

A

Zu jeder Verbindung gehört ein **vollständiger Daten-Satz** an:

(0) Ausbeuten

(i) EA (vom reinen Stoff und vom Stoff-Solvat, wenn vorhanden)

(ii) NMR (alle wichtigen Kern: H, C, N, F, P, Si, ...)

(iii) IR (vom reinen Stoff und vom Stoff-Solvat, wenn vorhanden)

(iv) Raman (vom reinen Stoff und vom Stoff-Solvat, wenn vorhanden)

(v) MS

(vi) QM-Rechnungen (Methode, xyz-Daten, Zusammenfassung der Pop-Daten im Support; alle relevanten input- und output-Dateien)

(vi) cif-Datei + checkcif (am besten als eine Datei) + CCDC-Nummern, es brauchen keine Strukturdaten mehr aufgeführt werden, nur die Tabelle mit den Messdaten

(vii) Schmelz- und Zersetzungstemperaturen (gegebenenfalls auch Siedetemperaturen)

B

Manuskript

(i) Im Manuskript auf Konsistenz achten, d.h. bei einer Reihe MX $M = R_4N, R_4P$; $X = CN, N_3, OCN$ müssen **alle** Kombinationen vorhanden sein.

(ii) Den Sinn von jedem Satz auf deutsch hinterfragen! Hinweis: es gibt Google Translator oder andere Software, mit der man ganz schnell herausfinden kann, was man wirklich auf englisch geschrieben hat.

(iii) Bei Daten-Vergleichen müssen immer die Randbedingungen (fest, flüssig, gasförmig, oder LM, T, etc) + Referenz aufgeführt werden.

C

Literatur

(i) Literaturstellen als pdf-Dateien mit einreichen + separate DOI-Liste

(ii) Für die Erstellung der Referatelliste wird Mendeley verwendet.

D

Zu **jeder** hergestellten Verbindung, die irgendwo im Support (z.B. X-ray oder Raman ...) oder Manuskript auftaucht, muss die Synthese und die Charakterisierung angegeben werden. Wenn Daten bereits publiziert wurden, muss die Referenz angegeben werden.

E

Abbildungen, Schemata etc.

Alle Originaldateien (z.B. Diamonddoc + tiff, Chemdraw) mit einreichen.

Wenn etwas fehlt: Bitte im Supporting oder im Manuskript kommentieren, warum diese Angaben fehlen.

Z.B.: es konnte keine EA gemessen werden, weil Zersetzung ...; es konnte keine Ausbeute bestimmt werden, weil Kristalle aus dem Gemisch gepickt wurden ...