AI chemistry

MDPI

Chemical Compounds Characterization Checklist

Manuscript ID: _____

Submitting Author: _____

Compound			Characterization											
Compound Nr.	New	Known (Ref. in main text)	Physical State (purity %)	1H NMR	13C NMR	2D NMR	HRMS	IR	XRD	GC/ HPLC				Data in SI
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐

Note: insert the relevant information and select only the techniques used in this study. In the empty columns you can insert any additional methods.

Compound			Characterization											
Compound Nr.	New	Known (Ref. in main text)	Physical State (purity %)	1H NMR	13C NMR	2D NMR	HRMS	IR	XRD	GC/ HPLC				Data in SI
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐

Compound			Characterization											
Compound Nr.	New	Known (Ref. in main text)	Physical State (purity %)	1H NMR	13C NMR	2D NMR	HRMS	IR	XRD	GC/ HPLC				Data in SI
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐

Compound			Characterization											
Compound Nr.	New	Known (Ref. in main text)	Physical State (purity %)	1H NMR	13C NMR	2D NMR	HRMS	IR	XRD	GC/ HPLC				Data in SI
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐

Compound			Characterization											
Compound Nr.	New	Known (Ref. in main text)	Physical State (purity %)	1H NMR	13C NMR	2D NMR	HRMS	IR	XRD	GC/ HPLC				Data in SI
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐