

## Beispiel

... Nach Chromatographie an Kieselgel (PE/EA 10:1 bis 2:1) wurde das Bissulfoxid als farbloser kristalliner Feststoff erhalten (930 mg, 2.72 mmol, 89%).

Smp.: 80–83 °C (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/Hexan).

R<sub>F</sub> = 0.16 (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>/MeOH 50:1).

[α]<sub>D</sub><sup>20</sup> +22.2 (c 1.0, CHCl<sub>3</sub>).

IR (DRIFT):  $\tilde{\nu}$  (cm<sup>-1</sup>) = 3061 (m), 2953 (m), 2914 (m), 2895 (s), 1688 (s, C=O), 1598 (m), 1493 (m), 1448 (m), 1233 (m), 1046 (m), 1031 (m), 1017 (s, S=O).

<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ (ppm) = 2.32–2.39, 2.60–2.68, 2.83–2.98, 3.10–3.17, 3.61–3.66 (5 m, 6 H, 4'-H<sub>2</sub>, 5'-H<sub>2</sub>, 6'-H<sub>2</sub>), 3.62 (d, <sup>3</sup>J = 3.8 Hz, 1 H, H-2'), 4.02 (dd, <sup>2</sup>J = 18.1 Hz, <sup>3</sup>J = 4.8 Hz, 1 H, 2-CH<sub>a</sub>H<sub>b</sub>), 4.13 (dd, <sup>2</sup>J = 18.1 Hz, <sup>3</sup>J = 9.8 Hz, 1 H, 2-CH<sub>a</sub>H<sub>b</sub>), 4.68–4.72 (m, 1 H, H-1), 7.25–7.52, 7.98–8.00 (2 m, 10 H, 2 Ph).

<sup>13</sup>C-NMR (100 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ (ppm) = 15.1 (CH<sub>2</sub>), 38.3 (CH), 38.9 (CH<sub>2</sub>), 46.9 (CH<sub>2</sub>), 51.9 (CH), 79.7 (CH), 127.8 (CH), 128.2 (CH), 128.63 (CH), 128.64 (CH), 129.0 (CH), 133.3 (CH), 136.5 (C), 138.9 (C), 196.8 (C).

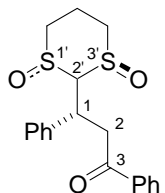
MS (EI, 190 °C): m/z (%) = 360 (4) [M<sup>+</sup>], 221 (13), 210 (19), 123 (20), 105 (100) [C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>O<sup>+</sup>], 77 (33), 43 (31).

Feinmassenbestimmung Ber. 360.0854 amu

<sup>12</sup>C<sub>19</sub><sup>1</sup>H<sub>20</sub><sup>16</sup>O<sub>3</sub><sup>32</sup>S<sub>2</sub> Gef. 360.0855 amu

C<sub>19</sub>H<sub>20</sub>O<sub>3</sub>S<sub>2</sub> (360.49) Ber. C 63.30 H 5.59 O 13.31 S 17.79

Gef. C 63.43 H 5.63



## Erläuterungen

**Einwaagen** von stöchiometrisch eingesetzten Substraten und Reagenzien werden auf 3 gültige Stellen angegeben. z. B.: 930 mg, 0.0123 g, 1.12 g; aber 89%. Bei sehr kleinen Ausbeuten (gegen 10%) ist eventuell nur die Angabe von 2 gültigen Stellen für das Produkt sinnvoll.

Aber: in 1 l MeOH (überstöchiometrisch) oder RuO<sub>4</sub> (5 mg, 30 μmol) (unterstöchiometrisch)

Variablen kursiv und von "=" gefolgt. Smp. ist keine Variable, deshalb ein Doppelpunkt.

Minus und Wertebereiche (80–83) mit langem Strich.

Keine Leerschläge bei Wertebereichen, vor und nach "/", vor ° (aber vor °C!), nach Vorzeichen und vor %.

Leerschläge vor und nach "=", vor Einheiten (nicht vor °, aber vor °C).

Jeder Eintrag wird durch einen Punkt abgeschlossen.

**Schmp.** Schmelzpunkte immer als Schmelzbereich angeben. Falls umkristallisiert, Lösungsmittel angeben.

[α] Für Drehwerte wird auch ein positives Vorzeichen explizit angegeben. Keine Einheiten für den spezifischen Drehwert und die Konzentration angeben, Daher auch kein Gleichheitszeichen.

**IR** Besser nur aussagekräftige Schwingungen angeben, das können auch mal nur ein oder zwei Werte sein. Man kann auch die Einheiten cm<sup>-1</sup> und ppm weglassen. Dann muss im Vorspann zum Experimentalteil erläutert sein, was angegeben wird.

**<sup>1</sup>H-NMR** Falls mehrere Kopplungskonstanten angegeben werden, die größte zuerst, usw.

Prinzipiell nur Angaben machen, die zweifelsfrei sind, z.B. durch 2D-Spektren oder durch die Kopplungskonstanten.

Achtung: Zuordnung durch 2-H (nicht H-2).

Bei verschachtelten Klammern {[ (... )]}; z. B. [m, 1 H, CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>].

**<sup>13</sup>C-NMR** Klassifizierung durch CH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>, CH, C (alternativ aus DEPT: ↓ oder ↑, dann im Vorspann zum Experimentalteil erläutern). Nur wenn die Zuordnung zweifelsfrei ist (z. B. durch <sup>2</sup>D-NMR-Spektren ermittelt), darf man diese angeben: 196.8 (C, C=O).

Achtung: Zuordnung durch C-2 (nicht 2-C).

**MS** Den Molekülpeak immer angeben, falls detektierbar. Andere Peaks nur, falls >10%.