

# ANHANG A

## Parametertabellen

### A.1 Asparagin

Bindungen	HF/6-311++G(d,p)	Experiment
O(1)–C(2)	1.2292	1.2465(3)
O(2)–C(2)	1.2116	1.2661(4)
O(3)–C(4)	1.2085	1.2428(3)
N(1)–C(1)	1.5029	1.4907(3)
N(2)–C(4)	1.3391	1.3327(3)
C(1)–C(2)	1.5726	1.5359(3)
C(1)–C(3)	1.5261	1.5216(3)
C(3)–C(4)	1.5166	1.5182(4)
Winkel		
N(1)–C(1)–C(2)	105.5	110.4(1)
N(1)–C(1)–C(3)	112.5	111.1(1)
C(2)–C(1)–C(3)	113.5	114.2(1)
O(1)–C(2)–O(2)	132.9	125.9(1)
O(1)–C(2)–C(1)	112.6	118.0(1)
O(2)–C(2)–C(1)	114.4	115.9(1)
C(1)–C(3)–C(4)	110.2	113.1(1)
O(3)–C(4)–N(2)	123.6	123.1(1)
O(3)–C(4)–C(3)	119.2	120.5(1)
N(2)–C(4)–C(3)	117.2	116.4(1)
Torsionswinkel		
N(1)–C(1)–C(2)–O(1)	18.8	10.5(1)
N(1)–C(1)–C(2)–O(2)	–161.4	–174.1(1)
N(1)–C(1)–C(3)–C(4)	57.3	71.9(1)
C(3)–C(1)–C(2)–O(1)	142.4	136.6(1)
C(3)–C(1)–C(2)–O(2)	–37.7	–48.0(1)
C(2)–C(1)–C(3)–C(4)	–62.4	–53.8(1)
C(1)–C(3)–C(4)–O(3)	–68.7	3.9(1)
C(1)–C(3)–C(4)–N(2)	–249.2	–176.5(1)

**Tabelle A.1** Vergleich ausgewählter Bindungslängen, -winkel und Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM 0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
O(1)	C(2)	X	O(1)	O(2)	Y
O(2)	C(2)	X	O(2)	O(1)	Y
O(3)	C(4)	X	O(3)	N(2)	Y
O(4)	DUM0	Z	O(4)	H(9)	Y
N(1)	C(1)	Z	N(1)	H(1)	Y
N(2)	C(4)	Z	N(2)	H(7)	Y
C(1)	C(2)	Z	C(1)	O(1)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	N(1)	Y
C(3)	C(1)	Z	C(3)	C(4)	Y
C(4)	C(3)	Z	C(4)	N(2)	Y
H(1)	N(1)	Z	N(1)	C(1)	Y
H(2)	N(1)	Z	N(1)	C(1)	Y
H(3)	N(1)	Z	N(1)	C(1)	Y
H(4)	C(1)	Z	C(1)	C(2)	Y
H(5)	C(3)	Z	C(3)	C(4)	Y
H(6)	C(3)	Z	C(3)	C(4)	Y
H(7)	N(2)	Z	N(2)	C(4)	Y
H(8)	N(2)	Z	N(2)	C(4)	Y
H(9)	O(4)	Z	H(9)	H(10)	Y
H(10)	O(4)	Z	H(10)	H(9)	Y

**Tabelle A.2** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX 1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM 0-ATOM and ATOM 2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechthändiges System entsteht. DUM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.

## A.2 Glutaminsäure

Bindungen	HF/6-311++G(d,p)	Experiment
O(1)–C(2)	1.2448	1.2451(4)
O(2)–C(2)	1.2017	1.2708(4)
O(3)–C(5)	1.1830	1.2169(4)
O(4)–C(5)	1.3266	1.3331(4)
N(1)–C(1)	1.5099	1.4887(4)
C(1)–C(2)	1.5677	1.5299(3)
C(1)–C(3)	1.5248	1.5326(3)
C(3)–C(4)	1.5284	1.5267(4)
C(4)–C(5)	1.5072	1.5047(4)
Winkel		
N(1)–C(1)–C(2)	103.5	108.8(1)
N(1)–C(1)–C(3)	113.0	110.7(1)
C(2)–C(1)–C(3)	114.3	112.8(1)
O(1)–C(2)–O(2)	132.3	125.7(1)
O(1)–C(2)–C(1)	111.9	118.3(1)
O(2)–C(2)–C(1)	115.9	116.0(1)
C(1)–C(3)–C(4)	114.1	113.4(1)
C(3)–C(4)–C(5)	112.3	113.1(1)
O(3)–C(5)–O(4)	122.7	122.0(1)
O(3)–C(5)–C(4)	125.7	125.1(1)
O(4)–C(5)–C(4)	111.6	112.9(1)
Torsionswinkel		
N(1)–C(1)–C(2)–O(1)	0.6	2.2(1)
N(1)–C(1)–C(2)–O(2)	181.1	–177.6(1)
N(1)–C(1)–C(3)–C(4)	69.1	–68.3(1)
C(3)–C(1)–C(2)–O(1)	123.9	–120.9(1)
C(3)–C(1)–C(2)–O(2)	–55.6	59.3(1)
C(2)–C(1)–C(3)–C(4)	–48.9	53.7(1)
C(1)–C(3)–C(4)–C(5)	–175.1	166.0(1)
C(3)–C(4)–C(5)–O(3)	6.7	–2.1(1)
C(3)–C(4)–C(5)–O(4)	–174.2	178.5(1)

**Tabelle A.3** Vergleich ausgewählter Bindungslängen, -winkel und Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
O(1)	C(2)	X	O(1)	O(2)	Y
O(2)	C(2)	X	O(2)	O(1)	Y
O(3)	C(4)	X	O(3)	O(4)	Y
O(4)	C(4)	X	O(4)	H(7)	Y
O(5)	DUM0	Z	O(5)	H(10)	Y
N(1)	C(1)	Z	N(1)	H(1)	Y
C(1)	C(2)	Z	C(1)	O(1)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	N(1)	Y
C(3)	C(1)	Z	C(3)	C(4)	Y
C(4)	C(3)	Z	C(4)	O(4)	Y
C(5)	O(3)	Z	C(5)	O(4)	Y
H(1)	N(1)	Z	N(1)	C(1)	Y
H(2)	N(1)	Z	N(1)	C(1)	Y
H(3)	N(1)	Z	N(1)	C(1)	Y
H(4)	C(1)	Z	C(1)	C(2)	Y
H(5)	C(3)	Z	C(3)	C(4)	Y
H(6)	C(3)	Z	C(3)	C(4)	Y
H(7)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(8)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(9)	O(4)	Z	O(4)	C(4)	Y
H(10)	O(5)	Z	H(10)	H(11)	Y
H(11)	O(5)	Z	H(11)	H(10)	Y

**Tabelle A.4** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX 1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM0-ATOM und ATOM2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechtshändiges System entsteht. DUM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.

## A.3 Lysin

Bindungen	HF/6-311++G(d,p)	Experiment
O(1)–C(1)	1.2346	1.2523(6)
O(2)–C(1)	1.2111	1.2632(7)
N(1)–C(2)	1.5079	1.5336(6)
N(2)–C(6)	1.5218	1.4878(8)
C(1)–C(2)	1.5526	1.5336(6)
C(2)–C(3)	1.5355	1.5348(7)
C(3)–C(4)	1.5485	1.5294(6)
C(4)–C(5)	1.5418	1.5327(6)
C(5)–C(6)	1.5248	1.5215(6)
Winkel		
O(1)–C(1)–O(2)	131.6	125.2(1)
O(1)–C(1)–C(2)	112.7	117.4(1)
O(2)–C(1)–C(2)	115.4	117.4(1)
N(1)–C(2)–C(1)	104.9	108.7(1)
N(1)–C(2)–C(3)	108.6	108.7(1)
N(2)–C(6)–C(5)	109.8	111.0(1)
C(1)–C(2)–C(3)	110.7	109.8(1)
C(2)–C(3)–C(4)	114.6	113.8(1)
C(3)–C(4)–C(5)	116.3	112.1(1)
C(4)–C(5)–C(6)	115.2	112.1(1)
Torsionswinkel		
O(1)–C(1)–C(2)–C(3)	–86.9	–87.3(1)
O(2)–C(1)–C(2)–C(3)	88.0	89.9(1)
N(1)–C(2)–C(3)–C(4)	185.4	172.7(1)
N(1)–C(2)–C(1)–O(1)	30.1	31.5(1)
N(1)–C(2)–C(1)–O(2)	–155.1	–151.3(1)
C(4)–C(5)–C(6)–N(2)	184.6	170.1(1)
C(1)–C(2)–C(3)–C(4)	–60.0	–68.6(1)
C(2)–C(3)–C(4)–C(5)	–253.4	–177.4(1)
C(3)–C(4)–C(5)–C(6)	–72.8	–76.8(1)

**Tabelle A.5** Vergleich ausgewählter Bindungslängen, -winkel und Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM 0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
Cl(1)	H(2)	Z	Cl(1)	H(1)	Y
O(1)	C(1)	X	O(1)	O(2)	Y
O(2)	C(1)	X	O(2)	O(1)	Y
N(1)	C(2)	Z	N(1)	H(1)	Y
N(2)	C(6)	Z	N(2)	H(13)	Y
C(1)	C(2)	Z	C(1)	O(1)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	N(1)	Y
C(3)	C(2)	X	C(3)	C(4)	Y
C(4)	DUM1	Z	C(4)	C(3)	Y
C(5)	DUM2	Z	C(5)	C(6)	Y
C(6)	C(5)	X	C(6)	N(2)	Y
H(1)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(2)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(3)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(4)	C(2)	Z	C(2)	N(1)	Y
H(5)	C(3)	Z	C(3)	C(4)	Y
H(6)	C(3)	Z	C(3)	C(4)	Y
H(7)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(8)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(9)	C(5)	Z	C(5)	C(4)	Y
H(10)	C(5)	Z	C(5)	C(4)	Y
H(11)	C(6)	Z	C(6)	C(5)	Y
H(12)	C(6)	Z	C(6)	C(5)	Y
H(13)	N(2)	Z	N(2)	C(6)	Y
H(14)	N(2)	Z	N(2)	C(6)	Y
H(15)	N(2)	Z	N(2)	C(6)	Y

**Tabelle A.6** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX 1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM 0-ATOM and ATOM 2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechtshändiges System entsteht. DUM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.

## A.4 Prolin

Bindungen	HF/6-311++G(d,p)	Experiment
O(1)–C(1)	1.2392	1.2678(6)
O(2)–C(1)	1.2053	1.2524(6)
N(1)–C(2)	1.5126	1.5042(6)
N(1)–C(5)	1.4912	1.5002(6)
C(1)–C(2)	1.5624	1.5285(5)
C(2)–C(3)	1.5355	1.5478(6)
C(3)–C(4)	1.5319	1.5346(6)
C(4)–C(5)	1.5244	1.5230(6)
Winkel		
C(2)–N(1)–C(5)	108.8	107.5(1)
O(1)–C(1)–O(2)	132.6	125.8(1)
O(1)–C(1)–C(2)	112.5	117.4(1)
O(2)–C(1)–C(2)	114.8	116.8(1)
N(1)–C(2)–C(1)	105.9	110.6(1)
N(1)–C(2)–C(3)	104.9	105.0(1)
C(1)–C(2)–C(3)	114.6	111.6(1)
C(2)–C(3)–C(4)	104.6	105.1(1)
C(3)–C(4)–C(5)	102.9	102.8(1)
N(1)–C(5)–C(4)	103.5	102.3(1)
Torsionswinkel		
C(5)–N(1)–C(2)–C(1)	118.0	105.1(1)
C(5)–N(1)–C(2)–C(3)	–3.6	–15.5(1)
C(2)–N(1)–C(5)–C(4)	26.2	35.8(1)
O(1)–C(1)–C(2)–N(1)	–1.1	–5.2(1)
O(1)–C(1)–C(2)–C(3)	114.0	111.4(1)
O(2)–C(1)–C(2)–N(1)	179.8	176.4(1)
O(2)–C(1)–C(2)–C(3)	–65.1	–67.0(1)
N(1)–C(2)–C(3)–C(4)	–20.5	–10.7(1)
C(1)–C(2)–C(3)–C(4)	–136.2	–130.7(1)
C(2)–C(3)–C(4)–C(5)	36.4	32.3(1)
C(3)–C(4)–C(5)–N(1)	–38.3	–41.5(1)

**Tabelle A.7** Vergleich ausgewählter Bindungslängen, -winkel und Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
O(1)	C(1)	X	O(1)	O(2)	Y
O(2)	C(1)	X	O(2)	O(1)	Y
O(3)	DUM0	Z	O(3)	H(11)	Y
N(1)	C(2)	Z	N(1)	H(1)	X
C(1)	C(2)	Z	C(1)	N(1)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	O(1)	Y
C(3)	H(9)	Z	C(3)	H(8)	Y
C(4)	H(6)	Z	C(4)	H(7)	Y
C(5)	H(4)	Z	C(5)	H(5)	Y
H(1)	N(1)	Z	H(1)	H(2)	Y
H(2)	N(1)	Z	H(2)	H(1)	Y
H(3)	C(2)	Z	H(3)	N(1)	Y
H(4)	C(5)	Z	H(4)	H(5)	Y
H(5)	C(5)	Z	H(5)	H(4)	Y
H(6)	C(4)	Z	H(6)	H(7)	Y
H(7)	C(4)	Z	H(7)	H(6)	Y
H(8)	C(3)	Z	H(8)	H(9)	Y
H(9)	C(3)	Z	H(9)	H(8)	Y
H(10)	O(3)	Z	H(10)	H(11)	Y
H(11)	O(3)	Z	H(11)	H(10)	Y

**Tabelle A.8** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM 0-ATOM und ATOM 2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechtshändiges System entsteht. DUM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.

Formel	$C_5O_2NH_9 \cdot H_2O$
Kristallsystem	Orthorhombisch
Raumgruppe	<i>Pbca</i> (Nr. 61)
Z	8
a [Å]	5.253(3)
b [Å]	11.967(8)
c [Å]	19.830(17)
V [Å <sup>3</sup> ]	1246.6(15)
F(000)	576.0
D <sub>x</sub> [g·cm <sup>-3</sup> ]	1.419
Kristallgröße [mm <sup>3</sup> ]	0.50 × 0.22 × 0.11
Strahlung/Messplatz	Synchrotron/D3
λ [Å]	0.496
μ [mm <sup>-1</sup> ]	0.07
Temperatur [K]	100
Scan Typ	ω
Scan-Inkrement Δ2θΔω [°]	0.012
Schrittweite	61/41 Schritte
Zeit pro Schritt min/max [s]	0.1/0.5
hkl-Bereich	0 ≤ h ≤ 8 0 ≤ k ≤ 16 0 ≤ l ≤ 28
(sin θ/λ) <sub>max</sub> [Å <sup>-1</sup> ]	1.21
d [Å]	0.41
N <sub>gesamt</sub>	11608
N <sub>unique</sub>	9241
N <sub>unique</sub> (3σ)	7109
R <sub>int</sub>	0.0248

**Tabelle A.9** Kristallographische Daten und experimentelle Bedingungen der Messung mit Szintillationsdetektion.

## A.5 Serin

Bindungen	HF/6-311++G(d,p)	Experiment
O(2)–C(1)	1.2082	1.2630(3)
O(1)–C(1)	1.2335	1.2533(2)
O(3)–C(3)	1.4015	1.4198(3)
N(1)–C(2)	1.5004	1.4901(2)
C(3)–C(2)	1.5159	1.5226(2)
C(1)–C(2)	1.5717	1.5326(2)
Winkel		
O(3)–C(3)–C(2)	110.0	111.2(1)
O(2)–C(1)–O(1)	132.8	125.9(1)
O(2)–C(1)–C(2)	114.9	116.3(1)
O(1)–C(1)–C(2)	112.3	117.8(1)
N(1)–C(2)–C(3)	110.6	111.6(1)
N(1)–C(2)–C(1)	104.1	109.6(1)
C(3)–C(2)–C(1)	113.6	111.3(1)
Torsionswinkel		
O(3)–C(3)–C(2)–N(1)	–55.3	–69.0(1)
O(3)–C(3)–C(2)–C(1)	61.4	53.8(1)
O(2)–C(1)–C(2)–N(1)	158.7	179.0(1)
O(2)–C(1)–C(2)–C(3)	38.3	55.0(1)
O(1)–C(1)–C(2)–N(1)	–20.8	–2.2(1)
O(1)–C(1)–C(2)–C(3)	–141.1	–126.1(1)

**Tabelle A.10** Vergleich ausgewählter Bindungslängen, -winkel und Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM 0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
O(2)	C(1)	X	O(2)	O(1)	Y
O(1)	C(1)	X	O(2)	O(1)	Y
O(3)	C(3)	Z	O(3)	H(4)	Y
N(1)	C(2)	Z	N(1)	H(11)	X
C(3)	C(2)	Z	C(3)	O(3)	Y
C(1)	C(2)	Z	C(1)	O(1)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	N(1)	Y
H(4)	O(3)	Z	O(3)	C(3)	Y
H(32)	C(3)	Z	C(3)	O(3)	Y
H(31)	C(3)	Z	C(3)	O(3)	Y
H(2)	C(2)	Z	C(2)	C(1)	Y
H(11)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(13)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(12)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y

**Tabelle A.11** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX 1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM 0-ATOM und ATOM 2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechtshändiges System entsteht. DUM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.

## A.6 Valin

Bindungen	HF/6-311++G(d,p)	Experiment
O(1)–C(1)	1.2428	1.2593(2)
O(2)–C(1)	1.2034	1.2585(2)
N(1)–C(2)	1.5114	1.4917(2)
C(1)–C(2)	1.5720	1.5398(2)
C(2)–C(3)	1.5381	1.5454(2)
C(3)–C(4)	1.5314	1.5310(2)
C(3)–C(5)	1.5334	1.5273(3)
Winkel		
O(1)–C(1)–O(2)	131.8	125.9(1)
O(1)–C(1)–C(2)	112.2	117.3(1)
O(2)–C(1)–C(2)	116.0	116.8(1)
N(1)–C(2)–C(1)	103.3	109.5(1)
N(1)–C(2)–C(3)	111.1	110.0(1)
C(1)–C(2)–C(3)	115.8	112.5(1)
C(2)–C(3)–C(4)	111.0	112.3(1)
C(2)–C(3)–C(5)	112.5	110.7(1)
C(4)–C(3)–C(5)	111.2	110.8(1)
Torsionswinkel		
O(1)–C(1)–C(2)–N(1)	–3.3	157.6(1)
O(1)–C(1)–C(2)–C(3)	118.4	–79.7(1)
O(2)–C(1)–C(2)–N(1)	176.6	–23.3(1)
O(2)–C(1)–C(2)–C(3)	–61.8	99.4(1)
N(1)–C(2)–C(3)–C(4)	–164.9	81.8(1)
N(1)–C(2)–C(3)–C(5)	69.8	–153.7(1)
C(1)–C(2)–C(3)–C(4)	77.7	–40.6(1)
C(1)–C(2)–C(3)–C(5)	–47.6	83.8(1)

**Tabelle A.12** Vergleich ausgewählter Bindungslängen, -winkel und Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
O(1)	C(1)	X	O(1)	O(2)	Y
O(2)	C(1)	X	O(2)	O(1)	Y
N(1)	C(2)	Z	N(1)	H(1)	Y
C(1)	C(2)	Z	C(1)	N(1)	Y
C(2)	C(1)	Z	C(2)	N(1)	Y
C(3)	C(4)	X	C(3)	C(5)	Y
C(4)	C(3)	Z	C(4)	H(6)	Y
C(5)	C(3)	Z	C(5)	H(10)	Y
H(1)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(2)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(3)	N(1)	Z	N(1)	C(2)	Y
H(4)	C(2)	Z	C(2)	C(1)	Y
H(5)	C(3)	Z	C(3)	C(2)	Y
H(6)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(7)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(8)	C(4)	Z	C(4)	C(3)	Y
H(9)	C(5)	Z	C(5)	C(3)	Y
H(10)	C(5)	Z	C(5)	C(3)	Y
H(11)	C(5)	Z	C(5)	C(3)	Y

**Tabelle A.13** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX 1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM0-ATOM und ATOM2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechthändiges System entsteht. DUM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.



## A.7 Terbogrel

Bindungen	HF/6-31G(d,p)	Experiment
O(1)–C(2)	1.1923	1.2182(3)
O(3)–C(2)	1.3258	1.3260(3)
N(11)–C(10)	1.3198	1.3398(2)
N(11)–C(12)	1.3192	1.3410(3)
N(21)–C(19)	1.4135	1.4142(2)
N(21)–C(22)	1.3624	1.3695(2)
N(23)–C(22)	1.3378	1.3380(2)
N(23)–C(27)	1.4831	1.4840(2)
N(24)–C(22)	1.3020	1.3282(2)
N(24)–C(25)	1.3247	1.3059(3)
N(26)–C(25)	1.1436	1.1692(3)
C(2)–C(4)	1.5082	1.5122(3)
C(4)–C(5)	1.5330	1.5365(3)
C(5)–C(6)	1.5379	1.5393(3)
C(6)–C(7)	1.5070	1.5003(2)
C(7)–C(8)	1.3306	1.3490(2)
C(8)–C(9)	1.4949	1.4844(3)
C(8)–C(15)	1.4993	1.4921(2)
C(9)–C(10)	1.3914	1.3995(2)
C(9)–C(14)	1.3916	1.3994(2)
C(12)–C(13)	1.3851	1.3925(3)
C(13)–C(14)	1.3805	1.3907(3)
C(15)–C(16)	1.3886	1.3986(3)
C(15)–C(20)	1.3933	1.4023(2)
C(16)–C(17)	1.3861	1.3959(2)
C(17)–C(18)	1.3799	1.3915(2)
C(18)–C(19)	1.3909	1.4038(2)
C(19)–C(20)	1.3852	1.4012(2)
C(27)–C(28)	1.5337	1.5316(3)
C(27)–C(29)	1.5328	1.5308(2)
C(27)–C(30)	1.5331	1.5302(3)

Tabelle A.14 Vergleich ausgewählter Bindungslängen zwischen Theorie und Experiment.

Winkel	HF/6-31G(d,p)	Experiment
C(10)–N(11)–C(12)	118.0	118.8(1)
C(19)–N(21)–C(22)	131.0	126.9(1)
C(22)–N(23)–C(27)	126.4	125.5(1)
C(22)–N(24)–C(25)	118.1	121.9(1)
O(1)–C(2)–O(3)	121.6	122.9(1)
O(1)–C(2)–C(4)	125.2	123.7(1)
O(3)–C(2)–C(4)	113.1	113.3(1)
C(2)–C(4)–C(5)	114.7	110.8(1)
C(4)–C(5)–C(6)	113.9	112.1(1)
C(5)–C(6)–C(7)	112.9	111.4(1)
C(6)–C(7)–C(8)	128.9	128.0(1)
C(7)–C(8)–C(9)	120.2	119.7(1)
C(7)–C(8)–C(15)	123.3	122.8(1)
C(9)–C(8)–C(15)	116.5	117.5(1)
C(8)–C(9)–C(10)	121.6	121.7(1)
C(8)–C(9)–C(14)	121.7	121.1(1)
C(10)–C(9)–C(14)	116.7	117.1(1)
N(11)–C(10)–C(9)	124.3	123.3(1)
N(11)–C(12)–C(13)	123.1	122.2(1)
C(12)–C(13)–C(14)	118.4	118.7(1)
C(9)–C(14)–C(13)	119.5	119.8(1)
C(8)–C(15)–C(16)	121.5	120.8(1)
C(8)–C(15)–C(20)	119.3	119.7(1)
C(16)–C(15)–C(20)	119.2	119.6(1)
C(15)–C(16)–C(17)	120.1	119.9(1)
C(16)–C(17)–C(18)	120.5	120.7(1)
C(17)–C(18)–C(19)	119.9	119.8(1)
N(21)–C(19)–C(18)	117.3	117.5(1)
N(21)–C(19)–C(20)	122.9	122.9(1)
C(18)–C(19)–C(20)	119.7	119.6(1)
C(15)–C(20)–C(19)	120.6	120.3(1)
N(21)–C(22)–N(23)	118.4	119.3(1)
N(21)–C(22)–N(24)	121.3	122.0(1)
N(23)–C(22)–N(24)	120.3	118.8(1)
N(24)–C(25)–N(26)	178.9	172.2(1)
N(23)–C(27)–C(28)	111.0	111.5(1)
N(23)–C(27)–C(29)	105.5	105.9(1)
N(23)–C(27)–C(30)	110.9	109.5(1)
C(28)–C(27)–C(29)	109.4	109.4(1)
C(28)–C(27)–C(30)	111.1	111.4(1)
C(29)–C(27)–C(30)	108.7	108.9(1)

Tabelle A.15 Vergleich ausgewählter Bindungswinkel zwischen Theorie und Experiment.

Torsionswinkel	HF/6-31G(d,p)	Experiment
C(12)-N(11)-C(10)-C(9)	-0.4	-2.3(1)
C(10)-N(11)-C(12)-C(13)	-0.6	0.0(1)
C(19)-N(21)-C(22)-N(23)	13.6	4.7(1)
C(19)-N(21)-C(22)-N(24)	-167.1	-176.3(1)
C(22)-N(21)-C(19)-C(18)	-146.8	-140.6(1)
C(22)-N(21)-C(19)-C(20)	37.4	41.9(1)
C(27)-N(23)-C(22)-N(21)	-179.8	-170.8(1)
C(27)-N(23)-C(22)-N(24)	0.9	10.1(1)
C(22)-N(23)-C(27)-C(28)	-65.2	-66.3(1)
C(22)-N(23)-C(27)-C(29)	176.4	174.7(1)
C(22)-N(23)-C(27)-C(30)	58.9	57.4(1)
C(25)-N(24)-C(22)-N(21)	4.0	0.2(1)
C(25)-N(24)-C(22)-N(23)	-176.7	179.3(1)
C(22)-N(24)-C(25)-N(26)	-135.5	-168.4(2)
O(1)-C(2)-C(4)-C(5)	136.9	116.1(1)
O(3)-C(2)-C(4)-C(5)	-45.0	-61.7(1)
C(2)-C(4)-C(5)-C(6)	-63.3	-63.6(1)
C(4)-C(5)-C(6)-C(7)	-70.1	-71.4(1)
C(5)-C(6)-C(7)-C(8)	115.5	119.1(1)
C(6)-C(7)-C(8)-C(9)	-176.6	-178.3(1)
C(6)-C(7)-C(8)-C(15)	2.6	3.2(1)
C(7)-C(8)-C(9)-C(10)	43.2	39.2(1)
C(7)-C(8)-C(9)-C(14)	-136.8	-138.6(1)
C(7)-C(8)-C(15)-C(16)	58.1	58.7(1)
C(7)-C(8)-C(15)-C(20)	-123.2	-120.7(1)
C(15)-C(8)-C(9)-C(10)	-136.2	-142.2(1)
C(15)-C(8)-C(9)-C(14)	43.8	40.0(1)
C(9)-C(8)-C(15)-C(16)	-122.5	-119.9(1)
C(9)-C(8)-C(15)-C(20)	56.2	60.7(1)
C(8)-C(9)-C(10)-N(11)	-178.5	-175.0(1)
C(8)-C(9)-C(14)-C(13)	178.5	176.7(1)
C(14)-C(9)-C(10)-N(11)	1.5	2.9(1)
C(10)-C(9)-C(14)-C(13)	-1.5	-1.2(1)
N(11)-C(12)-C(13)-C(14)	0.4	1.6(1)
C(12)-C(13)-C(14)-C(9)	0.6	-0.8(1)
C(8)-C(15)-C(16)-C(17)	-179.1	-178.4(1)
C(8)-C(15)-C(20)-C(19)	177.7	174.9(1)
C(20)-C(15)-C(16)-C(17)	2.2	1.0(1)
C(16)-C(15)-C(20)-C(19)	-3.5	-4.5(1)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	0.5	2.2(1)
C(16)-C(17)-C(18)-C(19)	-1.9	-1.9(1)
C(17)-C(18)-C(19)-N(21)	-175.4	-179.2(1)
C(17)-C(18)-C(19)-C(20)	0.6	-1.6(1)
N(21)-C(19)-C(20)-C(15)	177.8	-177.7(1)
C(18)-C(19)-C(20)-C(15)	2.1	4.8(1)

Tabelle A.16 Vergleich ausgewählter Torsionswinkel zwischen Theorie und Experiment.

ATOM	ATOM 0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2	ATOM	ATOM 0	AX 1	ATOM 1	ATOM 2	AX 2
O(1)	C(2)	Z	O(1)	O(3)	Y	C(30)	C(27)	Z	C(30)	H(301)	Y
O(3)	C(2)	Z	O(3)	O(1)	Y	H(30)	O(3)	Z	H(30)	C(2)	Y
N(11)	C(14)	Z	N(11)	C(12)	Y	H(41)	C(4)	Z	H(41)	H(42)	Y
N(21)	C(19)	X	N(21)	C(22)	Y	H(42)	C(4)	Z	H(42)	H(41)	Y
N(23)	C(27)	X	N(23)	C(22)	Y	H(51)	C(5)	Z	H(51)	H(52)	Y
N(24)	C(25)	X	N(24)	C(22)	Y	H(52)	C(5)	Z	H(52)	H(51)	Y
N(26)	C(25)	Z	N(26)	C(22)	Y	H(61)	C(6)	Z	H(61)	H(62)	Y
C(2)	O(1)	X	C(2)	O(3)	Y	H(62)	C(6)	Z	H(62)	H(61)	Y
C(4)	C(2)	X	C(4)	C(5)	Y	H(7)	C(7)	Z	H(7)	C(8)	Y
C(5)	C(4)	X	C(5)	C(6)	Y	H(10)	C(10)	Z	H(10)	N(11)	Y
C(6)	C(5)	X	C(6)	C(7)	Y	H(12)	C(12)	Z	H(12)	N(11)	Y
C(7)	C(6)	Z	C(7)	C(8)	Y	H(13)	C(13)	Z	H(13)	C(14)	Y
C(8)	C(9)	Z	C(8)	C(10)	Y	H(14)	C(14)	Z	H(14)	C(9)	Y
C(9)	C(8)	Z	C(9)	C(14)	Y	H(16)	C(16)	Z	H(16)	C(17)	Y
C(10)	C(9)	Z	C(10)	N(11)	Y	H(17)	C(17)	Z	H(17)	C(18)	Y
C(12)	C(13)	Z	C(12)	N(11)	Y	H(18)	C(18)	Z	H(18)	C(19)	Y
C(13)	C(10)	Z	C(13)	C(14)	Y	H(20)	C(20)	Z	H(20)	C(19)	Y
C(14)	N(11)	Z	C(14)	C(13)	Y	H(21N)	N(21)	Z	H(21N)	C(22)	Y
C(15)	C(18)	Z	C(15)	C(20)	Y	H(23N)	N(23)	Z	H(23N)	C(22)	Y
C(16)	C(19)	Z	C(16)	C(15)	Y	H(281)	C(28)	Z	H(281)	H(282)	Y
C(17)	C(20)	Z	C(17)	C(16)	Y	H(282)	C(28)	Z	H(282)	H(281)	Y
C(18)	C(15)	Z	C(18)	C(19)	Y	H(283)	C(28)	Z	H(283)	H(281)	Y
C(19)	C(16)	Z	C(19)	C(20)	Y	H(291)	C(29)	Z	H(291)	H(292)	Y
C(20)	C(17)	Z	C(20)	C(15)	Y	H(292)	C(29)	Z	H(292)	H(291)	Y
C(22)	N(24)	Z	C(22)	N(23)	Y	H(293)	C(29)	Z	H(293)	H(292)	Y
C(25)	N(24)	Z	C(25)	N(26)	Y	H(301)	C(30)	Z	H(301)	H(303)	Y
C(27)	N(23)	Z	C(27)	C(28)	Y	H(302)	C(30)	Z	H(302)	H(301)	Y
C(28)	C(27)	Z	C(28)	H(281)	Y	H(303)	C(30)	Z	H(303)	H(301)	Y
C(29)	C(27)	Z	C(29)	H(291)	Y						

**Tabelle A.17** Definition des lokalen atomaren Koordinatensystems. Die AX 1, AX 2 Ebene wird durch die Vektoren ATOM0-ATOM und ATOM2-ATOM 1 definiert. Die dritte Achse steht senkrecht zu dieser Ebene, so daß ein rechtshändiges System entsteht. DUMM0 bezeichnet ein *Dummy*-Atom.

