

Hinweise

Bonn, 1. September 2009

- Bitte drucken Sie das Auftragsformular beidseitig aus.
- **Füllen Sie innerhalb des stark umrandeten Bereiches die Felder möglichst vollständig und gut leserlich aus.**
- **Bitte kennzeichnen Sie Ihre Probe leserlich und so, dass die Probenbezeichnung nicht verwischt.**
- Sollte die zu untersuchende Substanz äußerst empfindlich sein, so schreiben Sie bitte neben dem Strukturvorschlag, dass eine Tieftemperaturpräparation gewünscht wird.
- Unter „Analytische Befunde“ tragen Sie bitte Ergebnisse ein, die bei der Strukturlösung behilflich sein können, z.B. besondere Signalmultiplizitäten im NMR-Spektrum oder den Molpeak im MS.
- Auf der Rückseite des Probzettels geben Sie bitte – soweit bekannt – die Zellparameter von Edukten oder häufig auftretenden Nebenprodukten an, um Messungen von bereits bekannten Spezies zu vermeiden.
- Nach erfolgter Messung, Strukturlösung und -verfeinerung erhalten Sie und Ihr Abteilungsleiter eine Nachricht per E-Mail, die Sie über den Erfolg oder Mißerfolg der Messung informiert. Angehängt sind 3 Dateien, die Ihnen die Auswertung der Struktur ermöglichen (TEX-File mit Mess- und Strukturparametern, RES-File zur graphischen Darstellung und ein Word-Dokument mit Abbildungen und ggf. Anmerkungen zu Splittlagen, etc.)
- In dieser E-Mail wird Ihnen weiterhin ein Strukturgüteparameter mitgeteilt, der Ihnen eine Einschätzung erlaubt, wie hoch die Qualität der Struktur ist. Umseitig finden Sie die Erläuterungen dazu.

Dr. Gregor Schnakenburg

Legende für den Code zur Kristallstrukturbestimmung

Jeder Messversuch wird mit einem Code begutachtet, der aus 2 Zeichen, einem Buchstaben und einer Zahl besteht.

Beispiel: A1

Buchstaben:

A	Strukturlösung und -verfeinerung ohne (erkennbare) Fehler durchführbar (ausgezeichnete Struktur)
B	Sehr gute Struktur, nur marginale Probleme in der Verfeinerung
C	Gute Struktur, wenige Probleme in der Verfeinerung
D	Mäßige Struktur, deutliche Probleme in der Verfeinerung
E	Nur für den „Hausgebrauch“. Publizieren so nicht möglich. Strukturmotiv gesichert, mehr jedoch nicht.
F	Nur für den Hausgebrauch. Strukturmotiv vage.
G	Datensatz gemessen, aber Struktur nicht lösbar
H	Datensatzmessung abgebrochen, wegen ...
I	Keine Messung durchgeführt, da Kristall röntgenamorph, zersetzt, o. ä.

Zahlen:

1	Gefundene Struktur war exakt die vom Experimentator vorgeschlagene
2	Gefundene Struktur war eng mit der vom Experimentator vorgeschlagenen verwandt, jedoch nicht identisch
3	Gefundene Struktur enthielt Struktur motive, die vom Experimentator vorgeschlagen wurden, war jedoch mit ihr nicht unmittelbar verwandt
4	Gefundene Struktur hatte keine direkte Beziehung zur vorgeschlagenen, z.B. Kristallisation von Lösungsmitteln, Edukten, etc.