

Kristallstrukturanalysen in einer Doktorarbeit

Wenn in einer Doktorarbeit eine oder mehrere Kristallstrukturanalysen enthalten sind, müssen die zur Überprüfung der Ergebnisse notwendigen Dateien elektronisch zur Verfügung gestellt werden.

Die Abgabe der Daten stellt keine Datensicherung gem. der „Leitlinien zum Forschungsdatenmanagement am KIT“ dar. Für die Einhaltung der Leitlinie ist der Promovend verantwortlich.

Bei der Einreichung der Arbeit sollen auf CD die folgenden Dateien abgeliefert werden:

- Crystallographic Information File (*.cif)
- Die SHELX-Ausgabedatei (*.res), wenn mit SHELX gerechnet wurde
- Die F_o und $\sigma(F_o)$ - bzw. die F_o^2 und $\sigma^2(F_o)$ -Werte (*.hkl im SHELX- oder sonstigem Format oder *.fcf im CIF-Format)

Benennung der Dateien:

*.cif, *.res und *.hkl sind nach dem Muster vorname.name.verbindung.Extension zu benennen. Beispiel: CIF der Verbindung 7 in der Arbeit von Jochen Mustermann heißt dann Jochen.Mustermann.Verbindung7.cif.