |
| 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) | Υ |
| C(5) | C(6) | Z | C(5) | C(4) | Υ |
| C(6) | C(5) | Z | C(6) | C (1) | Y |
| C(7) | C(6) | Z | C(7) | C(21) | Υ |
| C(8) | C(24) | Z | C(8) | C(9) | Υ |
| C(9) | C (1) | Z | C(9) | C(10) | Υ |
| C(10) | C(26) | Z | C(10) | C(9) | Υ |
| C(11) | C(28) | Z | C (11) | C(12) | Υ |
| C(12) | C(2) | Z | C(12) | C(11) | Υ |
| C(13) | C(30) | Z | C(13) | C(12) | Υ |
| C(14) | C(3) | Z | C(14) | C(15) | Υ |
| C(15) | C(14) | Z | C(15) | C(16) | Υ |
| 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) | Ζ | C(23) | C(24) | Y |
| C(24) | C(23) | Ζ | C(24) | C(25) | Y |
| C(25) | C(26) | Ζ | C(25) | C(24) | Y |
| C(26) | C(25) | Ζ | C(26) | C(27) | Υ |
| C(27) | C(28) | Ζ | C(27) | C(26) | Υ |
| C(28) | C(29) | Ζ | C(28) | C(27) | Y |
| C(29) | C(28) | Ζ | C(29) | C(30) | Υ |
| 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.

| Bindung | Länge | ρ | $ abla^2 ho$ | ϵ |
|----------|----------------------------|-------------------|-------------------|------------|
| 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 | 1.80 | -16.8 | 0.02 |
| | 1.4808(3) | 1.95(4) | -1(.(1)) | 0.05 |
| U7 –U8 | 1.024 | 1.50 | -12.4 | 0.02 |
| | 1.024 1.6209(2) | 1.45 | -9.9 6 9 (1) | 0.02 |
| 07 001 | 1.0308(3) 1.579 | 1.44 (4) 1.69 | -0.3 (1) 14 4 | 0.08 |
| 07-021 | 1.078 | 1.0Z | -14.4 11 6 | 0.02 |
| | $1.0(\delta)$ 1 EQ2E(E) | 1.00 1.50(0) | -11.0 11.9 (1) | 0.02 |
| | 1.9999(9) | 1.09(2) | -11.0 (1) | 0.01 |

| Bindung | Länge | 0 | $\nabla^2 a$ | F |
|-----------------|--------------------|-------------------|---------------------|--------------|
| C8 - C9 | 1 623 | <u> </u> | -12.4 | 0.02 |
| | 1 623 | 1 43 | _0 0 | 0.02 0.02 |
| | 1.025 1.6264(3) | 1.49 1 39 (4) | -7.2(1) | 0.02 |
| C8 - C24 | 1.0204(0) 1 494 | 1.87 | -19.0 | 0.11 0.02 |
| 00 021 | 1.191 | 1.01 | -15.7 | 0.02 |
| | 1.191 1 4988(5) | 1.75 1.76 (5) | -120(1) | 0.02 0.03 |
| C9 - C10 | 1.578 | 1.62 | -14.4 | 0.02 |
| 00 010 | 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 |
| | 1.3/8 1.5917(4) | 1.00 | -11.(| 0.02 |
| $O_{1}E O_{1}C$ | 1.3817(4) | 1.00(4) | -10.0 (1) | 0.10 |
| C13 - C10 | 1.087 | 1.32 1.26 | -9.8 | 0.03 |
| | 1.007 1.7044(3) | 1.20 1.26 (4) | -1.1 | 0.03 0.14 |
| C15 $C'23$ | 1.7044(3) 1.519 | 1.20(4) | -3.4(1) | 0.14 0.05 |
| 010-020 | 1.512 1.519 | 1.01 | -17.4 -17.5 | 0.00 |
| | 1.512 1.5120(2) | 1.74 1.78 (7) | -14.J _11 Q (9) | 0.04 |
| C16 - C17 | 1.578 | 1.69 | -14 A | 0.10 |
| | 1.578 | 1.52 | -14.4 -11 7 | 0.02 0.02 |
| | 1.5860(3) | 1.61 (<i>1</i>) | _11 <i>4</i> (1) | 0.02 0.1/ |
| C16 -C'25 | 1.5000(3) 1.512 | 1.82 | -17 9 | 0.14 |
| | 1.014 | 1.04 | 11.0 | 0.00 |

| Bindung | Länge | ρ | $ abla^2 ho$ | ϵ |
|------------|-----------|---------|---------------|------------|
| | 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 | ρ | $ abla^2 ho$ | ϵ |
|------------|-----------|----------|---------------|------------|
| | 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 | -1.1 | 0.00 |
| | 1.780 | 1.27 | -5.6 | 0.00 |
| | 1.7693(3) | 1.19 (4) | 0.8(1) | 0.12 |

| Bindung | Länge | ρ | $ abla^2 ho$ | ϵ |
|------------|-----------|-----------|---------------|------------|
| 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 $C_{60}Cl_{30}$. ρ_{bcp} [eÅ⁻³] und $\nabla^2 \rho_{bcp}$ [eÅ⁻⁵] bezeichnen die Elektronendichte und Laplacefunktion am bindungskritischen Punkt, ϵ die Bindungselliptizität, l[Å] die Bindungslänge. Ersten Zeile: HF/6-31G*; Zweite Zeile: B3LYP/6-31G*; Dritte Zeile: experimentelle Ergebnisse.