

Angewandte Berichtigung

In dieser Zuschrift waren die Plus- und Minuszeichen der Circular dichroismus (CD)-Spektren in den Figures 2b und 4b falsch zugeordnet. Die korrigierten Abbildungen sind hier wiedergegeben.

Zusätzlich wurde nach weiteren Untersuchungen festgestellt, dass die Vorzeichen der Rotationsstärken (R) für Pseudoephedrin (pED) in Abhängigkeit von den verwendeten Dichtefunktionalen variieren, die für die zeitabhängigen Dichtefunktionalrechnungen (TDDFT) verwendet wurden. Diese Variation ergibt sich aus den kleinen CD-Effekten des S_0 - S_1 -Übergangs von pED und den großen Fehlerbalken der theoretisch vorhergesagten CD-Werte. Tabelle S1 in den Hintergrundinformationen listet die R -Werte auf, die mit verschiedenen Dichtefunktionalen abgeschätzt wurden.

Conformation-Specific Circular Dichroism Spectroscopy of Cold, Isolated Chiral Molecules

A. Hong, C. M. Choi, H. J. Eun, C. Jeong, J. Heo,* N. J. Kim* — 7939–7942

Angew. Chem. 2014, 126

DOI: 10.1002/anie.201403916

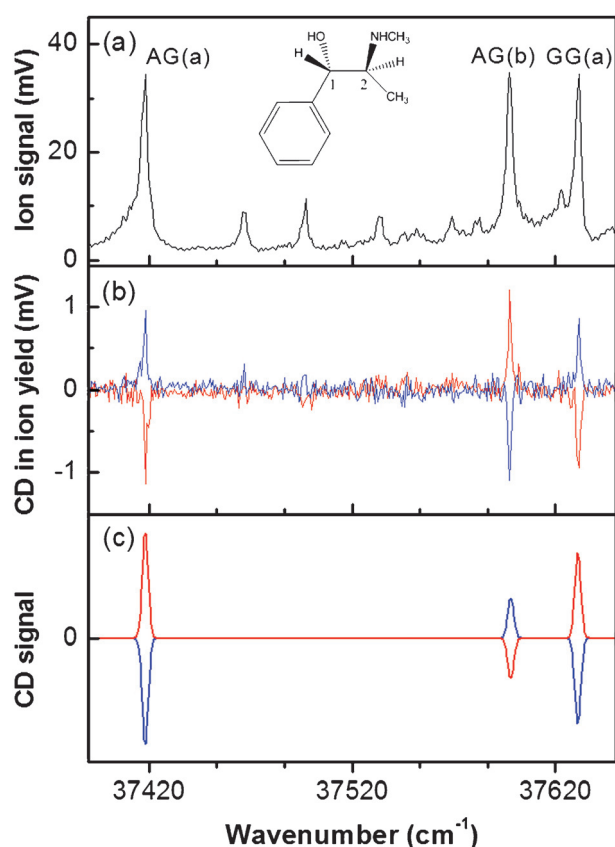


Figure 2. a) R2PI spectrum of *S*-pED near the origin band of the S_0 - S_1 transition. The inset shows the structure of *S*-pED. The number of ions produced by a single-laser pulse at the origin bands was roughly estimated as about 900. b) R2PI CD spectra of *S*- (blue line) and *R*-pED (red line). The g values at the bands of AG(a), AG(b), and GG(a) of *S*-pED were measured as $+0.026 \pm 0.005$, -0.025 ± 0.006 , and $+0.024 \pm 0.005$, respectively. c) Theoretical CD spectra of *S*- (blue line) and *R*-pED (red line) obtained with the rotatory strength, R , calculated using TDDFT at the M06-2X/6-311++G(d,p) level.

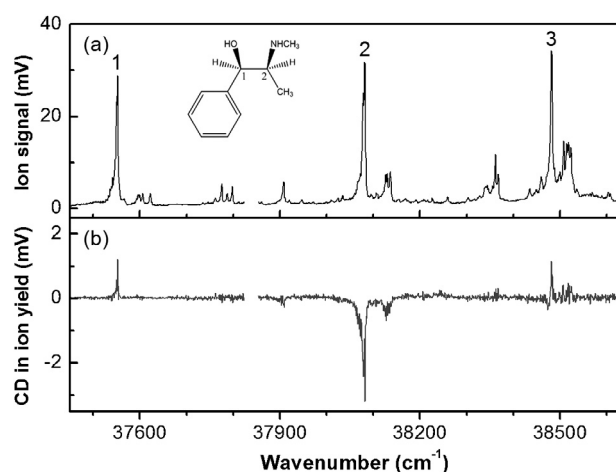


Figure 4. a) R2PI spectrum of *R*-ED near the origin band of the S_0 - S_1 transition. The inset shows the structure of *R*-ED. The discontinuous region between 37825 and 37855 cm^{-1} is where the grating order of the dye laser changes. b) R2PI CD spectrum of *R*-ED. The g values of 1–3 bands were measured as $+0.030 \pm 0.011$, -0.091 ± 0.007 , and $+0.041 \pm 0.013$, respectively.