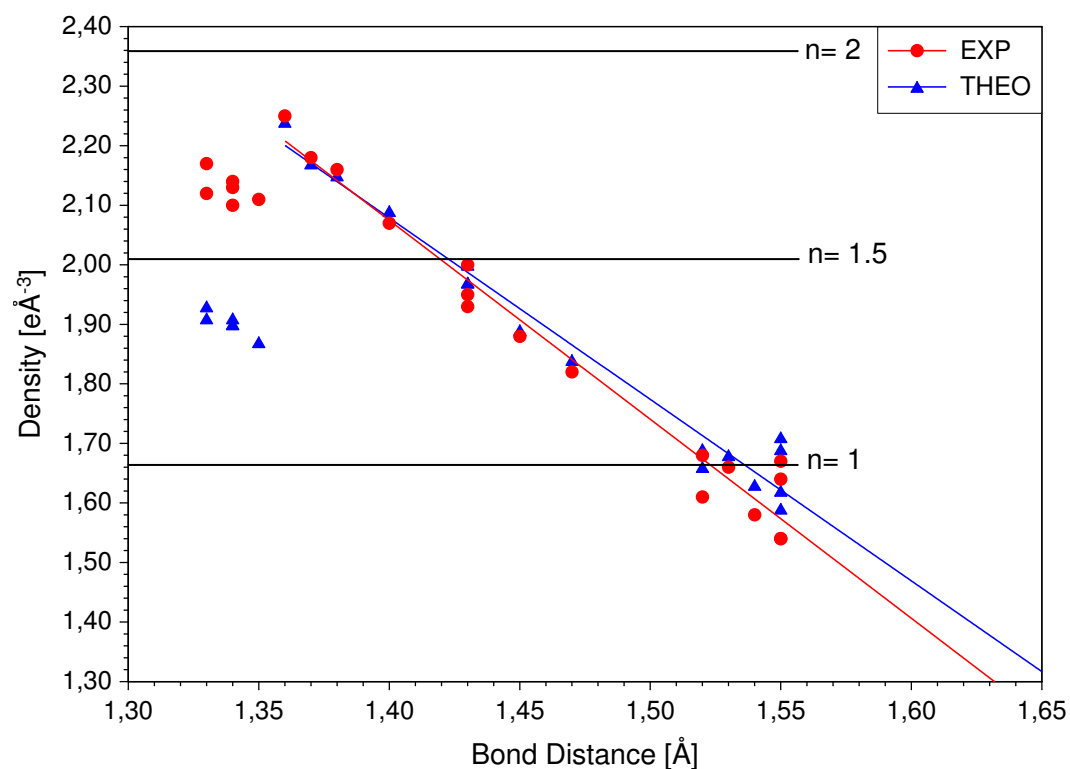


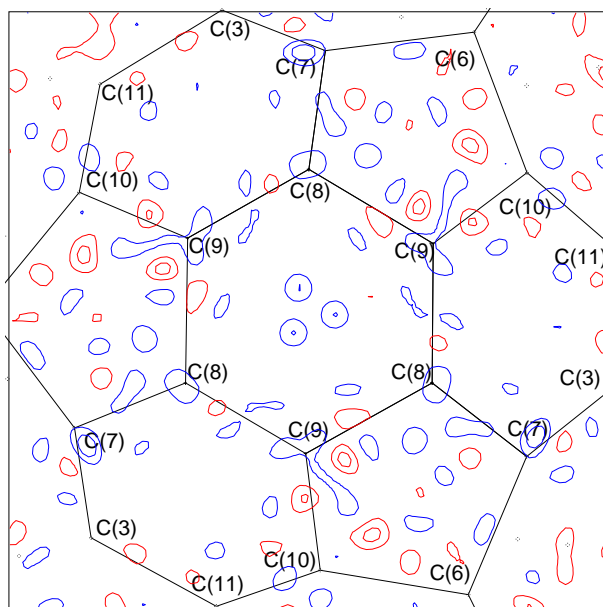
## Supplementary Material for the article:

### Examination of intermolecular electronic interactions in the crystal structure of $C_{60}(CF_3)_{12}$ by experimental electron density determination

**Authors:** Lilianna Chęcińska, Sergey I. Troyanov, Stefan Mebs, Christian B. Hübschle and Peter Luger



**Figure sup\_1:** Plot of  $\rho(r_{BCP})$  values [eÅ<sup>-3</sup>] versus bond length [Å] for the C-C bonds in the title compound from experiment and theory (single point: B3LYP/6-311++G(3df,3pd)). The data for the C-F bonds are also shown as a small cluster at a bond length around 1.34 Å.



**Figure sup\_2:** Residual density in the plane of the six membered ring. Blue/red: positive/negative regions. Contour interval 0.1 [ $e\text{\AA}^{-3}$ ]. Adjacent atoms shown for illustration.

**Table sup\_1:** Multipole population coefficients

atom	$P_v$	$P_{00}$	$P_{11}$	$P_{1-1}$	$P_{10}$
F(1)	7.04( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 1)
F(2)	7.08( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.01( 1)
F(3)	7.04( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.05( 1)
F(4)	7.00( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 1)
F(5)	7.03( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.02( 1)
F(6)	6.99( 2)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.04( 1)
C(1)	4.01( 4)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.07( 1)
C(2)	4.04( 4)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.08( 1)
C(3)	4.00( 3)	0.00( 0)	-0.05( 1)	0.03( 1)	-0.02( 1)
C(4)	3.94( 4)	0.00( 0)	-0.06( 1)	0.00( 1)	0.05( 1)
C(5)	4.03( 3)	0.00( 0)	-0.07( 1)	-0.07( 1)	-0.04( 1)
C(6)	3.79( 4)	0.00( 0)	0.04( 1)	0.04( 1)	0.05( 1)
C(7)	4.05( 3)	0.00( 0)	-0.06( 1)	-0.04( 1)	0.00( 1)
C(8)	3.95( 3)	0.00( 0)	-0.07( 1)	0.00( 1)	0.00( 1)
C(9)	3.97( 3)	0.00( 0)	-0.06( 1)	0.00( 1)	0.02( 1)
C(10)	3.99( 3)	0.00( 0)	0.05( 1)	0.01( 1)	0.03( 1)
C(11)	4.04( 3)	0.00( 0)	-0.07( 1)	0.03( 1)	0.00( 1)
C(12)	4.01( 3)	0.00( 0)	-0.04( 1)	-0.03( 1)	0.00( 1)

atom	$P_{20}$	$P_{21}$	$P_{2-1}$	$P_{22}$	$P_{2-2}$
F(1)	-0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(2)	-0.08( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(3)	-0.11( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(4)	-0.06( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(5)	-0.10( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(6)	-0.11( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(1)	0.07( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(2)	0.05( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(3)	0.05( 1)	0.01( 1)	-0.03( 1)	-0.03( 1)	0.15( 1)
C(4)	0.01( 1)	0.02( 1)	-0.01( 1)	0.01( 1)	0.03( 1)
C(5)	0.08( 1)	0.05( 1)	0.05( 1)	-0.09( 1)	0.07( 1)
C(6)	0.01( 1)	0.00( 1)	-0.02( 1)	-0.01( 1)	-0.02( 1)
C(7)	0.10( 1)	0.07( 1)	0.03( 1)	-0.10( 1)	0.08( 1)
C(8)	0.06( 1)	0.08( 1)	0.00( 1)	-0.11( 1)	0.07( 1)
C(9)	0.07( 1)	0.04( 1)	0.02( 1)	-0.11( 1)	0.07( 1)
C(10)	0.11( 1)	-0.01( 1)	-0.04( 1)	-0.09( 1)	-0.05( 1)
C(11)	0.09( 1)	0.05( 1)	-0.06( 1)	-0.12( 1)	0.07( 1)
C(12)	0.07( 1)	0.03( 1)	0.02( 1)	-0.14( 1)	0.08( 1)

atom	$P_{30}$	$P_{31}$	$P_{3-1}$	$P_{32}$	$P_{3-2}$	$P_{33}$	$P_{3-3}$
F(1)	0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(2)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(3)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(4)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(5)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(6)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(1)	0.34( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 1)	-0.26( 1)
C(2)	0.36( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	-0.03( 1)	-0.26( 1)
C(3)	0.16( 1)	0.04( 1)	0.03( 1)	0.02( 1)	-0.09( 1)	0.03( 1)	-0.04( 1)
C(4)	0.20( 1)	0.04( 1)	0.02( 1)	0.01( 1)	0.00( 1)	-0.04( 1)	-0.17( 1)
C(5)	0.19( 1)	0.02( 1)	0.00( 1)	0.09( 1)	-0.06( 1)	0.00( 1)	-0.05( 1)
C(6)	0.21( 1)	-0.06( 1)	0.02( 1)	0.02( 1)	-0.02( 1)	0.05( 1)	-0.14( 1)
C(7)	0.20( 1)	0.04( 1)	-0.03( 1)	0.11( 1)	-0.07( 1)	0.00( 1)	-0.05( 1)
C(8)	0.17( 1)	0.02( 1)	-0.05( 1)	0.09( 1)	-0.04( 1)	0.04( 1)	-0.06( 1)
C(9)	0.19( 1)	0.00( 1)	-0.06( 1)	0.14( 1)	-0.09( 1)	0.01( 1)	-0.07( 1)
C(10)	0.16( 1)	0.00( 1)	-0.03( 1)	0.13( 1)	0.11( 1)	-0.06( 1)	-0.02( 1)
C(11)	0.17( 1)	0.04( 1)	0.04( 1)	0.10( 1)	-0.08( 1)	0.03( 1)	-0.03( 1)
C(12)	0.23( 1)	0.04( 1)	-0.01( 1)	0.08( 1)	-0.05( 1)	0.00( 1)	-0.05( 1)

atom	$P_{40}$	$P_{41}$	$P_{4-1}$	$P_{42}$	$P_{4-2}$	$P_{43}$	$P_{4-3}$	$P_{44}$	$P_{4-4}$
F(1)	0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(2)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(3)	0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(4)	-0.01( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(5)	0.00( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
F(6)	0.02( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(1)	0.03( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.03( 1)	0.15( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(2)	0.08( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.00( 0)	0.05( 1)	0.17( 1)	0.00( 0)	0.00( 0)
C(3)	0.01( 2)	-0.01( 1)	0.00( 2)	-0.02( 2)	-0.01( 2)	-0.01( 1)	0.01( 1)	0.01( 1)	-0.03( 1)
C(4)	0.05( 2)	0.00( 1)	-0.01( 1)	-0.03( 1)	0.01( 1)	-0.01( 1)	0.04( 1)	-0.02( 1)	0.01( 1)
C(5)	-0.01( 2)	-0.03( 1)	0.00( 2)	0.01( 2)	0.00( 2)	-0.01( 1)	0.02( 1)	0.00( 1)	0.02( 1)
C(6)	0.01( 2)	-0.01( 1)	0.01( 1)	-0.03( 1)	0.03( 1)	0.02( 1)	0.03( 1)	0.00( 1)	-0.01( 1)
C(7)	0.03( 2)	-0.03( 1)	-0.01( 2)	-0.01( 2)	0.00( 2)	-0.02( 1)	0.03( 1)	-0.01( 1)	0.01( 1)
C(8)	0.03( 2)	0.01( 2)	0.00( 2)	0.00( 2)	-0.01( 2)	0.01( 2)	0.01( 1)	-0.01( 1)	0.01( 1)
C(9)	0.04( 2)	-0.01( 1)	0.00( 2)	-0.01( 2)	0.01( 2)	0.00( 2)	0.02( 1)	0.02( 1)	0.01( 1)
C(10)	-0.01( 2)	0.01( 1)	0.01( 2)	-0.01( 2)	0.00( 2)	0.03( 1)	0.04( 1)	0.01( 1)	0.01( 1)
C(11)	0.04( 2)	-0.02( 1)	-0.02( 2)	-0.02( 2)	0.01( 2)	-0.04( 1)	0.02( 1)	0.00( 1)	0.01( 1)
C(12)	0.03( 2)	0.02( 1)	-0.01( 2)	-0.01( 2)	-0.02( 2)	0.02( 1)	-0.01( 1)	0.01( 1)	-0.01( 1)

**Table sup\_2:** List of atomic properties

Atom	Group	$V_{tot}[\text{\AA}^3]$	$V_{001}[\text{\AA}^3]$	Q[e]
F(1)	D	15.16	14.45	-0.62
F(2)	D	15.51	14.07	-0.65
F(3)	D	16.94	15.06	-0.59
F(4)	D	18.23	15.17	-0.56
F(5)	D	15.24	14.42	-0.61
F(6)	D	17.15	14.78	-0.59
C(1)	C	3.20	3.20	1.70
C(2)	C	3.28	3.28	1.68
C(3)	A	11.08	9.66	-0.01
C(4)	B	6.48	6.45	0.04
C(5)	A	9.65	9.42	-0.02
C(6)	B	6.35	6.35	0.19
C(7)	A	11.05	9.93	-0.04
C(8)	A	10.05	9.82	0.04
C(9)	A	10.10	9.84	0.06
C(10)	A	10.52	9.89	0.01
C(11)	A	10.76	10.19	-0.01
C(12)	A	9.94	9.60	-0.00
sum		200.68		0.02*
x18		3612.2*		
$V_{cell}$		3617.3		

\*Bader atomic volumes and charges are additive. The sum of atomic volumes in a given unit cell should be equal to the experimental cell volume. Similarly the sum of all atomic charges should add up to zero. For the title compound the sum of  $V_{tot}$  reproduces the unit cell volume within less than 1%, whereas the charges add up to 0.02 e, being indications that the integration procedure for atomic properties has worked properly.