Supplementary Information (SI) for New Journal of Chemistry.
This journal is © The Royal Society of Chemistry and the Centre National de la Recherche Scientifique 2026

pharmaceutics

MDPI

Chemical Compounds Characterization Checklist

Manuscript ID: with 1,2-Diphenylcyclopropenones, Gem-difluorinated cyclo propanes, Respectively: A DFT Study

Submitting Author: Qianqian Li, Feiwu Chen * and Meiju Wei *

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
olin-1-one	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☑
olin-1-one	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☑
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐

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
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐
	☐			☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐	☐