

Richtlinien zur Anfertigung von Bachelor-, Vertiefungs-, Master- und Doktorarbeiten

Gliederung:

Titel

Inhaltsverzeichnis

Englische/deutsche Zusammenfassung (optional, empfohlen, 1 Seite, nur Text, ohne Formeln und Formelnummern, nur bei deutschen/englischen Dissertationen)

A. Zusammenfassung (eingeleitet durch „Teil B in einem Satz, Teil C in einem Satz“, weiter gegliedert nach Teil D, abgeschlossen durch „Fortschritte in einem Satz“)

B. Einleitung und Problemstellung [von allgemein (f. Vorstellungsgespräch, Großmutter) - nach speziell, abschließend mit einer Liste der Fragen/Probleme, die die Arbeit später beantwortet]

C. Stand der Forschung (vor Beginn der Arbeit, Ergebnisse anderer Arbeitsgruppen während des Zeitraums der Arbeit, abgeschlossen durch eine kurze Überleitung zum dann folgenden Beitrag der eigenen Arbeit)

D. Resultate und Diskussion

E. Experimenteller Teil (gegliedert nach Teil D)

F. Abkürzungsverzeichnis

G. Spektren-Anhang (nur für E-Version auf DVD, nur bei Master- und Doktorarbeiten)

Lebenslauf (nur bei Dissertationen)

Zusammenfassung für Buchdeckel (nur bei Dissertationen)

Die Begeisterung für das Thema und die Resultate der Arbeit muss spürbar sein.

Ein guter wissenschaftlicher Text ist so kurz wie möglich und so lang wie nötig.

Schreibreihenfolge: 1) Vorläufiges Inhaltsverzeichnis (vorher zu besprechen); 2) Experimenteller Teil/Zusammenstellung der Spektren für den Anhang der E-Version; 3) Beschreibung und Auswertung der eigenen Experimente (Abbildung ausgewählter Spektren) mit Begründung der Konzeption; 4) Einordnung der eigenen Ergebnisse (neuartig > neu > geringfügig modifiziert > bekannt); 5) Stand der Forschung zur Einordnung der Arbeiten innerhalb z. B. der Naturstoffchemie, besonders bzgl. der Schlüsselschritte/Experimente; 6) kurze Einleitung (max. 4 Seiten) mit Einordnung der Arbeit in die Chemie; 7) Zusammenfassung (max. 4 Seiten; was ist neuartig, neu?); 8) Titel.

Spektren in Teil D: Die Erläuterung der Charakterisierung interessanter Verbindungen sollte durch die Abbildung *sauberer* Spektren, ggf. mit Ausschnittvergrößerung unterstützt werden.

Messbedingungen angeben [¹H-NMR-Spektrum von Makrozyklus **310** (600 MHz, Methanol-*d*₄)]. Skalen: Linien in Bindungsdicke, Beschriftung Arial 9. Von anderen als NMR-Spektren können alternativ hochwertige Scans erstellt werden (1200 dpi, Graustufen, TIF-Format, auch hier ist nachträgliche Anfertigung der Skalen möglich). Die vermessenen Verbindungen im Spektrum als Struktur abbilden. Integrale in ¹H-NMR-Spektren nach oben versetzen. Umrahmung mit Kasten in Textbreite (optional).

Spektren-Anhang der E-Version: Die Namen der ausreichend für mögliche Vergrößerung aufgelösten pdf-Dateien müssen informativ sein (z. B. Diss_[Name]_V310_1H-NMR_DMSO_600MHz). Von jeder Verbindung nur die besten Spektren aufnehmen, jedoch mind. eins von jeder Sorte. Von wichtigen Zielverbindungen sind auch die Rohdaten inkl. 2D NMR beizufügen, ebenso die Massenspektren.

Zitate. Auf die Zitierung von Internet-Seiten ist zu verzichten, da diese i. d. R. nicht begutachtet sind und außerdem nur eine geringe Lebensdauer aufweisen. Bekannte Verbindungen mit CAS-Nummer sind im Allgemeinen Teil bei erstmaliger Erwähnung durch Zitat zu kennzeichnen. Wenn Vorschrift *und* alle Daten bekannt sind, ist die Aufnahme einer bekannten Verbindung in den Experimentalteil nicht nötig. Wenn eine bekannte Verbindung nach einer neuen Vorschrift erhalten wurde, kann dies in der Referenz erwähnt werden: "Alternative Vorschrift(en) zur Synthese von Verbindung **78**: [Referenz(en)]". Wenn die Vorschrift bekannt war, jedoch einige Daten neu sind: "Von Verbindung **78** wurden erstmals [Daten] erhalten. Darstellung nach [Referenz(en)]." In beiden Fällen sollte die Verbindung in den Experimentalteil aufgenommen und mit einem Querverweis versehen werden. Vormalig unbekannte Verbindungen sind ohne Zitat in den Experimentalteil aufzunehmen. Sollte es sich um nach bekannter Vorschrift dargestellte neue Analoga bekannter Verbindungen handeln, so ist dies im Allgemeinen Teil der Arbeiten mit Zitat zu erwähnen.

Literaturverzeichnis: Fußnoten, keine Endnoten. Zulässige Abkürzungen von Zeitschriften-Titeln: www.cas.org/content/references/corejournals. Dort nicht gelistete Titel im SciFinder über „Datenbank CAPLUS>Autor1>(Autor2>)Publikationsjahr“ im Scifinder suchen. Einige Zeitschriften (z. B. *Eur. J. Org. Chem.*, *Synthesis*) haben keine Bandnummer (nicht mit der Heftnummer verwechseln). Bei Zitaten aus der *Angew. Chem.* die deutsche und die englische Ausgabe zitieren (ab 1998 „Engl.“ in der Titelabkürzung weglassen). Kein „et al.“, „und“ im Verzeichnis. Eckige Klammern um die Referenznummer, Absatzformatierung: „hängend“.

- [1] a) H. J. Ache, *Angew. Chem.* **1989**, *101*, 1-21; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1989**, *28*, 1-20; b) Gaussian 98, Revision A.5, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, USA, **1998**.
- [2] a) K. P. C. Vollhardt, *Organische Chemie*, 1. Aufl., VCH, Weinheim, **1988**, S. 215; b) T. D. Tullius in *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, Vol. 5 (Hrsg.: J. L. Atwood, J. E. D. Davies, D. D. MacNicol, F. Vögtle, K. S. Suslick), Pergamon, Oxford, **1996**, S. 317-343.
- [3] a) C. R. A. Botta (Bayer AG), DE-B 2235093, **1973** [Chem. Abstr. **1974**, *80*, 55356c]; b) M. R. Hopmann, Dissertation, Technische Universität Berlin, **1983**; c) G. Maas, *Methoden Org. Chem. (Houben-Weyl) 4th ed. 1952-*, Vol. E21/1, **1983**, S. 379-397.

Lit. [2a] bezeichnet ein Buch ohne Herausgeber, Lit. [2b] ein Buch mit Herausgeber.

Formatierung des Texts: Arial 11, Blocksatz, Zeilenabstand 1.25, alle Randabstände 2.5 cm, Seitenzahlen oben rechts (bzw. rechts/links in der doppelseitigen DIN A5-Version). Absatzformatierung möglich (z. B. 3 Pkt oberhalb, 0 Pkt unterhalb). Literaturverweise in hochgestellten eckigen Klammern (Haupttext), bzw. normal gestellten eckigen Klammern (Fußnote). Literaturverzeichnis parallel erstellen (Fußnoten-Verwaltung, bei mehrfacher Nennung Querverweis-Funktion nutzen). Verbindungsnummern im Inhaltsverzeichnis auch fett.

Rechtschreibung: Man trainiere und nutze die automatische Rechtschreibkorrektur, die zunehmend mehr von Chemie verstehen wird.

Zeichensetzung: Nutzen Sie Kommata, im Besonderen zur Trennung von Hauptsätzen vor „und“ bzw. „oder“ (schwieriger lesbar wird sonst z. B. „Er traf sich mit seiner Freundin und deren Schwester war auch dabei“), bei Infinitivgruppen („Ich rate, *ihm* zu helfen“; Weglassung des Kommas wie gehabt bei Objekt-freiem Infinitiv: „Er beschloss zu rauchen“) und vor Nebensätzen und bei Appositionen.

Nach Fertigstellung empfiehlt sich die Vereinheitlichung des Texts durch Tauschbefehle („Strg-h“): „in dem“ durch „im“, „an dem“ durch „am“, „bei dem“ durch „beim“, „von dem“ durch „vom“ (in allen Fällen schrittweise vorgehen, da dieser Tausch nur bei Präpositionen korrekt ist); weiterhin: doppelte Leerzeichen durch einfache (bis es nicht mehr geht), „H-Spektr“ durch „H-NMR-Spektr“, „C-Spektr“ durch „C-NMR-Spektr“, „nucleo“ durch „nukleo“, „in einer Ausbeute“ statt „mit einer Ausbeute“, „para-“ durch „p-“, „ortho-“ durch „o-“, „meta-“ durch „m-“, „fluoro“ durch „fluor“, „chloro“ durch „chlor“, „bromo“ durch „brom“, „²J = “ durch „²J = “, „buthyl“ durch „butyl“, „m/z:“ durch „m/z =“, „RT“ durch „Raumtemp.“ (oder besser durch die exakte Temperatur, z. B. 22 °C), „deoxy“ durch „desoxy“; Nomenklatur auf Anglizismen überprüfen! Zur Vermeidung der Trennung von Wert und Einheit durch Zeilenumbruch kann „ [Einheit]“ durch „^s[Einheit]“ (geschütztes Leerzeichen) ersetzt werden, ggf. Ersetzung auch von „ = “ durch „^s=^s“.

Sonstiges: Eine Verbindungsnummer ist nur dann in Klammern zu setzen, wenn sie auch weggelassen werden könnte. Beispiel: „Die Umsetzung des Tricyclus **23** mit Oroidin (**13**) lieferte die *spiro*-Verbindung **168**, die das CDEF-Ringsystem des marinen Naturstoffs Konbu'acidin (**47**) aufweist“. Auf vollständige IUPAC-Namen ist im Theoretischen Teil zu verzichten (jedoch z. B. möglich: das Pyrroloindol **12**). Formeln sollten nur einmal im Theoretischen Teil (außer Zusammenfassung) abgebildet werden und sind ansonsten durch ihre Nummern zu repräsentieren. Bei der Diskussion von Teilstrukturen dürfen diese erneut abgebildet, jedoch nicht neu nummeriert werden.

Im Text muss auf die korrespondierenden Grafiken und Tabellen verwiesen werden.

Tabellen sollten eine erklärende Überschrift aufweisen. Beispiel: Tabelle 2. Reaktionsbedingungen und Ausbeuten der Aminierung des Sandwichkomplexes **98**. Für Fußnoten in Tabellen werden lateinische Kleinbuchstaben in eckigen Klammern verwendet.

Kursiv geschrieben werden Symbole für physikalische Größen (nicht aber die zugehörigen Einheiten!), stereochemische Angaben (aber: D- und L- sind Kapitälchen), Lokanten (*N*-Methyl), Symmetrie- und Raumgruppen (C_{2v}) und Präfixe (*t*Bu, *tert*-Butyl), nicht dagegen lateinische Ausdrücke wie „in situ“ oder „in vitro“. Minuszeichen „-“, Bindestrich „-“.

Grafiken:

„Schemata“ stellen Vorgänge dar (z. B. Reaktionen, Isolierungsgänge) und sind durchgehend zu nummerieren. Alle anderen Grafiken werden als „Abbildungen“ durchnummeriert. Sämtliche Schemata sind selbst zu zeichnen. Layout: als Textzeichen einbauen, nicht „über den Text“.

Jede Grafik muss unterhalb eine Legende erhalten. Beispiele: Schema 7 (nicht fett, Punkt, nicht eingerückt). Veresterung von Septamycin (**6**) nach der Mosher-Methode. Abbildung 3 (nicht fett, Punkt). Für die neuartige Verbindung **9** beobachtete NOESY-Korrelationen. Abbildung 12. $^1\text{H-NMR}$ -Spektrum (600 MHz, Chloroform- d_1 („*d*“ kursiv!)) der analysenreinen Verbindung **1**. Die Formatierung folgt der des Haupttexts (also keine Einrückungen, dieselbe Schriftgröße und -art). In die Legenden Querverweise inkl. Nennung der Korrespondenzautoren, wenn vorhanden!

Schemata und Abbildungen (komplett im Zeichenprogramm erstellen) sollten nahezu ebenso breit sein wie der Haupttext. Bitte auf bündige Anordnung achten (Formelnummern auf derselben Höhe/Breite, Formeln einer Zeile/Spalte gegeneinander zentrieren). Zu Beginn der Arbeit ein Musterschema erstellen.

Formeln gemäß folgender Einstellungen in ChemDraw (aber auch in anderen Zeichenprogrammen): chain angle 120 degrees, bond spacing 18 % of length, fixed length 0.51 cm, bold width 0.071 cm, line width 0.021 cm, margin width 0.056 cm, hash spacing 0.069 cm.

Bindungen zu Substituenten an trisubstituierten Atomen sollten auf den Winkelhalbierenden liegen, bei tetrasubstituierten ist die Winkelkombination $120^\circ\text{-}90^\circ\text{-}60^\circ\text{-}90^\circ$ zu bevorzugen. Das Aneinanderreihen von Keilen ist zu vermeiden.

Stereochemie: a) der Fachliteratur unbekannt: gerade Bindung; b) sicher racemisch: geschlängelte Bindung; c) nur relative Stereochemie bekannt: dicke bzw. quer gleich gestrichelte Bindung; d) absolute Stereochemie bekannt: Keil nach vorn bzw. gestrichelter Keil nach hinten (schmales Ende am stereogenen Zentrum).

Elementsymbole und Reaktionsbedingungen Arial 10, Formelnummern Arial 12 (fett). Positionsnummerierung, chemische Verschiebungen etc.: Arial 9 (man kann ggf. auch einen Pfeil zeichnen, der zu einem „schwer zugänglichen“ Atom zeigt). Es können übliche Abkürzungen wie Me, *i*Pr, *s*Bu und Ph verwendet werden, doch muss dies konsequent geschehen. Allgemeine Substituenten sind mit R^1 , R^2 (wenn über ein C-Atom verknüpft, Ziffern rechts oben) bzw. X, Y, Z (sonst) zu bezeichnen. Chemische Formeln sind fortlaufend zu nummerieren.

Reagenzien, Reaktions- und Isolierungsbedingungen (Reihenfolge: Reagenzien, Lösungsmittel, Reaktionstemp., Reaktionsdauer, Ausbeute) sind direkt an den Reaktionspfeilen anzugeben. In situ aufeinander folgende Einzelschritte mit „i), ii), ...“ nummerieren. Sonst „1), 2), ...“.

Experimenteller Teil

Auch in Bachelor- und Vertiefungsarbeiten sind neue Substanzen möglichst vollständig zu charakterisieren. Hierzu zählen auch solche, die vom Betreuer bereits erhalten, aber noch nicht publiziert wurden. Bei bekannten Verbindungen reichen Ausbeute, Schmp./Sdp., und ein $^1\text{H-NMR}$ -Spektrum. Es darf jedoch gerne mehr sein.

Nomenklatur, Symbole, Einheiten: Die Regeln und Empfehlungen der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) sind einzuhalten. Deutsche Nomenklatur. Allgemeinen Arbeitsvorschriften grundsätzlich den Vorzug geben. Ein Kapitel „Verwendete Geräte und Methoden“ voranstellen. Strukturformeln abbilden, wenn nicht unmittelbar aus dem IUPAC-Namen ersichtlich. Bei bekannten Verbindungen Literaturverweise angeben.

Mengen- und Konzentrationsangaben in Klammern hinter der entsprechenden Substanz. Beispiel: Zu einem Gemisch aus 1-Octin (3.2 ml, 2.40 g, 21.5 mmol) und *tert*-Butylamin (3.50 ml, 2.40 g, 32.2 mmol) wurde eine Lösung von **1** (0.15 g, 0.43 mmol, 2 Mol-%) in Toluol (6 ml) gegeben. Die Reaktionsmischung wurde 24 h bei 85 °C erhitzt und anschließend im Vakuum destilliert; DC: $R_f = 0.23$ (*n*-Hexan/Ethylacetat (1:1)); Ausbeute: [Masse] ([Menge], [%]); Sdp. oder Schmp.: 427 °C (13 mbar od. „Zers.“); optischer Drehwert $[\alpha]_{\text{D}}^{20}$: -13.5 (Einheit $\text{deg}\cdot\text{cm}^3\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{dm}^{-1}$, wird nicht angegeben) ($c = 0.2$ (Einheit $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$, wird nicht angegeben) in Aceton); $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): $\delta = 0.85$ (t, $J = 7.1$ Hz, 3 H; CH_3), ...; $^{13}\text{C-NMR}$ (100 MHz, CDCl_3): $\delta = 14.0$ (CH_3), ...; IR (KBr): $\tilde{\nu} = 1671$ cm^{-1} , ...; UV/Vis (Methanol): $\lambda_{\text{max}}(\epsilon) = 320$ (5000), 270 nm (12000); MS (EI, 70 eV): m/z (%): 184 [$M^+ + 1$], 183 [M^+], 168 [$M^+ - \text{CH}_3$], 99 [$\text{C}_7\text{H}_{15}^+$], 84 [$\text{C}_4\text{H}_9\text{NCH}^+$], 57 [C_4H_9^+]; Elementaranalyse ber. (%) für $\text{C}_{12}\text{H}_{25}\text{N}$: C 78.62, H 13.74, N 7.64; gef.: C 78.59, H 13.99, N 7.42.

Elementaranalysen korrelieren Ausbeute und Reinheit und sollten für jedes bestimmte Element weniger als 0.3, in Ausnahmefällen auch 0.4 Prozentpunkte vom Sollwert abweichen. Sollte eine Elementaranalyse diese Kriterien nicht erfüllen, so ist eine MS-Hochauflösung anzugeben, deren Abweichung vom Sollwert höchstens 5 ppm (EI) bzw. 2 ppm (ESI) betragen darf. Eine richtige Hochauflösung bestätigt nur das Vorliegen der angegebenen Substanz, beschreibt jedoch nicht deren Reinheit.

Die Zuordnung der NMR-spektroskopischen Daten sollte so genau wie möglich erfolgen. Bezeichnung der Atompositionen entsprechend dem in der Titelzeile angegebenen IUPAC-Namen (14-H, aber C-14 !). Wenn dieser länger als drei Zeilen ist, sollte er durch eine kürzere Bezeichnung ersetzt werden. Es gilt dann die Nummerierung der angegebenen Strukturformel. Nur signifikante IR- und UV-Banden angeben.

Angabe von Röntgenstrukturanalysen: Kristallabmessungen, -system, Raumgruppe, Zellabmessungen, -volumen, $\rho_{\text{ber.}}$, $2\theta_{\text{max}}$, Strahlung, Wellenlänge, Scanmodus,

Messtemperatur, Zahl der gemessenen, der unabhängigen und der bei der Verfeinerung berücksichtigten Reflexe, σ -Schranke, ob und wie Lp- und Absorptionskorrektur durchgeführt wurden (μ , min./max. Transmission), Strukturlösungsverfahren und -programm, Verfeinerungsverfahren und -programm, Zahl der freien Parameter, Behandlung der Wasserstoffatome, R , wR , ob gegen $|F|$ oder gegen $|F|^2$ verfeinert wurde und Restelektronendichten sowie die Datenbank, bei der die detaillierten Ergebnisse hinterlegt wurden, inkl. CCDC-Nummern.

Abkürzungsverzeichnis: Hier sind nur fachliche Abkürzungen aufzunehmen (aber z. B. nicht „z. B.“, „i. d. R.“ oder „m. E.“; keine SI-Einheiten). Bitte als durchgehenden Text gestalten. Bei selteneren oder mehrdeutigen Abkürzungen diese bei der ersten Verwendung auch im Text erläutern (z. B. Nach Zugabe von Diisopropylethylamin (DIEA, „Hünig-Base“) ...). DMSO muss nicht erläutert werden, gehört aber ins Abkürzungsverzeichnis.

Masterarbeiten und Dissertationen: Die den berichteten experimentellen Daten zugrundeliegenden Spektren (und nur diese) benötige ich grafisch aufbereitet und als Rohdaten auf einer beschrifteten DVD, zusammen mit der Gesamtarbeit als pdf- und Word-Datei.

Thomas Lindel