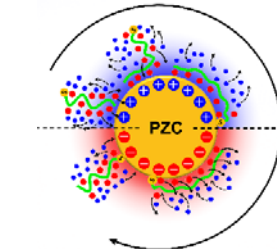
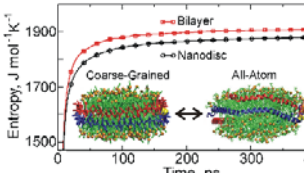
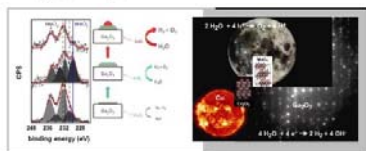
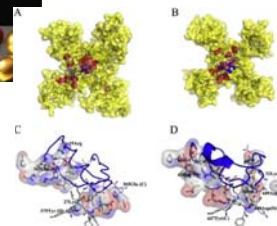
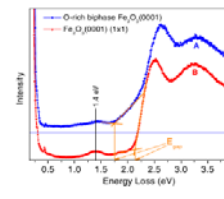
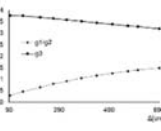
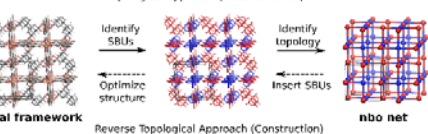
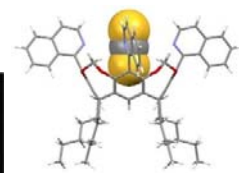
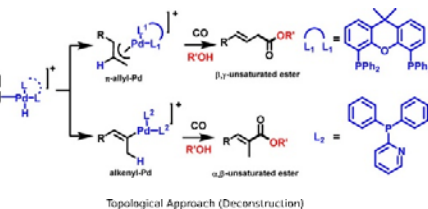
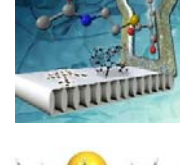
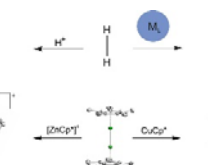
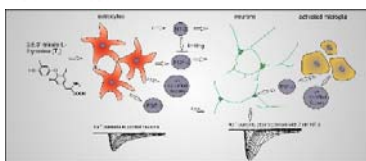
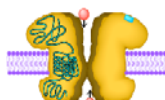
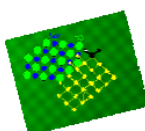
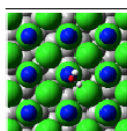
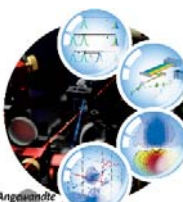
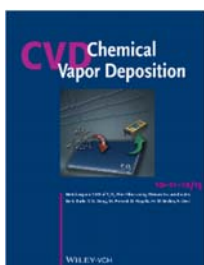
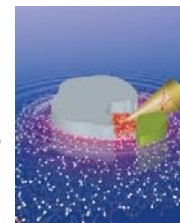
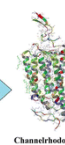
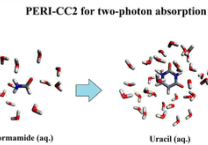
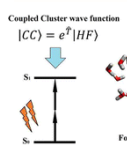
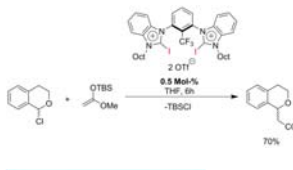
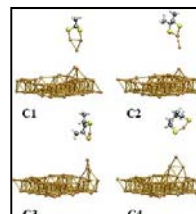
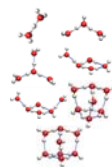
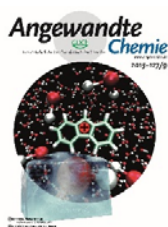
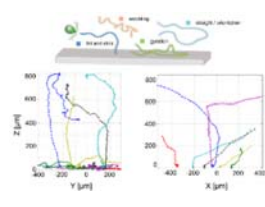
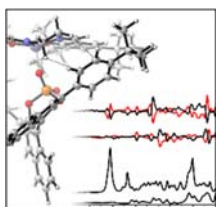


## Research 2015

Faculty of Chemistry and Biochemistry  
Ruhr-University Bochum

## Forschung 2015

Fakultät für Chemie und Biochemie  
Ruhr-Universität Bochum



## Inhaltsverzeichnis / Table of content

|                                                                                                      |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Analytische Chemie/Analytical Chemistry.....                                                         | 4  |
| Analytical Chemistry - Center for Electrochemical Sciences (CES).....                                | 4  |
| Analytical Chemistry - Biointerfaces.....                                                            | 5  |
| Analytical Chemistry - Micro-/Nano-Electrochemistry.....                                             | 6  |
| Anorganische Chemie / Inorganic Chemistry .....                                                      | 7  |
| Inorganic Chemistry I – Bioinorganic Chemistry.....                                                  | 7  |
| Inorganic Chemistry I - Bioinorganic Chemistry.....                                                  | 8  |
| Inorganic Chemistry II - Chemistry of Inorganic Materials .....                                      | 9  |
| Inorganic Chemistry II - Organometallics and Materials .....                                         | 10 |
| Inorganic Chemistry II - Computational Materials Chemistry .....                                     | 11 |
| Physikalische Chemie / Physical Chemistry .....                                                      | 12 |
| Physical Chemistry I - Dynamics of Atomic and Molecular Structures .....                             | 12 |
| Physical Chemistry II - Ultrafast Photochemistry .....                                               | 13 |
| Physical Chemistry II - Laserspectroscopy and Biophotonics.....                                      | 14 |
| Physical Chemistry II - Biopolymers in Vivo.....                                                     | 15 |
| Biochemie / Biochemistry .....                                                                       | 16 |
| Biochemistry I – Receptor Biochemistry.....                                                          | 16 |
| Biochemistry II – Biomolecular Spectroscopy .....                                                    | 17 |
| Biochemistry II – Electrochemistry of neutral Cells.....                                             | 18 |
| Didaktik der Chemie / Didactics of Chemistry.....                                                    | 19 |
| Didactics of Chemistry .....                                                                         | 19 |
| Organische Chemie / Organic Chemistry .....                                                          | 20 |
| Organic Chemistry I – Organocatalysis and Supramolecular Chemistry.....                              | 20 |
| Organic Chemistry I – Chemistry and Biochemistry of Natural Products.....                            | 21 |
| Organic Chemistry II – Chirality and Vibrational Optical Activity.....                               | 22 |
| Organic Chemistry II - Physical Organic Chemistry .....                                              | 23 |
| Organic Chemistry II - Organic Synthesis and Catalysis.....                                          | 24 |
| Technische Chemie / Industrial Chemistry.....                                                        | 25 |
| Industrial Chemistry – Heterogeneous Catalysis .....                                                 | 25 |
| Theoretische Chemie / Theoretical Chemistry.....                                                     | 26 |
| Theoretical Chemistry – Neural Network Methods for Katalysis and Materials Science.....              | 26 |
| Theoretical Chemistry - Density Matrix Renormalization Group for Complex Molecular Systems .....     | 27 |
| Theoretical Chemistry – Development of Response Methods, Photochemistry and Optical Properties ..... | 28 |
| Theoretical Chemistry – Dynamic ab initio Calculations .....                                         | 29 |
| Theoretical Chemistry – Molecular Simulation.....                                                    | 30 |
| Theoretische Chemie – Quantum Chemistry .....                                                        | 31 |
| Theoretical Chemistry – Evonik Performance Materials GmbH .....                                      | 32 |
| List of Publications .....                                                                           | 33 |
| Awarded PhD in 2015 .....                                                                            | 48 |

Another year has passed in which the research groups at the Faculty of Chemistry and Biochemistry of the Ruhr-University Bochum have again accomplished a lot. This report underlines the diversity of research performed in the year 2015.

In this year, the compilation of the report has been newly organized and was entirely done by the participants of the internship “Introduction to the Scientific Community” (ITSC). Master students were in contact with the principal investigators of the faculty, collecting the highlights and assembling them into this report. This was a valuable experience for all students involved in this project, initiating knowledge exchange between students and researchers. In addition, it has helped us to improve many important secondary skills such as organization, communication, group work, leadership, scientific publication editing, and many others.

For more information on the scientific content of this volume, you are welcome to contact the research groups directly by following the links, email addresses or telephone numbers listed in the research highlights or to visit the website of our faculty at <http://www.chemie.rub.de/>.

We hope you enjoy reading.

With the best regards

**Faculty Report Editorial Officer (FREO) Team of the ITSC Internship 2015/16**

Chetana Badala Viswanatha

Dennis Enkelmann

Julia Golbek

Pawel Naliwajko

Poorva Ramadas Narasimhamurthy

### Wolfgang Schuhmann

Analytical Chemistry - Center for Electrochemical Sciences (CES)

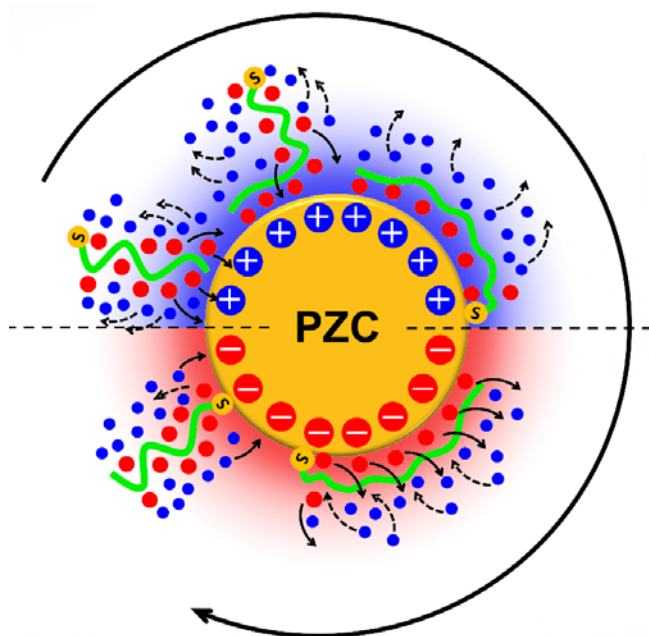
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683

email: [wolfgang.schuhmann@rub.de](mailto:wolfgang.schuhmann@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/elan>

D. Jambrec, M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 15064-15068. Potential-assisted DNA immobilization as a prerequisite for fast and controlled formation of DNA monolayers. *Angew. Chem.* **127** (2015) 15278-15283. Potentialgestützte DNA-Immobilisierung als Voraussetzung für eine schnelle und kontrollierte Bildung von DNA-Monoschichten.

Highly reproducible and fast potential-assisted single-stranded (ss)DNA immobilization on gold surfaces is described. The proposed method significantly accelerates the ssDNA immobilization by a pulse-type potential modulation. The desired DNA coverage can be obtained in a highly reproducible way within minutes. Understanding the underlying processes occurring during potential-assisted ssDNA immobilization is crucial. We propose a model that considers the role of ions surrounding the DNA strands, the distance dependence of the applied potentials within the electrolyte solution and most importantly the shift of the potential of zero charge during the course of the immobilization due to the surface modification with DNA. The control of the surface coverage of ssDNA as well as the achieved speed and high reproducibility are seen as prerequisites for improved DNA-based bioassays.



Die Immobilisierung von DNA-Einzelsträngen auf Goldoberflächen kann hoch-reproduzierbar mittels einer geeigneten Potentialpulssequenz substantiell beschleunigt werden. Die gewünschte Oberflächenbelegung an einzelsträngiger DNA kann innerhalb weniger Minuten erhalten werden. Entscheidend ist das tiefe Verständnis der zugrundeliegenden Prozesse. Wir schlagen ein Modell vor, das sowohl die Rolle der Ionen in der Umgebung der elektrifizierten Grenzfläche und der DNA-Stränge als auch die Distanz, in der das angelegte Potential einen Einfluss auf die DNA-Einzelstränge in der Nähe der elektrifizierten Grenzfläche hat, berücksichtigt. Auch die Verschiebung des Nullladungspotentials (potential of zero charge – pzc) der Elektrode, die durch die Oberflächenmodifizierung durch die DNA-Stränge hervorgerufen wird, wird berücksichtigt und ist von besonderer Bedeutung. Die

Kontrolle der Oberflächenbedeckung von der Einzelstrang-DNA in Kombination mit der erreichten Geschwindigkeit und Reproduzierbarkeit sind eine Voraussetzung für verbesserte DNA-basierte Bioassays.

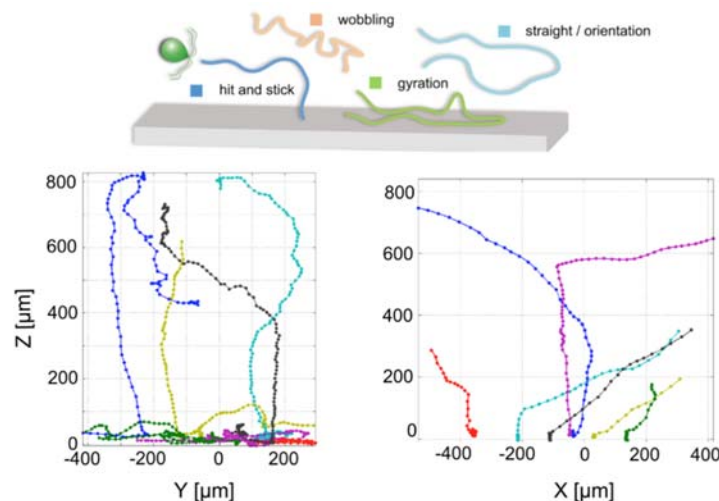
### Axel Rosenhahn

Analytical Chemistry - Biointerfaces

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: +492343224200; FAX +49-234-3214420; email: axel.rosenhahn@rub.de; ww.rub.de/biointerfaces

S.M. Vater, J. Finlay, M.E. Callow, J.A. Callow, T. Ederth, B. Liedberg, M. Grunze, A. Rosenhahn, *Biofouling* **31(2)** (2015) 229. Holographic microscopy provides new insights into the settlement of zoospores of the green alga *Ulva linza* on cationic oligopeptide surfaces.



Interaction of zoospores of the green algae *Ulva linza* with cationic, arginine-rich oligopeptide self-assembled monolayers (SAM) is characterized by rapid settlement. Some spores settle (i.e. permanently attach) in a 'normal' manner involving the secretion of a permanent adhesive, retraction of the flagella and cell wall formation, whilst others undergo 'pseudo-settlement' whereby motile spores are trapped (attached) on the SAM surface without undergoing the normal metamorphosis into a settled spore. Holographic microscopy was used to record videos of swimming zoospores in the vicinity of surfaces with different cationic oligopeptide concentration to provide time-resolved insights into processes associated with attachment of spores. The data reveal that spore attachment rate increases with increasing cationic peptide content. Accordingly, the decrease in swimming activity in the volume of seawater above the surface accelerated with increasing surface charge. Three-dimensional trajectories of individual swimming spores showed a 'hit and stick' motion pattern, exclusively observed for the arginine-rich peptide SAMs, whereby spores were immediately trapped upon contact with the surface.

Sporen der Grünalge *Ulva linza* wechselwirken stark mit kationischen, argininhaltigen Oligopeptidmonolagen. Einige Sporen siedeln normal, was die Ausscheidung eines permanenten Klebstoffs, Zurückziehen der Flagellen und Bildung einer Zellwand beinhaltet. Auf kationischen Peptiden wird jedoch auch eine "Pseudobesiedelung" beobachtet, in der Sporen von den Peptiden eingefangen werden ohne über eine normale Metamorphose zu haften. Hier wurde holographische Mikroskopie verwendet um Videos schwimmender Sporen in der Nähe von Oberflächen mit unterschiedlichem Arginingehalt aufzuzeichnen und zeitaufgelöste Informationen über den Anhaftungsprozess zu generieren. Die Daten zeigen, dass die Besiedelungsrate mit dem kationischen Anteil in den Monolagen steigt. Entsprechend wurde eine schnelle Abnahme der Schwimmaktivität in dem Flüssigkeitsvolumen über der Oberfläche gefunden. Vor allem das Auftreten eines 'hit and stick' Verhaltens zeigt eine sehr starke Wechselwirkung der kationischen Peptide mit den Algensporen.

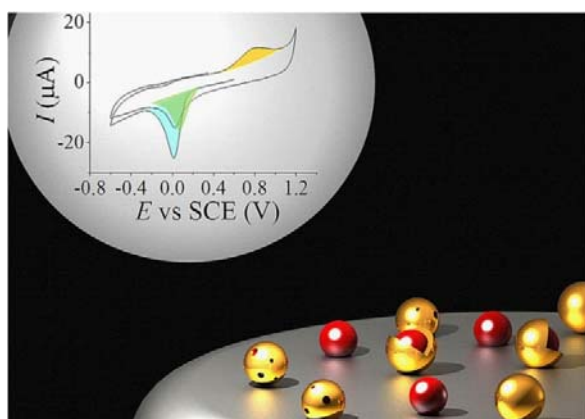
### Kristina Tschulik

Analytical Chemistry - Micro-/Nano-Electrochemistry  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3229433; FAX: ++49-(0)234-3214420

email: kristina.tschulik@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/nanoec>

K. Tschulik, K. Ngamchuea, C. Ziegler, M. G. Beier, C. Damm, A. Eychmueller, R. G. Compton, *Adv. Funct. Mater.* **25** (2015) 5149-5158. Core-shell nanoparticles: characterizing multifunctional materials beyond imaging-distinguishing and quantifying perfect and broken shells.



Core-shell nanoparticles (NPs) are amongst the most promising candidates in the development of new functional materials. Their fabrication and characterization are challenging, in particular when thin and intact shells are needed. To date no technique has been available that differentiates between intact and broken or cracked shells. Here a method is presented to distinguish and quantify these types of shells in a single cyclic voltammetry experiment by using the different electrochemical reactivities of the core and the shell material. A simple comparison of the charge measured during the stripping of the core material before and after the

removal of the shell makes it possible to determine the quality of the shells and to estimate their thickness. As a proof-of-concept two multifunctional examples of core-shell NPs,  $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Au}$  and  $\text{Au}@\text{SnO}_2$ , are used. This general and original method can be applied whenever core and shell materials show different redox properties. Because billions of NPs are probed simultaneously and at a low cost, this method is a convenient new screening tool for the development of new multifunctional core-shell materials and is hence a powerful complementary technique or even an alternative to the state-of-the-art characterization of core-shell NPs by Transmission Electron Microscopy (TEM).

Kern-Schale Nanopartikel (NP) sind einer der vielversprechendsten Kandidaten zur Entwicklung neuer Funktionsmaterialien. Ihre Herstellung und Charakterisierung sind anspruchsvoll, besonders wenn dünne Schalen benötigt werden. Bislang gibt es kein Verfahren, das es gestattet zwischen dichten und porösen oder unvollständigen Schalen zu unterscheiden. Hier wird eine elektrochemische Methode vorgestellt, die es ermöglicht in einem einzigen zykl voltammetrischen Experiment (CV) zwischen diesen Schalentypen zu unterscheiden. Die verschiedenen elektrochemischen Reaktivitäten des Kern- und des Schalenmaterials ermöglichen es darüber hinaus, quantitative Aussagen zu deren Durchmesser und Dicke zu treffen. Ein einfacher Vergleich der Ladung, die bei der Auflösung des Kernmaterials vor und nach der Auflösung der Schale fließt, ermöglicht es die Qualität und Dicke der Schale zu bestimmen. Zwei multifunktionale Kern-Schale Systeme,  $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Au}$  und  $\text{Au}@\text{SnO}_2$ , werden als Modellbeispiele genutzt. Die vorgestellte Methode kann immer dann genutzt werden, wenn Kern und Schale verschiedene Redox Eigenschaften haben. Dies ist bei multifunktionalen Partikeln fast stets der Fall, da meist edle und unedle Elemente oder Metalle und Oxide miteinander kombiniert werden. Mit dieser neuen Methode können Milliarden von NP gleichzeitig und kostengünstig untersucht werden, so dass sie ein geeignetes, neues Untersuchungsinstrument für die Entwicklung neuer, multifunktionaler Kern-Schale Materialien ist und komplementär oder alternativ zur konventionellen Charakterisierung mittels Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) nutzbar ist.

## Anorganische Chemie / Inorganic Chemistry

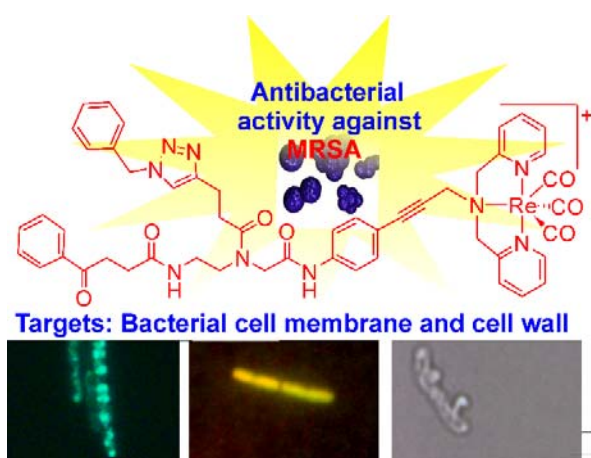
Nils Metzler-Nolte

Inorganic Chemistry I – Bioinorganic Chemistry  
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224153; FAX: ++49-(0)234-3214378

email: [Nils.Metzler-Nolte@rub.de](mailto:Nils.Metzler-Nolte@rub.de); <http://www.chemie.rub.de/ac1/>

M. Patra, M. Wenzel, P. Prochnow, V. Pierroz, G. Gasser, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Chem. Sci.* **6** (2015) 214 – 224. An organometallic structure-activity relationship study reveals the essential role of a  $\text{Re}(\text{CO})_3$  moiety in the activity against gram-positive pathogens including MRSA



The worrying appearance of microbial resistance to antibiotics is a worldwide problem which needs to be tackled urgently. Microbial resistance to the common classes of antibiotics involving purely organic compounds unfortunately develops very rapidly and in most cases, resistance was detected soon after or even before release of the antibiotic to the market. Therefore, novel concepts for antibiotics must be investigated, and metal-containing compounds hold particular promise in that area. Taking a trimetallic complex from our earlier work which contains a ferrocenyl (Fc), a  $\text{CpMn}(\text{CO})_3$  (cymantrene) and a  $[(\text{dpa})\text{Re}(\text{CO})_3]$  residue as the lead structure, a systematic structure-activity relationship (SAR)

study against various gram-positive pathogenic bacteria including methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) strains was performed in this work. The  $[(\text{dpa})\text{Re}(\text{CO})_3]$  moiety was discovered to be the essential unit for the observed antibacterial activity. Microbiological studies on membrane potential, membrane permeabilization, and cell wall integrity revealed that our compound targets the bacterial membrane and disturbs cell wall integrity.

Die rasante Zunahme von Resistenzen gegen marktübliche Antibiotika ist weltweit ein Problem. In der Tat wurde Resistenzentwicklung gegen viele der marktüblichen Antibiotika sehr schnell nach ihrer Markteinführung, und manchmal sogar schon davor, beobachtet. Dies macht die Erforschung neuer Antibiotika dringend erforderlich, und gerade metallhaltige Verbindungen haben hierzu ein besonderes Potential. In dieser Arbeit haben wir eine trimetallische Verbindung, die wir bereits früher als besonders aktiv erkannt hatten, in der Tiefe untersucht. Eine systematische Struktur-Wirkungs-Untersuchung wurde gegen verschiedene pathogene Bakterien, darunter auch Methicillin-resistente *Staphylococcus aureus* (MRSA) Keime durchgeführt, indem wir alle drei Metallfragmente (Ferrocen, Cymantren, und einen Dipicolyl-amin( $\text{Re}(\text{CO})_3$ )-Rest) systematisch durch Phenylringe ersetzten. Nur die  $\text{Re}(\text{CO})_3$ -Einheit stellte sich als essentiell für eine antibiotische Aktivität heraus. Weitergehende mikrobiologische Studien zum Membranpotential, Membranpermealisation, und Zellwandintegrität zeigten, daß diese Verbindungsklasse in der Tat an der Zellwand der Bakterien angreift und deren Integrität zerstört.

### Klaus Merz

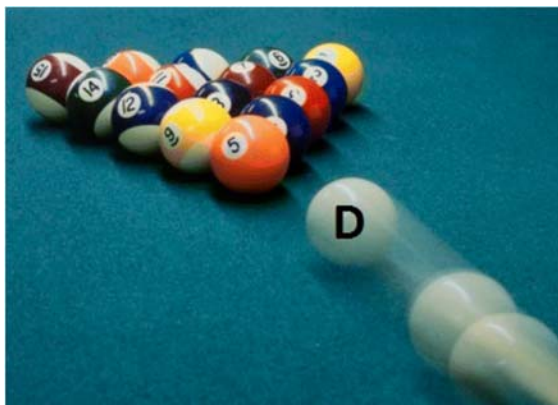
Inorganic Chemistry I - Bioinorganic Chemistry

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224187; FAX: ++49-(0)234-3214378

email: [klaus.merz@rub.de](mailto:klaus.merz@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac1/merz/>

K. Merz, A. Kupka, *Cryst. Growth Des.*, **15** (2015) 1553-1558. Deuterium perturbs the molecular arrangement in the solid state.



Hydrogen/deuterium (H/D) exchange is generally seen as a negligible criterion in the formation of the crystal structures of chemical compounds. On the other hand, it can be shown that the aggregation of molecules in the solid state of selected organic and inorganic compounds can be very sensitive to the small H/D change in the isotopic substitution pattern of the considered molecules or the use of deuterated solvents during the crystallization process. This perspective highlights the extraordinary aggregation behavior in certain cases of deuterated versus nondeuterated small inorganic and organic compounds. We show that the aggregation of molecules in the solid state is very sensitive

to small changes within the substitution pattern of the molecules. Deuterium substitution as a weak directing substituent may have quite an influence on the molecular arrangement. This phenomenon is not only restricted to compounds with the absence of strong specific intermolecular interactions in crystal structures, like acridine, pyridine, pyridine-N-oxide, or alloxane. H/D exchange can influence hydrogen bonds, and as result the crystal structure, which is shown in the cases of oxalic acid dihydrate or trifluoroacetic acid tetrahydrate. Particularly striking in the last example is the rearrangement of the condensed six- and four-membered oxygen rings of the hydrogen bonded H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O molecules. Another interesting fact is that an isotopic effect can also be observed in the usage of solvents in crystallization procedures. The formation of polymorphic forms and the amount of water/heavy water can be controlled in the cases of acridine, glycine, and ionic liquids.

Im Allgemeinen wird der Wasserstoff/Deuterium- (H/D) Austausch als ein vernachlässigbares Kriterium bei der Bildung von Kristallstrukturen gesehen. Doch zeigt sich, dass die Aggregation ausgewählter organischer und anorganischer Moleküle im Festkörper sowohl durch die kleine H/D Änderung im Substitutionsmuster, als auch durch Verwendung von deuterierten Lösungsmitteln im Kristallisationsprozess sehr empfindlich beeinflusst werden kann. Dieses Phänomen ist nicht nur auf Verbindungen wie Acridin, Pyridin, Pyridin-N-oxid, oder Alloxan beschränkt, bei denen keine starken intermolekularen Wechselwirkungen beobachtet werden. Untersuchungen ergaben, dass durch H/D-Austausch die strukturdirigierenden intermolekularen Wasserstoffbrückenbindungen in Kristallstrukturen wie Oxalsäure Dihydrat oder Trifluoressigsäure Tetrahydrat signifikant verändert wird und folglich abweichende polymorphe Formen erhalten werden. Des Weiteren zeigt sich, dass das polymorphe Verhalten von Verbindungen wie Acridin, Glycin und ionischen Flüssigkeiten auch erfolgreich durch Verwendung von deuterierten Solventien gesteuert werden kann.

### Anjana Devi

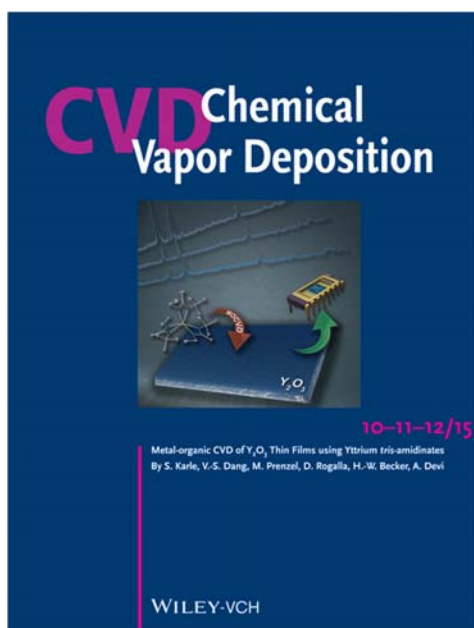
Inorganic Chemistry II - Chemistry of Inorganic Materials

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224150; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: [anjana.devi@rub.de](mailto:anjana.devi@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2/devi/>

S. Karle, V.-S. Dang, M. Prenzel, D. Rogalla, H.-W. Becker, A. Devi, *Chem. Vap. Deposition* **21** (2015) 335-342. Metal-Organic CVD of  $\text{Y}_2\text{O}_3$  thin films using yttrium *tris*-amidinates.



$\text{Y}_2\text{O}_3$  is of particular interest, due to its unique features, such as high mechanical strength, high melting point, high thermal conductivity and refractive index as well as a relatively high dielectric constant. Thus, it is very well suited *e.g.* for protective coatings, waveguide applications or as dielectric material in micro-electronic devices. Metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) is a very promising technique for large-scale fabrication of thin films and offers distinct advantages over physical vapor deposition techniques. However, there are only few reports about MOCVD of Y containing thin films, since it relies on precursors with the right combination of volatility, stability, and decomposition characteristics. This is the first report of successfully grown  $\text{Y}_2\text{O}_3$  by MOCVD using Y amidinates, namely *tris*(*N,N'*-diisopropylacetamidinato) yttrium and *tris*(*N-tertbutyl-N*-ethylacetamidinato) yttrium. Both have been successfully synthesized and evaluated regarding their suitability as CVD precursors for  $\text{Y}_2\text{O}_3$ . High-quality thin films with negligible impurities, low leakage currents, and literature-conform optical band gaps have been obtained *via* a facile O-assisted MOCVD process.

$\text{Y}_2\text{O}_3$  ist von besonderem Interesse, da es einzigartige Eigenschaften, wie z.B. eine hohe mechanische Festigkeit, einen hohen Schmelzpunkt, eine hohe Wärmeleitfähigkeit, sowie einen hohen Brechungsindex und eine vergleichsweise hohe Dielektrizitätskonstante besitzt. Aus diesem Grund eignet es sich bestens als abriebfeste Schutzschicht, aber auch als Wellenleiter in Festkörperlasern oder als Dielektrikum für Anwendungen in der Mikroelektronik. Metallorganische chemische Gasphasenabscheidung, kurz MOCVD bietet einige Vorteile gegenüber physikalischer Gasphasenabscheidung und ist somit eine vielversprechende Beschichtungstechnik für die Großfertigung von Dünnschichten. Es existieren jedoch nur wenige Berichte über die MOCVD von Y-haltigen Dünnschichten, da hierfür Präkursoren mit der richtigen Kombination aus Verdampfbarkeit, thermischer Stabilität sowie entsprechenden Zersetzeigenschaften erforderlich sind. Es handelt sich hierbei um den ersten Bericht über die erfolgreiche Herstellung von  $\text{Y}_2\text{O}_3$  mittels MOCVD basierend auf den beiden Y Precursoren *tris*-(*N,N'*-Diisopropylacetamidinato) Yttrium und *tris*-(*N-Tertbutyl-N*-Ethylacetamidinato) Yttrium. Beide Verbindungen wurden erfolgreich hergestellt und hinsichtlich ihrer Eignung als CVD-Präkursoren für  $\text{Y}_2\text{O}_3$  untersucht. Sie ermöglichen die direkte Herstellung qualitativ hochwertiger Dünnschichten durch einen sauerstoff-assistierten MOCVD-Prozess, wobei die Filme niedrige Leckströme, literaturkonforme optische Bandlücken und vernachlässigbar geringe organische Verunreinigungen aufwiesen.

## Roland A. Fischer

Inorganic Chemistry II - Organometallics and Materials

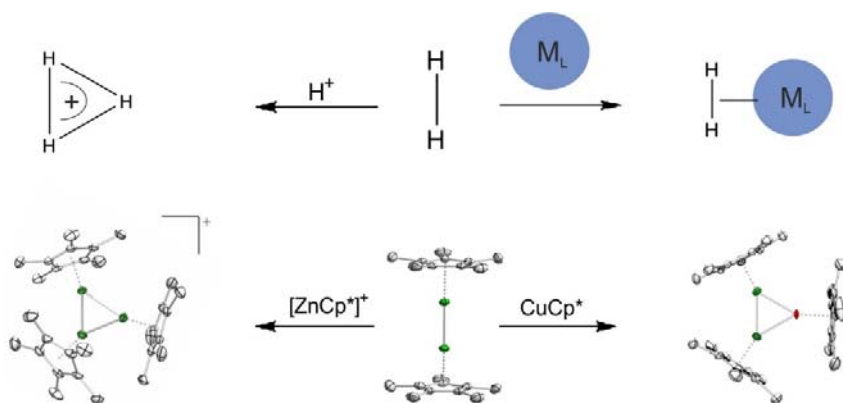
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224174; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: [roland.fischer@rub.de](mailto:roland.fischer@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2>

K. Freitag, C. Gemel, P. Jerabek, I. M. Oppel, R. W. Seidel, G. Frenking, H. Banh, K. Dilchert, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 4370-4374. The sigma-aromatic clusters  $[\text{Zn}_3]^+$  and  $[\text{Zn}_2\text{Cu}]$ : embryonic brass.

The chemistry of metals is widely studied and of high interest, due to their high appearance and great variety. The range of the different structural and physical properties of each of the metals is already broad, but the combination of different metals, forming binary, tertiary or even systems with more components, leads to an infinite number of intermetallic materials and compounds. In this context, the investigation of smallest molecular intermetallic units is valuable and of high interest, but rarely represented in literature. We recently discovered the synthesis of the triangular clusters  $[\text{Zn}_3\text{Cp}^*_3]^+$  and  $[\text{Zn}_2\text{CuCp}^*_3]$ . Both systems serve as embryonic models for zinc and brass, the classic textbook example of a Hume-Rothery phase. Quantum chemical calculations revealed a high degree of  $\sigma$ -aromaticity, comparable with the triatomic hydrogen atom  $[\text{H}_3]^+$ , which is the most abundantly generated ion in the universe and the most simple example for a delocalized 3c2e bond. This electronic similarity implies a comparable reaction pattern of  $[\text{Zn}_2\text{Cp}^*_2]$  and  $\text{H}_2$ . Indeed, our studies demonstrated that  $[\text{Zn}_3\text{Cp}^*_3]^+$  and  $[\text{Zn}_2\text{CuCp}^*_3]$  can nicely be compared to classic Kubas type dihydrogen complexes.



Die Chemie der Metalle ist aufgrund ihres häufigen Vorkommens und ihrer Varietät ein weit erforschtes Gebiet von hohem Interesse. Die Spanne an strukturellen und physikalischen Eigenschaften der einzelnen Metalle ist bereits hoch, werden diese jedoch zu binären, tertiären oder Mehrkomponenten-Systemen kombiniert, ergibt sich daraus der Zugang zu einer nahezu unendlichen

Anzahl an intermetallischen Verbindungen verschiedenster Strukturen und Eigenschaften. In diesem Zusammenhang ist auch die Erforschung kleinster molekularer, intermetallischer Bausteine wertvoll, vergleichsweise jedoch weitaus weniger in der Literatur zu finden. Uns gelang die Synthese der Dreiringe  $[\text{Zn}_3\text{Cp}^*_3]^+$  und  $[\text{Zn}_2\text{Cu}]$ , welche beide als kleinste Bausteine für Zink und Messing, der klassischsten Hume-Rothery Phase, beschrieben werden können. Quantenchemische Berechnungen zeigen ein hohes Maß an  $\sigma$ -Aromatizität, vergleichbar mit dem Triwasserstoffkation  $[\text{H}_3]^+$ , einem der am häufigsten gebildeten Ionen im Universum und dem einfachsten Beispiel einer 3z-2e-Bindung. Dieser elektronische Vergleich impliziert ein analoges Reaktionsverhalten von  $[\text{Zn}_2\text{Cp}^*_2]$  und  $\text{H}_2$ , und unsere Studien belegen, dass  $[\text{Zn}_3\text{Cp}^*_3]^+$  und  $[\text{Zn}_2\text{CuCp}^*_3]$  mit den klassischen Kubas Diwasserstoffkomplexen verglichen werden können.

### Rochus Schmid

Inorganic Chemistry II - Computational Materials Chemistry

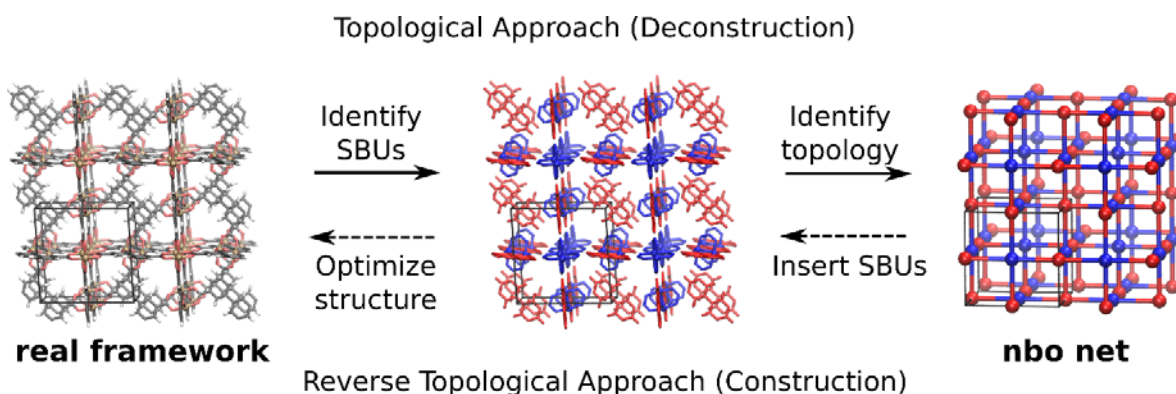
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224166; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: [Rochus.Schmid@ruhr-uni-bochum.de](mailto:Rochus.Schmid@ruhr-uni-bochum.de); <http://www.rochusschmid.de>

S. Bureekaew, V. Balwani, S. Amirjalayer, R. Schmid, *CrystEngComm* **17** (2015) 344-352. Isorecticular isomerism in 4,4-connected paddle-wheel metal–organic frameworks: structural prediction by the reverse topological approach.

One of the main advantages of Metal-Organic Frameworks (MOFs) over other porous materials is their tunability in terms of pore space and size. By a design of the building blocks, many different network topologies can be realized, which are usually rationalized by the topological analysis. Over the years, our group has developed a theoretical methodology to predict MOF structures by a reversed topological approach (RTA), starting from an enumeration of topologies or network structure as a “blueprint”. Importantly, the topology often does not define the atomistic structure in a unique way, and the RTA is based on a systematic screening of supramolecular isomers by a genetic algorithm global search, using our first principles parameterized force field MOF-FF. In this work the power of the method is demonstrated on a class of 4,4-connected MOFs with high surface area and gas storage capacity. In particular, we could explain the two phases synthesized experimentally for a particular linker and could generalize this observation to other systems.



Einer der wesentlichen Vorteile metallorganischer Netzwerke (MOFs) gegenüber anderen porösen Materialien ist die Einstellbarkeit von Porenform und -größe. Durch das Design der Baueinheiten lassen sich viele verschiedene Netzwerk-Topologien erhalten, welche üblicherweise durch eine topologische Analyse erklärt werden. Über die Jahre hat unsere Arbeitsgruppe nun einen reversen topologischen Ansatz (RTA) entwickelt, mit dem sich MOF Strukturen vorhersagen lassen, ausgehend von einer Auflistung von Topologien oder Netzwerkstrukturen als „Blaupause“. Wichtig ist hier zu bedenken, dass die Topologie oft nicht genügt, um die atomistische Struktur eindeutig zu definieren, weshalb der RTA ein systematisches Absuchen der möglichen supramolekularen Isomere durch einen genetischen Algorithmus, unter Verwendung unseres ab initio parameterisierten Kraftfeldes MOF-FF, beinhaltet. In dieser Arbeit wurde die Stärke der Methode am Beispiel von 4,4-vernetzten MOFs mit hoher innerer Oberfläche und Gas-Speicherkapazität demonstriert. Insbesondere konnten die beiden experimentell beobachteten Phasen, die für einen bestimmten Linker auftreten, erklärt, und diese Beobachtung für andere Systeme generalisiert werden.

## Physikalische Chemie / Physical Chemistry



**Karina Morgenstern**

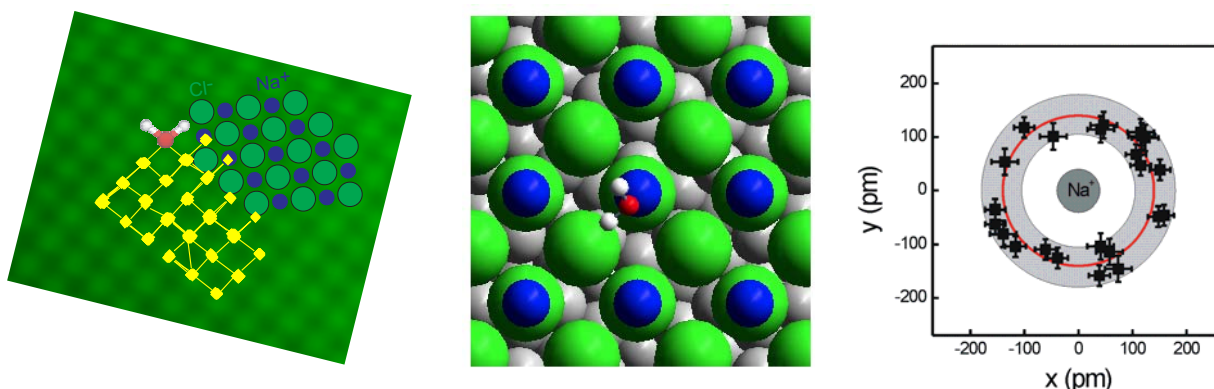
Physical Chemistry I - Dynamics of Atomic and Molecular Structures  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3222925; FAX: ++49-(0)234-3214182

email: karina.morgenstern@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc1>

S.-C. Heidorn, C. Bertram, P. Cabrera-Sanfelix, K. Morgenstern, *ACS Nano* **9** (2015) 3572-3578.  
Consecutive mechanism in the diffusion of D<sub>2</sub>O on a NaCl(100) bilayer.

The motion of D<sub>2</sub>O monomers is investigated on a NaCl(100) bilayer on Ag(111) between 42.3 and 52.3 K by scanning tunneling microscopy. The diffusion distance histogram reveals a squared diffusion lattice that agrees with the primitive unit cell of the (100) surface. From the Arrhenius dependence, we derive the diffusion energy, the pre-exponential factor, and the attempt frequency. The mechanism of the motion is identified by comparison of the experimental results to theoretical calculations. Via low temperature adsorption site determination in connection with density functional theory, we reveal an influence of the metallic support onto the intermediate state of the diffusive motion.



The figure summarizes the results: An atomically resolved image of NaCl(100) layer (on left-hand side) shows protrusions above the chlorine ions. Sodium ions are imaged as depressions. An adsorbed water molecule jumps from Na<sup>+</sup> to Na<sup>+</sup> site as the path of one molecule (in yellow) demonstrates. Each square in the image corresponds to one position visited by a molecule during a movie measured at 46.8 K. Theoretical calculations (middle) confirm that the water molecule is adsorbed close to a Na<sup>+</sup> site. Only if the Ag-substrate (grey balls) is considered in the calculation, the molecule can adopt different positions on a circle around an Na<sup>+</sup> site as determined in experiment (on right-hand side). Each of the squares in the graph corresponds to one molecule position determined experimentally.

### Patrick Nuernberger

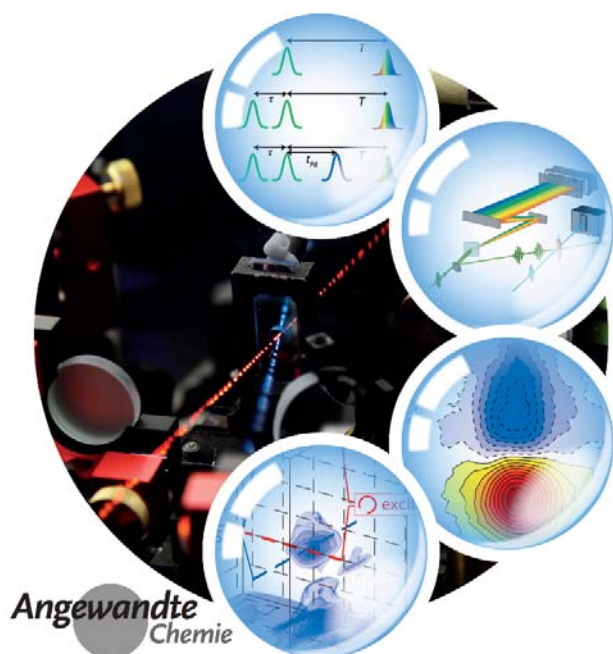
Physical Chemistry II - Ultrafast Photochemistry

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: +49-(0)234-3229946; FAX: +49-(0)234-3214293

email: [patrick.nuernberger@rub.de](mailto:patrick.nuernberger@rub.de); <http://www.rub.de/ag-nuernberger/>

P. Nuernberger, S. Ruetzel, T. Brixner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 11368-11386. Multidimensional electronic spectroscopy of photochemical reactions. *Angew. Chem.* **127** (2015) 11526-11546. Multidimensionale elektronische Spektroskopie photochemischer Reaktionen.



Coherent multidimensional electronic spectroscopy can be employed to unravel various channels in molecular chemical reactions. This approach is thus not limited to analysis of energy transfer or charge transfer (i.e. processes from photophysics), but can also be employed in situations where the investigated system undergoes permanent structural changes (i.e. in photochemistry). Photochemical model reactions are discussed by using the example of merocyanine/spiropyran-based molecular switches, which show a rich variety of reaction channels, in particular ring opening and ring closing, *cis-trans* isomerization, coherent vibrational wave-packet motion, radical ion formation, and population relaxation. Using pump-probe, pump-repump-probe, coherent two-dimensional and three-dimensional, triggered-exchange 2D, and quantum-control spectroscopy, we gain intuitive pictures on which product emerges from which reactant and which reactive molecular modes are associated.

Kohärente multidimensionale Spektroskopie kann zur Aufklärung verschiedener Reaktionskanäle in chemischen Reaktionen genutzt werden. Diese Herangehensweise ist daher nicht auf die Analyse von Energie- oder Ladungstransfer beschränkt (d.h. auf Photophysik), sondern sie kann auch dann angewendet werden, wenn das untersuchte System dauerhafte Strukturveränderungen vollzieht (d.h. in der Photochemie). Photochemische Modellreaktionen werden anhand eines molekularen Schalters auf Merocyanin-/Spiropyranbasis behandelt, der vielfältige Reaktionskanäle aufweist, darunter eine Ringöffnungs- und Ringschlussreaktion, *cis-trans*-Isomerisierung, kohärente Schwingungswellenpaketbewegung, Radikalionenbildung und Populationsrelaxation. Durch Anwendung der Anrege-Abfrage-, der Anrege-Wiederanrege-Abfrage-, der kohärenten zwei- und dreidimensionalen, der „Triggered-Exchange“-2D- sowie der Quantenkontrollspektroskopie erhalten wir intuitive Abbilder davon, welches Produkt aus welchem Reaktanten entsteht und welche molekularen Reaktionsmodi daran beteiligt sind.

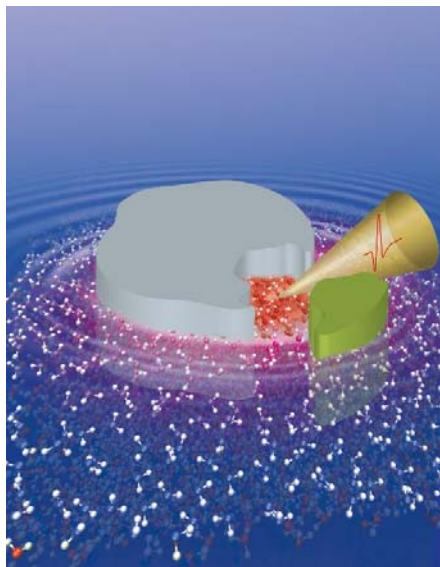
### Martina Havenith

Physical Chemistry II - Laserspectroscopy and Biophotonics  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228249; FAX: ++49-(0)234-3214183

email: [martina.havenith@rub.de](mailto:martina.havenith@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2>

M. Havenith, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** (2016) 1218-1219. Solvation science: a new interdisciplinary field.



*Solvation Science* is at the very heart of chemistry, chemical engineering and biochemistry. With RESOLV, RUB has launched solvation science as a new interdisciplinary field, providing a molecular, bottom-up description of solvation that is able to predict the properties of new solvent systems. Key to this is the synergy of a broad array of synthetic and engineering techniques with spectroscopic and theoretical methods. RESOLV is already pushing back scientific frontiers: When an enzyme interacts with a solvent, for example, a gradient of hydrogen-bond dynamics with increasingly retarded water molecules forms towards the active site, the “hydration funnel” (see figure). This slowing-down of water dynamics plays a crucial role in molecular recognition. Another study showed that only a few solvent molecules are needed to change the electronic structure and reactivity of a molecule completely. Moreover, thin water layers confined between surfaces exhibit surprising properties and research suggests that this nanoconfinement strongly impacts the energetic

barriers of chemical reactions and their mechanisms. Dynamic processes at electrochemically active metal interfaces were visualized with Ångström resolution, underlining the importance of interfacial solvent for electrochemical reactions. Hence, solvents are now increasingly recognized as playing an active role in their own right and solvation science is providing the unifying framework for this novel way of thinking.

Solvation ist ein zentrales Thema in der Chemie, Verfahrenstechnik und Biochemie. Mit RESOLV baut RUB derzeit die Solvatationsforschung als neues interdisziplinäres Feld aus, welches eine Bottom-up-Beschreibung der Solvation auf Molekülebene ermöglicht, mit der die Eigenschaften neuer Lösungsmittelsysteme vorhersagbar werden. Um die Solvatationsforschung erfolgreich zu machen, muss eine Vielzahl modernster Synthese- und Ingenieurtechniken sowie spektroskopischer und theoretischer Methoden zusammengebracht werden. RESOLV konnte zeigen, dass durch die Interaktion von Enzymen mit Wasser, die Wasserdynamik am aktiven Zentrum verlangsamt wird, welche eine wesentliche Rolle bei der molekularen Erkennung spielt. Eine andere Studie zeigte, dass schon einige wenige Moleküle eines Lösungsmittels ausreichen, um die elektronische Struktur und Reaktivität eines Moleküls komplett zu verändern. Zudem haben dünne, zwischen Grenzflächen eingeschlossene Wasserfilme überraschende Eigenschaften, und die aktuelle Forschung suggeriert, dass das Beschränken auf eine Nanometerskala die Energiebarrieren chemischer Reaktionen und deren Mechanismus wesentlich beeinflusst. Dynamische Prozesse an elektrochemisch aktiven Metallgrenzflächen wurden mit Ångström-Auflösung visualisiert und bestätigten auch die Bedeutung des Lösungsmittels. Inzwischen werden Lösungsmittel also nicht mehr nur als passive Zuschauer in chemischen Prozessen gesehen, sondern als aktive Teilnehmer, und die Solvatationsforschung ebnet den Weg dazu.

### Simon Ebbinghaus

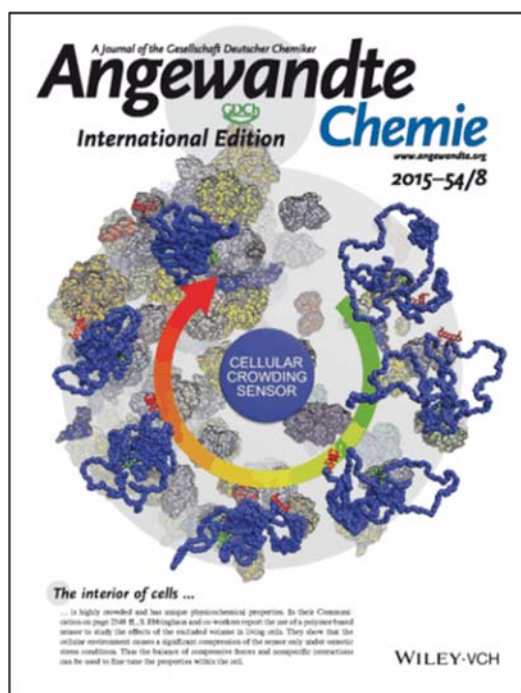
Physical Chemistry II - Biopolymers in Vivo

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226239; FAX: ++49-(0)234-3214183

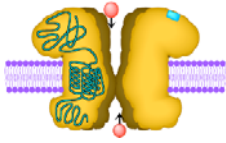
email: [simon.ebbinghaus@rub.de](mailto:simon.ebbinghaus@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2/ebbinghaus/>

D. Gnutt, M. Gao, O. Brylski, M. Heyden, S. Ebbinghaus. *Angew. Chem. Int. Ed.* **54(8)** (2015) 2548-2551.  
Excluded-volume effects in living cells.



Cells are a highly complex and crowded environment. Still, a comprehensive understanding on how the intracellular crowding effect modulates biomolecular function is lacking. Therefore, we developed a novel fluorescent sensor molecule, based on a random coil polymer that is sensitive towards changes of crowding. The sensor was calibrated in artificial crowding solutions in vitro where the lack of space leads to a compression of the polymer and an increase in the FRET (Förster Resonance Energy Transfer) signal. Surprisingly, inside the cell no compression of the polymer was found under basal conditions. This result can be rationalized by counteracting nonspecific interactions with surrounding biomolecules that overcome compressive effects by the high volume occupation (excluded volume). However, under certain conditions, such as high osmotic stress, a rapid increase in the compression is observed inside the living cell indicating the increased excluded volume. Future studies will utilize this novel sensor to correlate spatial and temporal changes of intracellular crowding to the function and stability of biomolecules.

Lebende Zellen sind ein komplexer und dicht gedrängter Ort. Bis jetzt fehlt jedoch ein generelles Verständnis wie intrazelluläre *Crowding*-Effekte die Funktion von Biomolekülen beeinflussen. Deshalb entwickelten wir einen neuartigen Fluoreszenz-Sensor basierend auf einem *Random Coil* Polymer, welcher sensitiv auf *Crowding* Veränderungen reagiert. Dieser Sensor wurde in artifiziellen *Crowding*-Lösungen im Reagenzglas kalibriert. Dabei führt der Platzmangel zu einer Kompression des Polymers und einer Erhöhung des FRET Signals (Förster Resonanz Energie Transfer). Überraschenderweise fanden wir, dass der Sensor in der lebenden Zelle bei basalen Bedingungen nicht komprimiert wird. Diese Beobachtung kann durch nichtspezifische Interaktionen des Sensors mit den umgebenden Biomolekülen erklärt werden, die somit den komprimierenden Volumenausschlusseffekten entgegenwirken. Unter bestimmten extrazellulären Bedingungen, wie z.B. starkem osmotischem Stress, wird jedoch eine schnelle Zunahme der Kompression in der lebenden Zelle beobachtet. Zukünftige Studien werden diesen neuartigen Sensor verwenden, um örtliche und zeitliche Veränderungen des intrazellulären *Crowding*-Effektes mit der Stabilität und Funktion von Biomolekülen zu korrelieren.



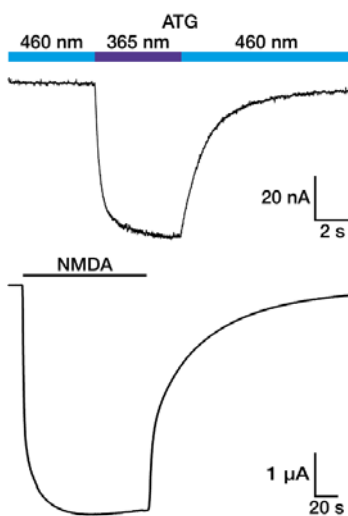
### Michael Hollmann

Biochemistry I – Receptor Biochemistry  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-322-4225; FAX: ++49-(0)234-321-4244 Email:

[michael.hollmann@rub.de](mailto:michael.hollmann@rub.de) Website: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1>

L. Laprell, E. Repak, V. Franckevicius, F. Hartrampf, J. Terhag, M. Hollmann, M. Sumser, N. Rebola, D. DiGregorio, D. Trauner, *Nature Commun.* **6** (2015) 1-11. Optical control of NMDA-receptors with a diffusible photoswitch.



The classical NMDA-type glutamate receptor GluN1-1a/GluN2B, that responds to the application of N-methyl-D-aspartic acid (lower trace), can be activated by ATG (azobenzene-triazole-glutamate) in a wavelength-dependent manner. ATG at 460 nm does not activate the receptor (upper trace), but upon switching to 365 nm the ion pore of the receptor opens and inward current can be recorded. Switching back to 460 nm closes the ion channel again, in the continued presence of the agonist.

Wellenlänge 460 nm lässt sich die Aktivierung wieder abschalten, durch Rücküberführung von ATG in die *trans*-Isoform. Wir konnten zeigen, dass alle 4 Typen des klassischen NMDA-Rezeptors, aber keine AMPA-Rezeptoren, aktiviert werden können, so dass mit ATG nun ein NMDA-Rezeptor-spezifischer, im Millisekundenbereich schaltbarer Agonist zur Verfügung steht.

Classical NMDA receptors arguably are the most important glutamate receptors in the central nervous system where they act as a molecular coincidence detectors that must receive two different inputs, the presence of agonist plus depolarization of the membrane, to open their integral ion channel. In collaboration with chemists in the group of Dirk Trauner at the LMU Munich, who specialize in photopharmacology, we investigated the properties of a photoactivatable, soluble NMDA receptor agonist. This agonist, azobenzene-triazole-glutamate (ATG), in its *trans* isoform is an inactive molecule which can be turned into a specific NMDA receptor agonist upon light-mediated (365 nm) conversion to the *cis* isoform. Light of 460 nm allows to trigger the return to the inactive *trans* isoform and thus switch off the receptor. We could show that all 4 types of classical NMDA receptors but no AMPA receptors can be activated, which makes ATG an NMDA receptor-specific agonist that is switchable on a time scale of milliseconds.

Klassische NMDA-Rezeptoren sind die wohl wichtigsten Glutamat-rezeptoren im zentralen Nervensystem, wo sie als Koinzidenz-Detektoren wirken, die zwei verschiedenen Signale abfragen, die Agonistenanwesenheit und die Depolarisierung der postsynaptischen Membran, um danach den integralen Ionenkanal des Rezeptors zu öffnen. In Zusammenarbeit mit den auf Photopharmakologie spezialisierten Chemikern aus der Arbeitsgruppe von Dirk Trauner an der LMU München haben wir die Eigenschaften eines photoaktivierbaren, löslichen NMDA-Rezeptor-Agonisten untersucht. Der Agonist Azobenzol-triazol-glutamat (ATG) liegt in seiner *trans*-Isoform als inaktives Molekül vor, das mit Licht der Wellenlänge 365 nm in die bindungsaktive *cis*-Isoform überführt werden kann, die NMDA-Rezeptoren spezifisch aktiviert. Durch Licht der

## Raphael Stoll

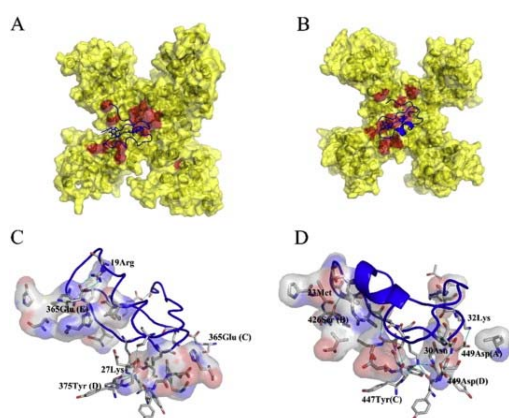
Biochemistry II – Biomolecular Spectroscopy

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225466; FAX: ++49-(0)234-3205466

email: [raphael.stoll@rub.de](mailto:raphael.stoll@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bionmr>

B. Kohl, I. Rothenberg, S.A. Ali, M. Alam, G. Seebohm, H. Kalbacher, W. Voelter, R. Stoll, *Toxicon* **101** (2015) 70-78. Solid phase synthesis, NMR structure determination of  $\alpha$ -KTx3.8, its in silico docking to Kv1.x potassium channels, and electrophysiological analysis provide insights into toxin-channel selectivity.



Animal venoms, such as those from scorpions, are a potent source for new pharmacological substances. In this study we have determined the structure of the  $\alpha$ -KTx3.8 (named as Bs6) scorpion toxin by multidimensional  $^1\text{H}$  homonuclear NMR spectroscopy and investigated its function by molecular dynamics (MD) simulations and electrophysiological measurements. Bs6 is a potent inhibitor of the Kv1.3 channel which plays an important role during the activation and proliferation of memory T-cells (TEM), which play an important role in autoimmune diseases. Therefore, it could be an interesting target for treatment of autoimmune diseases. In this study, Bs6 was synthesised by solid phase synthesis and its three-

dimensional (3D) structure has been determined. To gain a deeper insight into the interaction of Bs6 with different potassium channels like hKv1.1 and hKv1.3, the protein–protein complex was modelled based on known toxin-channel structures and tested for stability in MD simulations using GROMACS. The toxin-channel interaction was further analysed by electrophysiological measurements of different potassium channels like hKv1.3 and hKv7.1. As potassium channel inhibitors could play an important role to overcome autoimmune diseases like multiple sclerosis and type-1 diabetes mellitus, our data contributes to the understanding of the molecular mechanism of action and will ultimately help to develop new potent inhibitors in future.

Gifte tierischen Ursprungs stellen eine reichhaltige Quelle für neuartige pharmakologische Substanzen dar. In dieser Studie haben wir die Struktur des Skorpiongiftes  $\alpha$ -KTx3.8 (kurz: Bs6) mittels mehrdimensionaler  $^1\text{H}$ -NMR-Spektroskopie bestimmt. Desweiteren wurde mittels Molekulardynamiksimulationen und elektrophysiologischer Studien dessen Proteinfunktion eingehend charakterisiert. Bs6 ist ein starker Inhibitor des Kaliumkanals Kv1.3, der eine wichtige Rolle bei der Aktivierung und Proliferation von T-Gedächtniszellen (TEM) spielt und dem somit bei der Entstehung von Autoimmunerkrankungen eine zentrale Rolle zukommt. Letzteres macht diesen Kaliumkanal zu einem interessanten pharmakologischen Ziel für die Behandlung von Autoimmunerkrankungen. Im Rahmen dieser Untersuchungen wurde das Bs6 mittels Peptidfestphasensynthese hergestellt und anschließend dessen dreidimensionale Struktur mittels NMR in wässriger Lösung ermittelt. Um ein tieferes Verständnis der Interaktion des Bs6 mit den humanen Kaliumkanälen hKv1.1 und hKv1.3 zu erlangen, wurden GROMACS-Dockingmodelle des Gift-Kanalkomplex erzeugt und die Wechselwirkung des Bs6 mit den Kaliumkanälen hKv1.3 und hKv7.1 elektrophysiologisch untersucht. Da diese Kaliumkanäle bei der multiplen Sklerose und beim Typ-1 Diabetes Mellitus eine wichtige Rolle spielen, tragen unsere Ergebnisse zu einem besseren Verständnis des molekularen Bs6-Wirkungsmechanismus bei. Davon können zukünftige Entwicklungen wirksamer Inhibitoren dieser Kaliumkanäle profitieren.

### Irmgard Dietzel-Meyer

Biochemistry II – Electrochemistry of neutral Cells

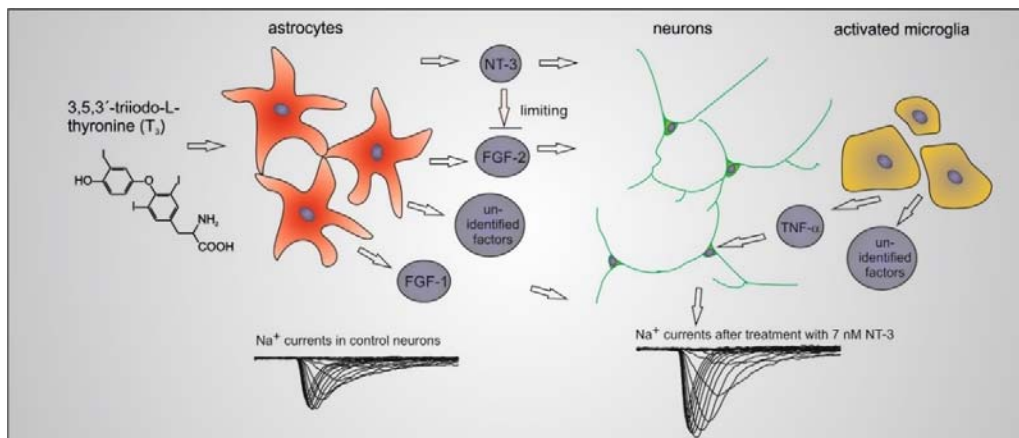
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225803; Fax: ++49-(0)234-3214105

Irmgard.D.Dietzel-Meyer@rub.de; [http://dbs-lin.rub.de/idm/IDM\\_Home.html](http://dbs-lin.rub.de/idm/IDM_Home.html)

B. A. Igelhorst, V. Niederkinkhaus, C. Karus, M. D. Lange, I. D. Dietzel, *Philosophical Transactions of The Royal Society B-Biological Sciences* **370** (2015) 20140194. Regulation of neuronal excitability by release of proteins from glial cells.

The  $\text{Na}^+$  current density across its membrane is the main determinant of neuronal excitability. Here, we show that, during postnatal development in cell cultures obtained from newborn rats, the presence of satellite cells such as astroglia and microglia, influences the regulation of the  $\text{Na}^+$  current density in neurons. Using whole cell patch clamp recording, we observed that various proteins released from astrocytes after stimulation with thyroid hormone ( $\text{T}_3$ ), such as neurotrophin-3 (NT-3) and fibroblast growth factors (FGF) up-regulate the  $\text{Na}^+$  current density in the neuronal membranes. Some of these proteins may in turn inhibit each other's action thus limiting the maximal  $\text{Na}^+$  current up-regulation. Microglial cells, which contribute to immune responses in the brain, release other factors, such as tumor-necrosis factor- $\alpha$  (TNF- $\alpha$ ) which also upregulates the neuronal  $\text{Na}^+$  current density. Thus the excitability of neurons can be regulated at least to a certain extent by proteins released into the extracellular space depending on the activation state of the surrounding non-neuronal cells.



Die Erregbarkeit von Nervenzellen wird von der Dichte der  $\text{Na}^+$  Kanäle in der Membran bestimmt. Wir konnten zeigen, dass die  $\text{Na}^+$ -Stromdichte in der Nervenzellmembran während der postnatalen Entwicklung durch die Aktivierung von Satellitenzellen, wie Astrozyten und Mikroglia, beeinflusst werden kann. Mit Hilfe der Patch-Clamp Technik in der Ganzzellkonfiguration wiesen wir in Zellkulturen aus Ratten nach, dass die nach Stimulation der Astrozyten mit Schilddrüsenhormon ( $\text{T}_3$ ) freigesetzten Proteine, wie z.B. Neurotrophin-3 (NT-3) und der Fibroblastenwachstumsfaktor (FGF-2), die  $\text{Na}^+$  Stromdichte in Nervenzellen hochregulieren. Dabei kann die Wirkung von NT-3 den Effekt von FGF-2 abschwächen, so dass die  $\text{Na}^+$ -Stromregulation limitiert wird. Zusätzlich sezernieren Mikrogliazellen, die zur Immunantwort des Gehirns beitragen, weitere Faktoren, wie den Tumornekrosefaktor- $\alpha$  (TNF- $\alpha$ ), der ebenfalls die  $\text{Na}^+$  -Stromdichte in Nervenzellen hochreguliert. Unsere Ergebnisse zeigen, dass die Erregbarkeit von Nervenzellen in einem gewissen Bereich durch Proteine regulierbar ist, die aus nicht-neuronalen Zellen sezerniert werden.

## Didaktik der Chemie / Didactics of Chemistry

**Katrin Sommer**

Didactics of Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227522; FAX: ++49-(0)234-3214085

email: [katrin.sommer@rub.de](mailto:katrin.sommer@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/elan>

C.G. Strippel & K. Sommer (2015), *International Journal of Science Education* **37** (10), 2965-2986.  
Teaching Nature of Scientific Inquiry in Chemistry: How do German chemistry teachers use labwork to teach NOSI?



Learning about scientific inquiry (SI) is an important aspect of scientific literacy and there is a solid international consensus of what should be learned about it. Learning about SI comprises both the doing of science (process) and knowledge about the nature of scientific inquiry (NOSI). German reform documents promote inquiry generally but do not equally address these two sides of inquiry. This study explores how teachers incorporate learning about SI into laboratory work in the Chemistry classroom. Semi-structured interviews were conducted with 14 secondary school Chemistry teachers (8 of them holding a Ph.D. in Chemistry) from Germany. The results indicate that teaching NOSI is not a primary goal for teachers. Still, some aspects of NOSI seem to be more easily incorporated in the Chemistry classroom, for example, critical testing and hypothesis and prediction. Teachers state 2 main criteria to identify suitable chemical laboratory work for teaching NOSI: adaptable parameters and low level of required content knowledge. Surprisingly, differences can be found between Ph.D. and non-Ph.D. teachers' views on teaching inquiry. The findings of this study can be used to (a) select opportunities for targeted research on teaching NOSI in the Chemistry classroom, (b) inform curriculum material development and (c) give impetus to science teacher education and professional development.

Naturwissenschaftliche Erkenntnisgewinnung ist ein wichtiger Bereich naturwissenschaftlicher Grundbildung und es herrscht international Einigkeit über die hier zu erlangenden Grundlagen. Bildung über naturwissenschaftliche Erkenntnisgewinnung beinhaltet sowohl die Fertigkeit, die zugehörigen Prozesse auszuführen (SI), als auch ein Wissen über die Bedingungen der naturwissenschaftlichen Erkenntnisgewinnung (NOSI). Deutsche Bildungsstandards und Lehrpläne beinhalten grundsätzlich Anforderungen zur Erkenntnisgewinnung, allerdings nicht gleichermaßen zu diesen beiden Bereichen. In der vorliegenden Studie wird untersucht, wie Lehrer die Vermittlung über Erkenntnisgewinnung im experimentellen Unterricht umsetzen. Hierzu wurden semi-strukturierte Interviews mit 14 deutschen ChemielehrerInnen an weiterführenden Schulen (8 davon mit Promotion im Fach Chemie) durchgeführt. Die Ergebnisse weisen darauf hin, dass die Vermittlung von NOSI kein primäres Ziel der LehrerInnen ist. Dennoch scheint es, dass einige Aspekte von NOSI leichter im Experimentalunterricht vermittelt werden können, z.B. kritisches Testen, Hypothese und Vorhersage. Die LehrerInnen nennen zwei Kriterien, die Schulversuche erfüllen müssen, um nützlich für die Vermittlung des Weges der Erkenntnisgewinnung zu sein: veränderbare Parameter und eine geringe Anforderung an Fachwissen. Überraschenderweise zeigen sich Unterschiede zwischen den Ansichten über Erkenntnisgewinnung und deren Vermittlung zwischen LehrerInnen mit und ohne Promotion. Die Ergebnisse der Studie sind in dreierlei Hinsicht anschlussfähig: (a) zur Auswahl geeigneter Forschungsgegenstände für die Untersuchung der NOSI-Vermittlung, (b) zur besseren Aufbereitung von Lehrmaterial, (c) zur Anwendung in Lehreraus- und Weiterbildung.

## Organische Chemie / Organic Chemistry

Stefan M. Huber

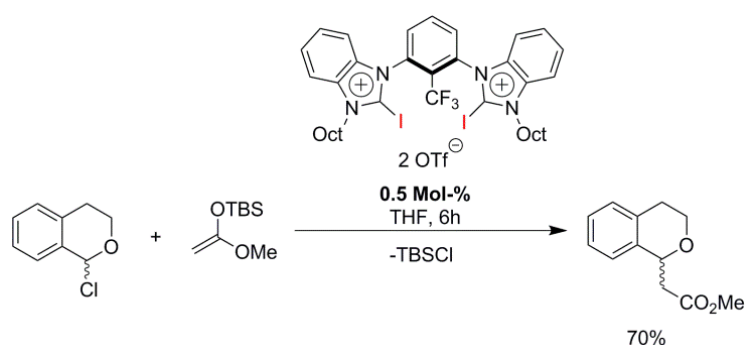
Organic Chemistry I – Organocatalysis and Supramolecular Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3221584

email: [stefan.m.huber@rub.de](mailto:stefan.m.huber@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/huber>

S. H. Jungbauer, S. M. Huber, *J. Am. Chem. Soc.* **137** (2015) 12110-12120. Cationic multidentate halogen bond donors in halide abstraction organocatalysis: catalyst optimization by preorganization.



In contrast to hydrogen bonding, which is firmly established in organocatalysis, there are still very few applications of halogen bonding in this field. Herein, we present the first catalytic application of cationic halogen bond donors in a halide abstraction reaction. In order to prepare bidentate versions which are preorganized for anion binding, a new class of rigid bis(halobenzimidazolium) compounds was synthesized

and structurally characterized. The corresponding *syn*-isomer showed unprecedented catalytic potency and could be used in as low as 0.5 mol-% in the benchmark reaction of 1-chloroisochroman with a silyl enol ether. Calculations confirmed that the *syn*-isomer may bind in a bidentate fashion to chloride. Kinetic investigations confirmed that the *syn*-isomer led to a 20-fold rate acceleration compared to a neutral tridentate halogen bond donor. The strength of the preorganized halogen bond donor seems to approach the limit under the reaction conditions, as decomposition is observed in the presence of chloride in the same solvent at higher temperatures. Calorimetric titrations of the *syn*-isomer with bromide confirmed the strong halogen bond donor strength of the former ( $K \approx 4 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ ,  $\Delta G \approx 38 \text{ kJ/mol}$ ).

Im Gegensatz zu Wasserstoffbrücken, welche in der Organokatalyse schon fest etabliert sind, spielen Halogenbrücken in diesem Bereich bisher kaum eine Rolle. In dieser Veröffentlichung beschreiben wir die erste katalytische Anwendung von kationischen Halogenbrückendonoren in einer Halogenid-Abstraktionsreaktion. Um zweizählige Katalysatoren herzustellen, die für die Anionenbindung präorganisiert sind, synthetisierten wir dazu Bis(halobenzimidazolium)-Verbindungen und charakterisierten sie strukturell. Das entsprechende *syn*-Isomer zeigte bisher beispiellose katalytische Aktivität und konnte mit 0.5 mol-% in der Testreaktion von 1-Chlorisochroman mit einem Silylenolether verwendet werden. Rechnungen bestätigen, dass die Verbindung zweizählig an Chlorid binden kann. Kinetische Untersuchungen zeigten einen 20-fachen Anstieg der Reaktionsgeschwindigkeit im Vergleich zu neutralen dreizähligen Halogenbrückendonoren. Die Elektrophilie dieser präorganisierten Halogenbrückendonoren scheint das unter den Reaktionsbedingungen mögliche Limit zu erreichen, da bei höheren Temperaturen bereits Zersetzung in Gegenwart von Chlorid beobachtet wurde. Kalorimetrische Titrations des *syn*-Isomers mit Bromid bestätigten die hohe Halogenbrücken-Bindungsstärke dieser Verbindung ( $K \approx 4 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1}$ ,  $\Delta G \approx 38 \text{ kJ/mol}$ ).

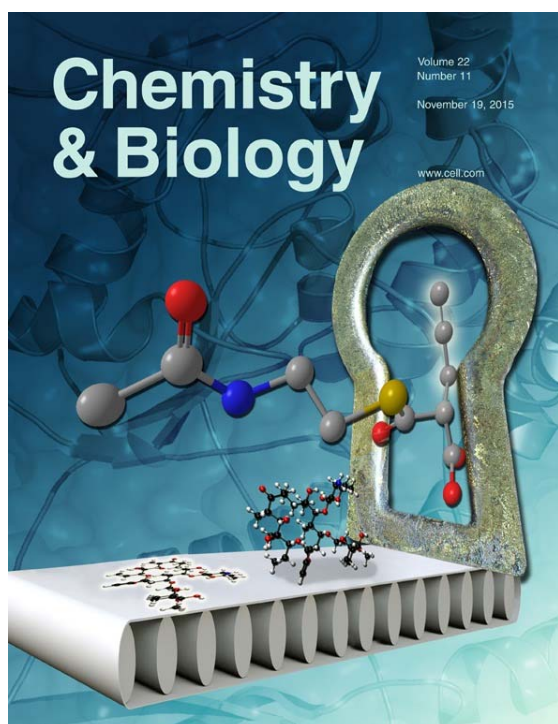
### Frank Schulz

Organic Chemistry I – Chemistry and Biochemistry of Natural Products  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227034

email: [frank.schulz@rub.de](mailto:frank.schulz@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/schulz/>

K. Bravo-Rodriguez, S. Klopries, K. R. M. Koopmans, U. Sundermann, S. Yahiaoui, J. Arens, S. Kushnir, F. Schulz, E. Sanchez-Garcia, *Chem. Biol.* **22** (2015) 1425-1430. Substrate flexibility of a mutated acyltransferase domain and implications for polyketide biosynthesis.



Among natural products, polyketides are one of the most important families when it comes to clinical applications for the treatment of various diseases. Erythromycin is a famous antibiotic for the treatment of infections with Gram-positive pathogens. In recent years, resistances are spreading and call for the development of novel antibiotics. To this end, the derivatization of known compounds is of great interest. Due to the complexity of polyketide natural products, the use of fermentation processes is of great interest. These need to be modified to allow for the generation of new compounds. In the present study, key enzymes in the biosynthesis of erythromycin are mutated to shift their substrate scope. Simple synthetic analogs of biosynthetic building blocks are then employed and incorporated into the natural product and the mechanism of substrate recognition by the enzymes is explored, revealing the foundation of the high specificity in the biosynthetic cascade reactions.

Polyketide sind eine bedeutende Naturstofffamilie und zur Behandlung zahlreicher verschiedener Krankheiten in Gebrauch. Erythromycin ist ein berühmtes Antibiotikum für die Behandlung von Infektionen mit Gram-positiven Pathogenen. Sich zunehmend ausbreitende Resistenzen erfordern seit einigen Jahren die Entwicklung neuer Antibiotika. Zu diesem Zwecke ist die Derivatisierung bekannter Verbindungen von großem Interesse. Aufgrund der hohen Komplexität polyketidischer Naturstoffe ist hierfür die Anwendung fermentativer Prozesse erforderlich. Um neue Verbindungen zu erzeugen, müssen dabei die Biosynthesewege modifiziert werden. In dieser Studie werden Schlüsselenzyme in der Biosynthese von Erythromycin mutiert, um ihre Substratspezifität zu verändern. Einfache Analoga biosynthetischer Bausteine werden den Enzymen zugeführt, um in Naturstoff-Analoga eingebaut zu werden. Dabei wird insbesondere der Mechanismus der Substraterkennung durch die Enzyme untersucht; die Grundlage der hohen Substratspezifität in der Biosynthesekaskade wird offengelegt.

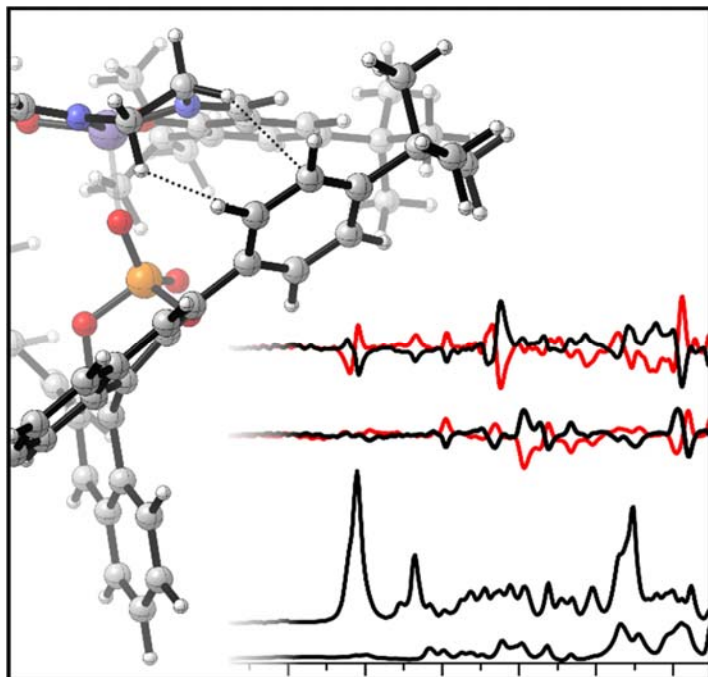
### Christian Merten

Organic Chemistry II – Chirality and Vibrational Optical Activity  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224529; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: christian.merten@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/chirality>

C. Merten, C. H. Pollok, S. Liao, B. List, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 8841-8845. Stereochemical communication within a chiral ion pair based catalyst.



Ionic interactions are increasingly appreciated as a key, asymmetry-inducing factor in enantioselective catalytic transformations, including those involving Brønsted acid or base catalysis, phase-transfer-catalysis, and related processes. However, a detailed understanding of these interactions is often lacking. Herein, we show how an enantiopure anion enforces a chiral conformation onto a catalytically relevant achiral cation. Specifically, we use vibrational circular dichroism (VCD) spectroscopy to monitor the transmission of stereochemical information from a chiral phosphate anion to a flexible manganese(III)-salen cation. We show that VCD can be used to study solvent effects and that the obtained chiroptical data directly and quantitatively correlate with the experimentally observed enantioselectivity in an asymmetric olefin epoxidation reaction.

Ionische Wechselwirkungen werden als Schlüsselschritt in der Induktion von Asymmetrie in enantioselektiver Synthese, insbesondere in der Brønsted Säure- oder Basen-Katalyse, Phasentransferkatalyse und anderen Prozessen immer bedeutender. Es fehlt jedoch oft ein detailliertes Verständnis der entscheidenden Wechselwirkungen. Dieser Beitrag zeigt wie ein chirales Anion ein katalytisch aktives Kation in eine chirale Konformation drängt. Die VCD-Spektroskopie wird erstmals genutzt, um die Übertragung stereochemischer Information von einem chiralen Phosphat auf ein konformativ flexibles Mangan(III)-Salen-Komplekxkation zu charakterisieren. Zudem können mit VCD-Spektroskopie auch Lösungsmittelleffekte auf diese Übertragung beobachtet werden. Die erhaltenen chiroptischen Daten können direkt und quantitativ mit experimentell ermittelten Enantioselektivitäten aus einer asymmetrischen Epoxidierungsreaktion korreliert werden.

## Wolfram Sander

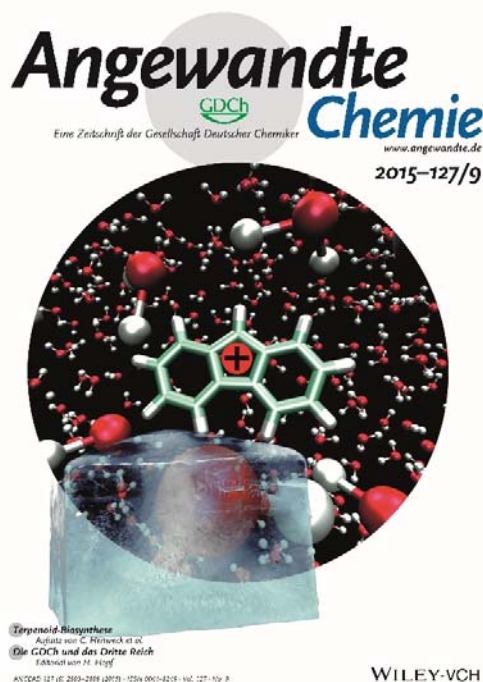
Organic Chemistry II - Physical Organic Chemistry

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel: +49 234 3224593, FAX +49 234 3214353

email: [wolfram.sander@ruhr-universität-bochum.de](mailto:wolfram.sander@ruhr-universität-bochum.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2>

P. Costa, I. Trosien, M. Fernandez-Oliva, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015), 2656-2660. The fluorenyl cation.



The fluorenyl cation is a textbook example for a  $4\pi$  antiaromatic cation. However, contrasting results have been published on how the annelated benzene rings compensate the destabilizing effect of the  $4\pi$  antiaromatic five-membered ring in its core. Whereas previous attempts to synthesize this cation in superacidic media resulted in undefined polymeric material only, we herein report that it can be generated and isolated in amorphous water ice at temperatures below 30 K by photolysis of diazofluorene. Under these conditions, the fluorenylidene is protonated by water to give the fluorenyl cation, which could be characterized spectroscopically. Its absorption in the visible-light range matches that previously obtained by ultrafast absorption spectroscopy, and furthermore, its IR spectrum could be recorded. The IR bands in amorphous ice very nicely match predictions from DFT and DFT/MM calculations, suggesting the absence of strong interactions between the cation and surrounding water molecules.

Das Fluorenyl Kation ist ein Beispiel wie aus dem Lehrbuch für ein  $4\pi$  antiaromatisches Kation. Trotzdem wurden unterschiedliche Ergebnisse darüber publiziert, wie die annelierten Benzolringe den destabilisierenden Effekt des  $4\pi$  antiaromatischen fünfgliedrigen Ringes im Zentrum kompensieren. Während frühere Versuche, dieses Kation in supersaurem Medium zu synthetisieren, nur ein undefiniertes polymeres Material ergaben, berichten wir hier, dass es in amorphem Wassereis bei Temperaturen unter 30 K durch Photolyse von Diazofluoren erzeugt werden kann. Unter diesen Bedingungen wird das Fluorenylidene durch Wasser protoniert und ergibt das Fluorenyl Kation, das spektroskopisch charakterisiert werden konnte. Seine Absorption im sichtbaren Bereich passt zu dem vorher durch ultraschnelle Absorptionsspektroskopie erhaltenen. Ferner konnte sein IR Spektrum aufgenommen werden. Die IR Banden in amorphem Eis passen sehr gut zu Vorhersagen aus DFT und DFT/MM Rechnungen und deuten auf das Fehlen von starken Wechselwirkungen zwischen dem Kation und den umgebenen Wassermolekülen hin.

### Gerald Dyker

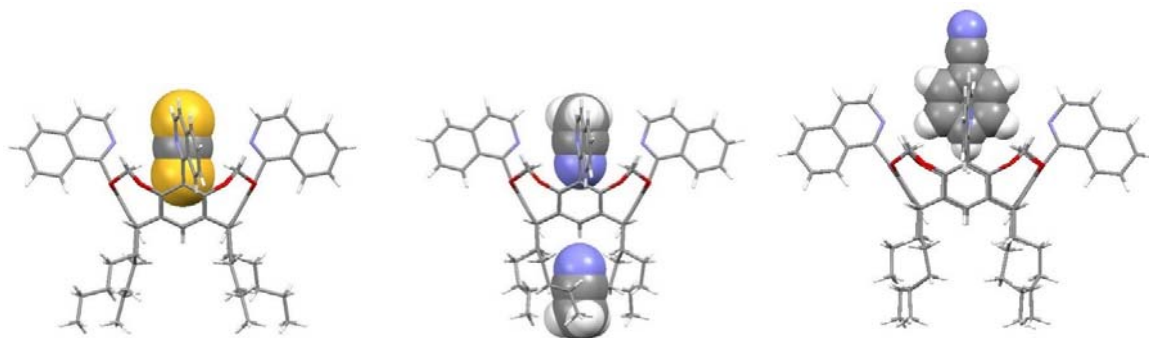
Organic Chemistry II - Organic Synthesis and Catalysis  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224551; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: [Gerald.Dyker@rub.de](mailto:Gerald.Dyker@rub.de); <http://www.orch.ruhr-uni-bochum.de/dyker/>

G. Dyker, C. Dietz, S. Grimme, I. M. Oppel, M. Richter, *Tetrahedron* **71** (2015) 5830-5834. Conformational alignment of isoquinolinyl substituents at the resorcinarene rim.

All four isoquinolin-1-yl substituents at the upper rim of a resorcinarene adopt the same preferred conformation, with the lone electron pairs of the nitrogen atoms pointing towards the molecular bowl. Thus, an electron-rich narrow cavity is formed, suitable for linear molecules as molecular guests, such as CS<sub>2</sub> and acetonitrile, but also flexible enough to incorporate benzonitrile.



Alle vier Isochinolin-Einheiten am oberen Rand eines Resorcinarens nehmen die gleiche bevorzugte Konformation ein, mit dem freien Elektronen-Paar des Stickstoff-Atoms zu der molekularen Schale hinzeigend. Auf diese Weise wird eine eng begrenzte Elektronen-reiche Bindungstasche gebildet, passend für lineare Gastmoleküle wie CS<sub>2</sub> und Acetonitril, aber auch flexibel genug, um Benzonitril aufzunehmen.

### Martin Muhler

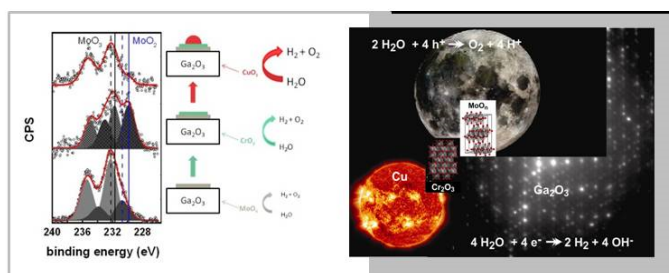
Industrial Chemistry – Heterogeneous Catalysis

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228754; FAX: ++49-(0)234-3214115

email: [muhler@techchem.rub.de](mailto:muhler@techchem.rub.de); <http://www.techchem.rub.de>

G. Wilma Busser, B. Mei, P. Weide, P. C. K. Vesborg, K. Stührenberg, M. Bauer, X. Huang, M. G. Willinger, I. Chorkendorff, R. Schlögl, M. Muhler, *ACS Catal.* **5** (2015), 5530-5539. CoCatalyst designing: a regenerable molybdenum-containing ternary cocatalyst system for efficient photocatalytic water splitting.



Earth-abundant materials are required to facilitate upscaling of renewable H<sub>2</sub> generation. Here, the synthesis of a novel oxidic ternary co-catalyst containing Mo, Cr and Cu, which has been found to be highly active in the overall photocatalytic splitting of water over Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, is described. With the noble metal-free system hydrogen evolution rates comparable to that of well-established Rh<sub>x</sub>Cr<sub>2-x</sub>O<sub>3</sub>/Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> water splitting co-catalyst is

achieved. Although the stability of the as-prepared ternary co-catalyst system appeared to be poor, the co-catalyst can be easily regenerated and stabilized by an oxygen treatment in ambient conditions. Furthermore, higher MoO<sub>x</sub> loadings were found to be more active and showed improved stability. By means of careful characterization using X-ray based spectroscopy and TEM, the function of the individual co-catalyst compounds was closely examined suggesting synergetic interactions of MoO<sub>x</sub> and CrO<sub>y</sub> stabilizing CuO against photoreduction. This work highlights that multi-component systems, which are well-studied in industrial processes for heterogeneous reactions, can be used in solar-water splitting. In particular, molybdena-containing materials are discovered as a new class of earth-abundant co-catalysts for overall water splitting.

Zur Hochskalierung der nachhaltigen H<sub>2</sub>-Produktion ist es notwendig Materialien zu verwenden, die auf der Erde reichlich vorhanden sind. Es wird die Synthese eines neuen oxidischen, ternären Cokatalysators beschrieben, der sehr aktiv in der photokatalytischen Spaltung von Wasser mittels Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ist und aus Mo, Cr und Cu besteht. Die Verwendung dieses edelmetallfreien Katalysators ermöglicht eine katalytische Wasserstoffbildungsgeschwindigkeit, die mit derjenigen des etablierten Rh<sub>x</sub>Cr<sub>2-x</sub>O<sub>3</sub>/Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Wasserspaltungskatalysators vergleichbar ist. Obwohl die Stabilität des frisch präparierten Cokatalysators anfänglich gering erschien, zeigte es sich, dass das System sehr leicht mittels einer Sauerstoffbehandlung bei Raumtemperatur regeneriert werden kann. Zudem wurde gefunden, dass höhere MoO<sub>x</sub>-Beladungen zu höherer Aktivität und Stabilität führen. Durch anspruchsvolle Charakterisierung mittels röntgenstrahlungsbasierter Methoden und Elektronenmikroskopie wurde die Wirkung jeder einzelnen Komponente im Detail untersucht und festgestellt, dass synergetische Wechselwirkungen zwischen MoO<sub>x</sub> und CrO<sub>y</sub> CuO<sub>z</sub> gegen Photoreduktion stabilisieren. Unsere Arbeit zeigt, dass Mehrkomponentensysteme, welche im Bereich der industriellen heterogenen Katalyse weit verbreitet sind und daher bereits ausführlich untersucht wurden, für die solare Wasserspaltung geeignet sind. Insbesondere wurden molybdänhaltige Materialien als eine neue Cokatalysatorklasse für die photokatalytische Wasserspaltung identifiziert.

## Theoretische Chemie / Theoretical Chemistry

**Jörg Behler**

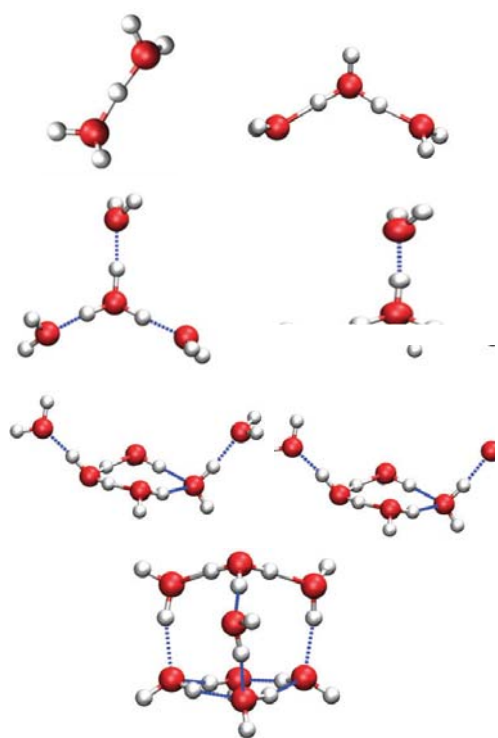
Theoretical Chemistry – Neural Network Methods for Katalysis and Materials Science

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226749; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: joerg.behler@theochem.rub.de; <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de>

S. Kondati Natarajan, T. Morawietz, J. Behler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8356-8371. Representing the potential-energy surface of protonated water clusters by high-dimensional neural network potentials.



Investigating the solvation and transport properties of protons in water is essential for understanding chemical processes in aqueous solution. While important insights can be gained by employing accurate electronic structure methods, the computational costs of these calculations are often very high. In particular protonated water clusters have become important model systems to benchmark the reliability of more efficient atomistic potentials, as the presence of the excess proton induces substantial changes in the hydrogen bond pattern. Further, many energetically close isomers exist, which are difficult to describe. Based on density-functional theory (DFT) calculations, we have constructed a reactive full-dimensional neural network (NN) potential for protonated water clusters up to the octamer. A detailed investigation of this potential shows that the energetic, structural, and vibrational properties are in excellent agreement with DFT results making the NN approach a very promising candidate for developing a high-quality reactive potential for liquid water.

Die Untersuchung der Solvations- und Transporteigenschaften von Protonen in Wasser ist eine wichtige Voraussetzung für das Verständnis vieler chemischer Prozesse in wässrigen Lösungen.

Während eine Vielzahl von Informationen durch den Einsatz genauer Elektronenstrukturverfahren gewonnen werden kann, sind die Rechenzeiterfordernisse dieser Methoden oft sehr hoch. Insbesondere protonierte Wassercluster haben sich in den letzten Jahren zu wichtigen Referenzsystemen entwickelt, um die Zuverlässigkeit effizienterer atomistischer Potentiale zu überprüfen, da das zusätzliche Proton zu starken Änderungen der Wasserstoffbrückenbindungen führt. Weiterhin besitzen diese Cluster zahlreiche energetisch ähnliche Isomere, die schwierig zu beschreiben sind. Basierend auf Dichtefunktionaltheorie (DFT) Rechnungen haben wir mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen (NN) ein reaktives voll-dimensionales Potential für protonierte Wassercluster bis hin zum Oktamer entwickelt. Die Untersuchung dieses Potentials zeigt, dass die energetischen und strukturellen Eigenschaften sowie die Schwingungsfrequenzen eine hervorragende Übereinstimmung mit den zugrunde liegenden DFT Daten aufweisen. NN Potentiale sind daher vielversprechende Kandidaten für die Entwicklung hochgenauer reaktiver Potentiale für flüssiges Wasser.

### Dr. Michael Roemelt

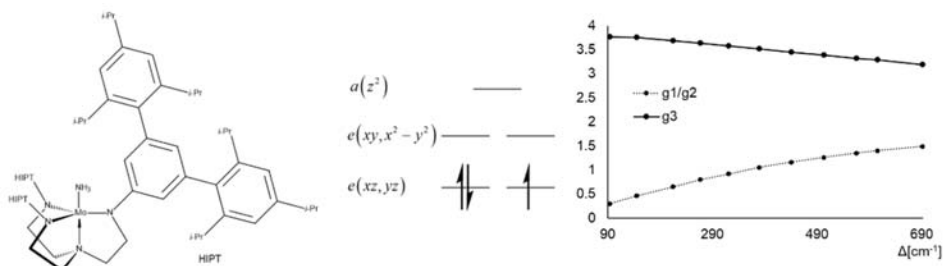
Theoretical Chemistry - Density Matrix Renormalization Group for Complex Molecular Systems  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226749; Fax: ++49-(0)234-3214045

email: [michael.roemelt@theochem.rub.de](mailto:michael.roemelt@theochem.rub.de); <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de>

M. Roemelt, *J. Chem. Phys.* **143** (2015) 044112. Spin orbit coupling for molecular *ab initio* density matrix renormalization group calculations: Application to g-tensors.

Describing magnetic properties of complex molecular systems with many strongly correlated electrons is a great challenge for any quantum chemical method. This work introduces a robust approach to treat spin-orbit coupling on top of the so-called density matrix renormalization group (DMRG), a modern electronic structure method that is suited to describe complex molecular systems. The chosen approach can be regarded as a molecular equivalent to atomic Russell-Saunders or LS coupling. It allows for the reliable evaluation of magnetic properties such as the molecular g-tensors even in the case of near-degeneracy. Test calculations on a chemically relevant molybdenum trisamidoamine complex,  $[\text{Mo}]\text{NH}_3$  ( $[\text{Mo}] = [\text{Mo}^{\text{III}}(3,5-(2,4,6-i\text{-Pr}_3\text{-C}_6\text{H}_2)_2\text{C}_6\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}]$ ), demonstrate the capabilities of the presented approach. Owing to its trifold symmetry  $[\text{Mo}]\text{NH}_3$  has an orbitally degenerate ground state with unquenched angular momentum. Hence, it undergoes a 'Pseudo-Jahn-Teller' distortion which greatly affects its molecular g-values. With the presented method the experimental spectrum could be accurately reproduced indicating that the subtle equilibrium between vibronic and spin-orbit coupling is correctly described.



Die Beschreibung magnetischer Eigenschaften komplexer molekularer Systeme mit vielen stark korrelierten Elektronen ist eine große Herausforderung für alle quantenchemischen Verfahren. In dieser Arbeit wird ein Ansatz für die Behandlung der Spin-Bahn Kopplung in Verbindung mit der Dichterenormalisierungsgruppe (DMRG) beschrieben. Die DMRG ist eine in speziellem Maße geeignete Elektronenstrukturmethode für die Beschreibung komplexer molekularer Systeme. Der gewählte Ansatz für die Spin-Bahn Kopplung kann als molekulares Äquivalent zur atomaren Russell-Saunders oder LS-Kopplung betrachtet werden und erlaubt eine zuverlässige Berechnung magnetischer Eigenschaften wie dem molekularen g-Tensor sogar in komplizierten, fast-entarteten Fällen. Numerische Tests an einem chemisch relevanten Molybdän Trisamidoamin-Komplex,  $[\text{Mo}]\text{NH}_3$  ( $[\text{Mo}] = [\text{Mo}^{\text{III}}(3,5-(2,4,6-i\text{-Pr}_3\text{-C}_6\text{H}_2)_2\text{C}_6\text{H}_3\text{NCH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}]$ ), demonstrieren die Leistungsfähigkeit des präsentierten Verfahrens. Aufgrund seiner dreizähligen Symmetrie besitzt  $[\text{Mo}]\text{NH}_3$  einen orbitalentarteten Grundzustand und ein nichtverschwindendes Bahndrehmoment. Daraus resultierend unterliegt es einem 'Pseudo-Jahn-Teller' Effekt welcher bemerkenswerte Auswirkungen auf die molekularen g-Werte hat. Mit dem beschriebenen Verfahren lassen sich die experimentell beobachteten Ergebnisse genau reproduzieren, was Anlass zu der Annahme gibt, dass das subtile Gleichgewicht aus Spin-Bahn und vibronischer Kopplung korrekt beschrieben wird.

### Christof Hättig

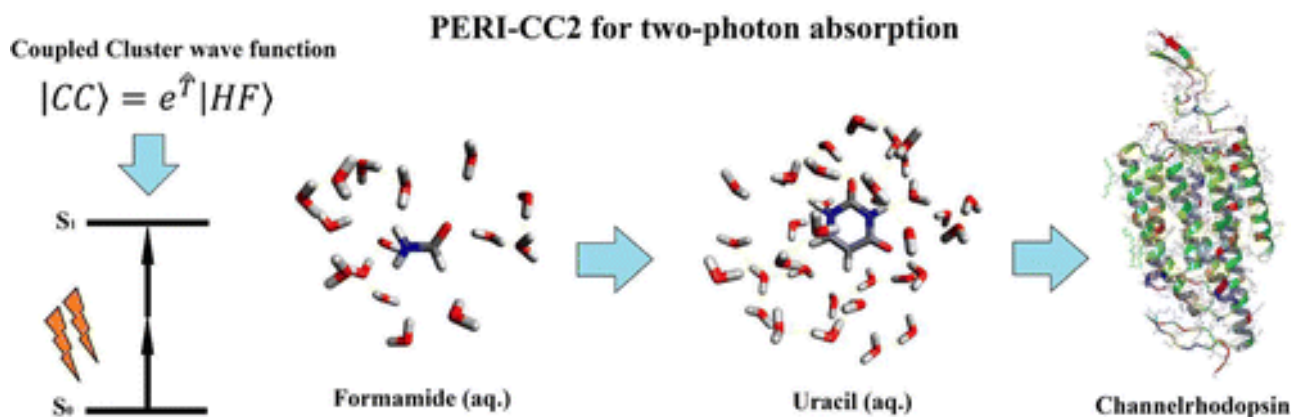
Theoretical Chemistry – Development of Response Methods, Photochemistry and Optical Properties  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228082; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: [christof.haettig@rub.de](mailto:christof.haettig@rub.de); <http://www.theochem.rub.de/research/haettig>

D. Hrsak, A. M. Khah, O. Christiansen, C. Hättig, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (2015) 3669-3678.  
Polarizable embedded RI-CC2 method for two-photon absorption calculations.

We present a novel polarizable embedded resolution-of-identity coupled cluster singles and approximate doubles (PERI-CC2) method for calculation of two-photon absorption (TPA) spectra of large molecular systems. The method was benchmarked for three types of systems: a water-solvated molecule of formamide, a uracil molecule in aqueous solution, and a set of mutants of the channelrhodopsin (ChR) protein. The first test case shows that the PERI-CC2 method is in excellent agreement with the PE-CC2 method and in good agreement with the PE-CCSD method. The uracil test case indicates that the effects of hydrogen bonding on the TPA of a chromophore with the nearest environment is well-described with the PERI-CC2 method. Finally, the ChR calculation shows that the PERI-CC2 method is well-suited and efficient for calculations on proteins with medium-sized chromophores.



Wir präsentieren eine neuartige approximierte Coupled-Cluster Singles-and-Doubles-Methode mit polarisierbarer Einbettung und Auflösung der Identität (PERI-CC2) für die Berechnung von Zweiphotonen-Absorptions (TPA) Spektren großer molekularer Systeme. Die Methode wurde für drei Typen von Systemen getestet: ein in Wasser gelöstes Formamide-Molekül, ein Uracil-Molekül in wässriger Lösung und ein Satz von Mutationen des Channelrhodopsin (ChR) Proteins. Der erste Testfall zeigt, dass die PERI-CC2-Methode in exzellenter Übereinstimmung mit der PE-CCSD-Methode ist. Der Uracil-Testfall bezeugt, dass die Effekte der Wasserstoffbrückenbindung auf die TPA eines Chromophores und seine nächste Umgebung mit der PERI-CC2-Methode gut beschrieben wird. Die Rechnungen an ChR zeigen das die PERI-CC2-Methode gut geeignet und effizient ist für Berechnungen an Proteinen mit mittelgroßen Chromophoren.

### Dominik Marx

Theoretical Chemistry – Dynamic ab initio Calculations

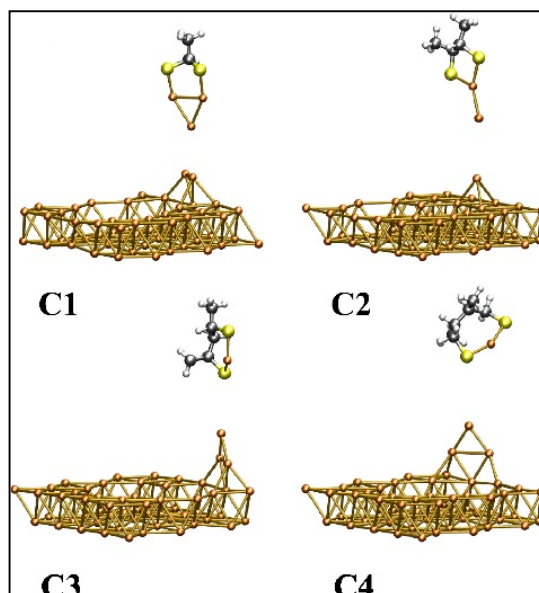
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228083; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Dominik.Marx@theochem.rub.de; <http://www.theochem.rub.de>

M. E. Zoloff Michoff, J. Ribas-Arino, D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 075501-1-5. Nanomechanics of bidentate thiolate ligands on gold surfaces.

The effect of the chain length separating sulfur atoms in bidentate thiols attached to defective gold surfaces on the rupture of the respective molecule/gold junctions has been studied computationally. Thermal desorption always yields cyclic disulfides. In contrast, mechano-chemical desorption leads to cyclic gold complexes, where metal atoms are extracted from the surface and kept in tweezer-like arrangements by the sulfur atoms. This phenomenon is rationalized in terms of directional mechanical manipulation of Au-Au bonds and Au-S coordination numbers. Moreover, the flexibility of the chain is shown to crucially impact on the mechanical strength of the junction.



Effekte aufgrund unterschiedlicher Kettenlängen zwischen den beiden Schwefelatomen bidentater Thiole, welche auf einer Goldoberfläche chemisorbiert sind, wurden im Hinblick auf das Reißen der entsprechenden Molekül/Gold Bindungen theoretisch untersucht. Die übliche thermische Desorption liefert immer zyklische Disulfide als Produkte der Reaktion. Demgegenüber führt die mechanochemische Desorption zu zyklischen Goldkomplexen, bei denen Metallatome aus der Oberfläche gerissen und in einer pinzettenartigen Anordnung durch die beiden Schwefelatome gehalten werden. Dieses Phänomen wird zurückgeführt auf die gerichtete mechanische Manipulation von Au-Au sowie Au-S Koordinationszahlen. Darüber hinaus wird gezeigt, dass die Flexibilität der Kette einen gewichtigen Einfluss auf die mechanische Bruchstärke dieser Molekül/Gold Kontakte hat.

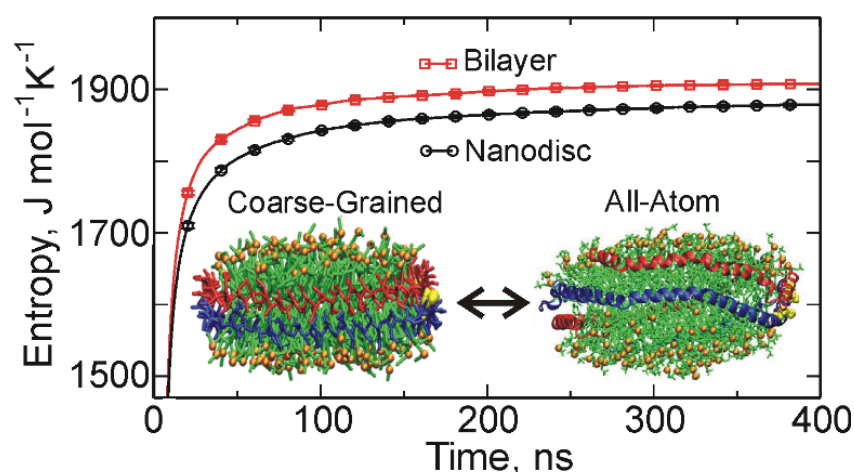
## Lars Schäfer

Theoretical Chemistry – Molecular Simulation  
Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3221582; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: [lars.schaefer@rub.de](mailto:lars.schaefer@rub.de); <http://www.molecular-simulation.org>

A. Debnath, L. Schäfer, *J. Phys. Chem. B* **119** (2015) 6991-7002. Structure and dynamics of phospholipid nanodiscs from all-atom and coarse-grained simulations.



Nanodiscs are small discoidal particles that are increasingly used as promising tools for biophysical and biochemical studies of membrane proteins, since they provide a number of advantages over conventional lipid bilayer or detergent surroundings. The properties of lipid nanodiscs are not understood at the atomic level, however, thus hampering their targeted development and extension of application range. In particular, the structure and dynamics of the lipid molecules that

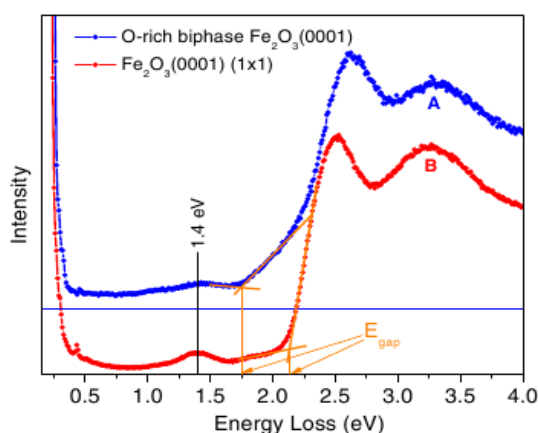
constitute the nanodisc remained elusive. These open questions are highly interesting, because the lipids directly solvate the hydrophobic parts of membrane proteins embedded in nanodiscs and can hence have an influence on the protein. In nanodiscs, the lipid molecules (green in Fig.) are enwrapped by typically two scaffold proteins (red and blue) in a double-belt manner, and the resulting confinement can be expected to affect the lipids.

We investigated structural and dynamical properties of lipid nanodiscs using combined all-atom and coarse-grained molecular dynamics (MD) computer simulations. The computational efficiency of the adopted coarse-grained approach enabled the spontaneous self-assembly of lipids and scaffold proteins into stable nanodisc structures on slow time scales, up to tens of microseconds. Subsequent all-atom simulations revealed that the lipids in the nanodisc have higher acyl tail order and lower configurational entropy than the lipids in a conventional bilayer. Interestingly, these altered *average* properties arise from rather differential behavior of lipids, depending on their location in the nanodisc. Since the scaffold proteins exert constrictive forces from the outer rim of the nanodisc toward its center, lipids at the center of the disc are highly ordered, whereas annular lipids that are in contact with the scaffold proteins are remarkably disordered due to perturbed packing. The lipids thus form a heterogeneous solvation environment for an embedded membrane protein. Our work highlights the applicability of multiscale simulation approaches for nanodisc systems and opens the way for future applications, including simulation studies of nanodisc-embedded membrane proteins and the influence of the lipid surrounding on their structure and dynamics.

### Volker Staemmler

Theoretische Chemie – Quantum Chemistry  
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum  
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045  
email: [staemm@theochem.ruhr-uni-bochum.de](mailto:staemm@theochem.ruhr-uni-bochum.de)  
<http://www.ruhr-uni-bochum.de>

H. Qiu, V. Staemmler, H. Kühlenbeck, E. Bauer, H.-J. Freund, *Surf. Sci.* **641** (2015) 30-36. Weak thermal reduction of biphasic  $\text{Fe}_2\text{O}_3(0001)$  films grown on  $\text{Pt}(111)$ : Sub-surface  $\text{Fe}^{2+}$  formation.



Iron oxides ( $\text{FeO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) play an important role in many technical processes, for instance in heterogeneous catalysis. For understanding the underlying mechanisms one has to know the geometrical and electronic properties of the surfaces of small iron oxide particles. In the present work we prepared thin  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  layers on Pt and studied them with various experimental methods, in particular with electron energy-loss spectroscopy (EELS). The EEL spectra show three features: First, the band gap at 2.1 eV, i.e., the excitation of electrons from the valence band into the conduction band. Then two features at 1.4 and 3.3 eV which were uniquely identified by means of quantumchemical ab initio

cluster calculations as local excitations within the 3d shell of the iron atoms. The peak at 3.3 eV is due to  $\text{Fe}^{3+}$  ions, the one at 1.4 eV to  $\text{Fe}^{2+}$  ions. In bulk  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  only  $\text{Fe}^{3+}$  cations exist, but at the  $\text{Fe}_2\text{O}_3(0001)$  surface also  $\text{Fe}^{2+}$  cations, since not all Fe atoms are fully surrounded by  $\text{O}^{2-}$  anions. Upon further oxygen pressure the  $\text{Fe}^{2+}$  ions are oxidized to  $\text{Fe}^{3+}$ , and the  $\text{Fe}^{2+}$  peak loses intensity.

Eisenoxide ( $\text{FeO}$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) spielen eine große Rolle in vielen technischen Prozessen, wie zum Beispiel in der heterogenen Katalyse. Um ihre Wirkungsweise zu verstehen, muss man die geometrischen und elektronischen Eigenschaften der Oberflächen kleiner Eisenoxidpartikel kennen. In der hier vorliegenden Arbeit wurden dünne  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  Schichten auf Pt präpariert und mit unterschiedlichen experimentellen Methoden untersucht, vor allem mit Elektronen- Energieverlust Spektroskopie (EELS). Die gemessenen EEL Spektren zeigen drei Strukturen: zunächst die Bandlücke bei 2.1 eV, also die Anregung von Elektronen aus dem Valenzband des  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  in das Leitungsband. Desweiteren zwei Strukturen bei 1.4 und 3.3 eV, die mit Hilfe von quantenchemischen ab initio Cluster-Rechnungen eindeutig als lokale Anregungen in der 3d-Schale der Eisenatome identifiziert werden konnten. Der Peak bei 3.3 eV wird  $\text{Fe}^{3+}$  Kationen zugeordnet, der bei 1.4 eV –  $\text{Fe}^{2+}$  Kationen. Im  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  Volumen liegen nur  $\text{Fe}^{3+}$  Kationen vor, an der  $\text{Fe}_2\text{O}_3(0001)$  Oberfläche auch  $\text{Fe}^{2+}$  Kationen, da nicht alle Fe-Atome ganz von  $\text{O}^{2-}$  Anionen umgeben sind. Unter Sauerstoffüberschuss werden die  $\text{Fe}^{2+}$  Ionen aber weiter oxidiert, und der  $\text{Fe}^{2+}$  Peak verliert an Intensität.

### Robert Franke

Theoretical Chemistry – Evonik Performance Materials GmbH

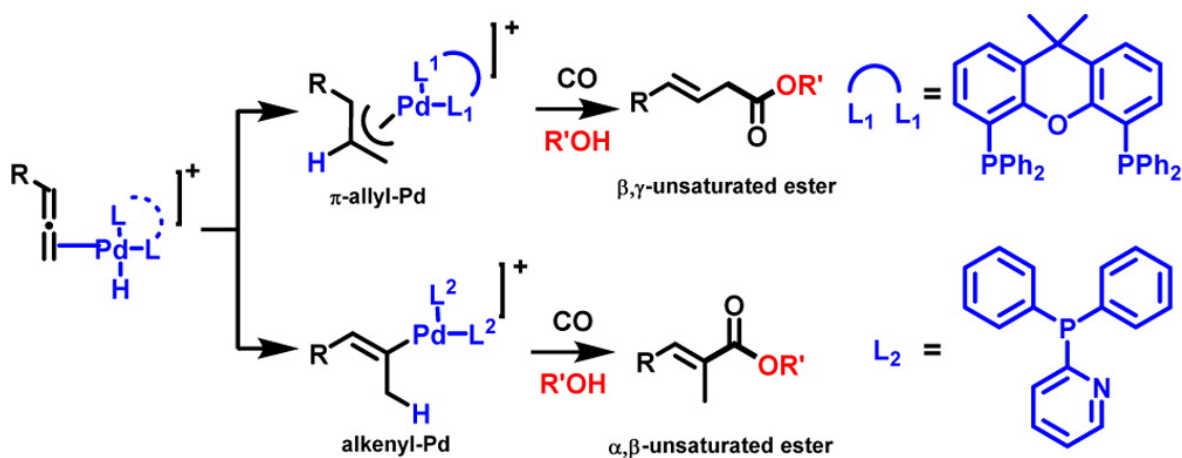
Paul-Baumann-Straße 1, D-45772 Marl

Tel.: ++49-(0)2365-492899; FAX: ++49-(0)2365-49802899

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

email: [robert.franke@rub.de](mailto:robert.franke@rub.de); <http://www.ruhr-uni-bochum.de>

J. Liu, Q. Liu, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *J. Am. Chem. Soc.*, **137** (2015) 8556-8563. Ligand-controlled palladium-catalyzed alkoxy carbonylation of allenes: regioselective synthesis of  $\alpha,\beta$ - and  $\beta,\gamma$ -unsaturated esters.



The palladium-catalyzed regioselective alkoxy carbonylation of allenes with aliphatic alcohols allows to produce synthetically useful  $\alpha,\beta$ - and  $\beta,\gamma$ -unsaturated esters in good yields. Using Xantphos as the ligand,  $\beta,\gamma$ -unsaturated esters are produced selectively in good yields. In contrast, the corresponding  $\alpha,\beta$ -unsaturated esters are obtained with high regioselectivity in the presence of  $PPh_2Py$  as the ligand. Preliminary mechanistic studies revealed that these two catalytic processes proceed by different reaction pathways. This novel protocol was successfully applied to convert an industrially available bulk chemical, 1,2-butadiene, into dimethyl adipate, which is a valuable feedstock for polymer and plasticizer syntheses, with high yield and TON (turnover number).

Die mit Palladium katalysierte regioselektive Alkoxy carbonylierung von Allenen mit aliphatischen Alkoholen ermöglicht einen Zugang zu den synthetisch interessanten  $\alpha,\beta$ - und  $\beta,\gamma$ -ungesättigten Estern in guten Ausbeuten. Mit dem Xantphos-Liganden erhält man in guten Ausbeuten selektiv die  $\beta,\gamma$ -ungesättigten Ester. Verwendet man hingegen den  $PPh_2Py$ -Liganden so erhält man die entsprechenden  $\alpha,\beta$ -ungesättigten Verbindungen. Erste mechanistische Untersuchungen legen nahe, dass es sich jeweils um unterschiedliche Reaktionspfade handelt. Diese neue Synthesevorschrift wurde erfolgreich mit dem als Massenchemikalie zur Verfügung stehenden 1,2-Butadien als Edukt ausgeführt. Das so in hoher Ausbeute bei hoher katalytischer Aktivität gewonnene Dimethyladipat ist ein interessanter Rohstoff zur Produktion von Polymeren und Weichmachern.

## List of Publications

### Analytische Chemie /Analytical Chemistry

- D. Jambrec, M. Gebala, F. La Mantia, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 15064-15068. Potential-assisted DNA immobilization as a prerequisite for fast and controlled formation of DNA monolayers. *Angew. Chem.* **127** (2015) 15278-15283. Potentialgestützte DNA-Immobilisierung als Voraussetzung für eine schnelle und kontrollierte Bildung von DNA-Monoschichten
- H. Stein, D. Naujoks, D. Grochla, C. Khare, R. Gutkowski, S. Grützke, A. von Keudell, W. Schuhmann, A. Ludwig, *Physica Status Solidi A* **212** (2015) 2798-2804. A structure zone diagram obtained by simultaneous deposition on a novel step heater: a case study for Cu<sub>2</sub>O thin films
- L. Stratmann, J. Clausmeyer, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **16** (2015) 3477-3482. Destruction-free localized reduction of nitro groups on glassy carbon electrodes by means of scanning electrochemical microscopy
- F. Zhao, F. Conzuelo, V. Hartmann, H. Li, M. M. Nowaczyk, N. Plumeré, M. Rögner, W. Schuhmann, *J. Phys. Chem. B* **119** (2015) 13726-13731. Light induced H<sub>2</sub> evolution from a biophotocathode based on photosystem 1 – Pt nanoparticles complexes integrated in solvated redox polymers films
- V. Kuznetsov, A.-H. Zinn, G. Zampardi, S. Borhani-Haghighi, F. La Mantia, A. Ludwig, W. Schuhmann, E. Ventosa, *ACS Appl. Mater. Int.* **7** (2015) 23554-23563. Wet nanoindentation of the solid electrolyte interphase on silicon electrodes
- K. Xie, J. Masa, E. Madej, F. Yang, P. Weide, W. Dong, M. Muhler, W. Schuhmann, W. Xia, *ChemCatChem* **7** (2015) 3027–3035. Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-MnO<sub>2</sub>-CNT hybrids synthesized by HNO<sub>3</sub> vapor oxidation of catalytically grown CNTs as OER electrocatalyst
- G. Zampardi, S. Klink, V. Kuznetsov, T. Erichsen, A. Maljusch, F. La Mantia, W. Schuhmann, E. Ventosa, *ChemElectroChem* **2** (2015) 1607–1611. Combined AFM/SECM investigation of the solid electrolyte interphase in Li-ion batteries
- E. Ventosa, W. Schuhmann, *PhysChemChemPhys* **17** (2015) 28441-28450. Scanning electrochemical microscopy in Li-ion batteries
- P. Pinyou, F. Conzuelo, K. Sliozberg, J. Vivekananthan, A. Contin, S. Pöller, N. Plumeré, W. Schuhmann, *Bioelectrochem.* **106** (2015) 22-27. Coupling of an enzymatic biofuel cell to an electrochemical cell for self-powered glucose sensing with optical readout
- A. Alsheikh Oughli, F. Conzuelo, M. Winkler, T. Happe, W. Lubitz, W. Schuhmann, O. Rüdiger, N. Plumeré, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 12329–12333. Protection from oxidative damage of the O<sub>2</sub> sensitive [FeFe]-hydrogenase from *Chlamydomonas reinhardtii* using a redox hydrogel. *Angew. Chem.* **127** (2015) 12506–12510. Ein Redoxhydrogel schützt die O<sub>2</sub>-empfindliche [FeFe]-Hydrogenase aus *Chlamydomonas reinhardtii* vor oxidativer Zerstörung
- M. Raicopol, B. Bălănuță, K. Sliozberg, B. Schlüter, S. A. Gârea, N. Chira, W. Schuhmann, C. Andronesco, *Corros. Sci.* **100** (2015) 386-395. Vegetable oil-based polybenzoxazine derivatives coatings on Zn-Mg-Al alloy coated steel
- J. Tymoczko, F. Calle-Vallejo, V. Čolić, W. Schuhmann, A. S. Bandarenka, *Electrochim. Acta* **179** (2015) 469-474. Evaluation of the electrochemical stability of model Cu-Pt(111) near-surface alloy catalysts
- A. J. R. Botz, M. Nebel, R. A. Rincón, E. Ventosa, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta*, **179** (2015) 38-44. Onset potential determination at gas-evolving catalysts by means of constant-distance mode positioning of nanoelectrodes
- E. Ventosa, G. Zampardi, C. Flox, F. La Mantia, W. Schuhmann, J. R. Morante. *Chem. Comm.* **51** (2015) 14973-14976. Solid electrolyte interphase in semi-solid flow batteries: a wolf in sheep's clothing

- J. Vivekananthan, J. Masa, P. Chen, K. Xie, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **182** (2015) 312-319. N-doped carbon cloth as a stable self-supported cathode catalyst for air/H<sub>2</sub>-breathing alkaline fuel cells
- L. Švorc, D. Jambrec, M. Vojs, S. Barwe, J. Clausmeyer, P. Michniak, M. Marton, W. Schuhmann, *ACS Appl. Mater. Int.* **7** (2015) 18949-18956. The doping level of boron-doped diamond electrodes controls the grafting density of functional groups for DNA assays
- S. Barwe, C. Andronescu, S. Pöller, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **27** (2015) 2158-2163. Co-deposited poly(benzoxazine) and Os-complex modified polymethacrylate layers as immobilization matrix for glucose biosensors
- J. Masa, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 10102-10120. On the role of metals in nitrogen-doped carbon electrocatalysts for oxygen reduction. *Angew. Chem.* **127** (2015) 10240-10259. Über die Rolle von Metallen in Elektrokatalysatoren auf Basis von stickstoffdotiertem Kohlenstoff für die Sauerstoffreduktion
- S. Pilehvar, D. Jambrec, M. Gebala, W. Schuhmann, K. De Wael, *Electroanalysis* **27** (2015) 1836–1841. Intercalation of proflavine in ssDNA aptamers: Effect on binding of the specific target chloramphenicol
- E. Matysiak, A. Botz, J. Clausmeyer, B. Wagner, W. Schuhmann, Z. Stojek, A. Nowicka, *Langmuir* **31** (2015) 8176-8183. Assembling paramagnetic ceruloplasmin at electrode surfaces covered with ferromagnetic nanoparticles. Scanning electrochemical microscopy in presence of magnetic field
- E. Madej, S. Klink, W. Schuhmann, E. Ventosa, F. La Mantia, *J. Power Sources* **297** (2015) 140-148. Effect of the specific surface area on thermodynamic and kinetic properties of nanoparticle anatase TiO<sub>2</sub> in lithium-ion batteries
- J. Clausmeyer, D. Schäfer, M. Nebel, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **2** (2015) 946-948. Temperature-induced modulation of the sample position in scanning electrochemical microscopy
- Z. Sun, J. Masa, P. Weide, S. M. Fairclough, A. W. Robertson, P. Ebbinghaus, J. H. Warner, S. C. E. Tsang, M. Muhler, W. Schuhmann, *J. Mater. Chem. A* **3** (2015) 15444-15450. High-quality functionalized few-layer graphene: Facile fabrication and doping with nitrogen as a metal-free catalyst for the oxygen reduction reaction
- S. Alsaoub, S. Barwe, C. Andronescu, S. Pöller, A. Ruff, W. Schuhmann, *ChemPlusChem* **80** (2015) 1178-1185. Poly(benzoxazine)s modified with osmium complexes as a class of redox polymers for wiring of enzymes to electrode surfaces
- B. Bălănuță, M. Raicopol, A. Maljusch, S. Garea, A. Hanganu, W. Schuhmann, C. Andronescu, *ChemPlusChem* **80** (2015) 1170-1177. Phenolated oleic acid based polybenzoxazine derivatives as corrosion protection layers
- G. Zampardi, F. La Mantia, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **58** (2015) 1-5. In-operando evaluation of the effect of vinylene carbonate on the insulating character of the solid electrolyte interphase
- A. Zimdars, M. Gebala, G. Hartwich, S. Neugebauer, W. Schuhmann, *Talanta* **143** (2015) 19-26. Electrochemical detection of synthetic DNA and native 16S rRNA fragments on a microarray using a biotinylated intercalator as coupling site for an enzyme label
- V. Fourmond, S. Stapf, H. Li, D. Buesen, J. Birrell, R. Olaf, W. Lubitz, W. Schuhmann, N. Plumeré, C. Léger, *J. Am. Chem. Soc.* **137** (2015) 5494-5505. The mechanism of protection of catalysts supported in redox hydrogel films
- E. Ventosa, D. Buchholz, S. Klink, C. Flox, L. Gomes Chagas, C. Vaalma, W. Schuhmann, S. Passerini, J. R. Morante, *Chem. Comm.* **51** (2015) 7298-7301. Non-aqueous semi-solid flow battery based on Na-ion chemistry. P2-type Na<sub>x</sub>Ni<sub>0.22</sub>Co<sub>0.11</sub>Mn<sub>0.66</sub>O<sub>2</sub> – NaTi<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>
- G. Zampardi, E. Ventosa, F. La Mantia, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **27** (2015) 1017-1025. Scanning electrochemical microscopy applied to the investigation of lithium (de-)insertion in TiO<sub>2</sub>

- A. Contin, S. Frasca, J. Vivekananthan, S. Leimkühler, U. Wollenberger, N. Plumeré, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **27** (2015) 938-944. A pH responsive redox hydrogel for electrochemical detection of redox silent biocatalytic processes. Control of hydrogel solvation
- R. Meyer, K. Sliozberg, C. Khare, W. Schuhmann, A. Ludwig, *ChemSusChem* **8** (2015) 1279-1285. High-throughput screening of thin film semiconductor materials libraries II: Composition, crystallinity, morphology, thickness and photocurrent density of Fe-W-O libraries
- K. Sliozberg, D. Schäfer, T. Erichsen, C. Khare, R. Meyer, A. Ludwig, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **8** (2015) 1270-1278. High-throughput screening of thin film semiconductor materials libraries I: System development and a case study for Ti-W-O
- J. Cancino, J. Masa, S. Borgmann, S. A. S. Machado, V. Zucolotto, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **182** (2015) 1079-1087. Selective microsensor for nitric oxide based on layer-by-layer assembly of a polycationic dendrimer and a Ni tetrasulphonated phthalocyanine
- K. Olech, R. Gutkowski, V. Kuznetsov, S. Roszak, J. Sołoduch, W. Schuhmann, *ChemPlusChem* **80** (2015) 679-687. Synthesis and electrochromic properties of conducting polymers based on highly planar 2,7-disubstituted xanthene derivatives
- G. Zampardi, F. La Mantia, W. Schuhmann, *RSC Adv.* **5** (2015) 31166-31171. Determination of the formation and range of stability of the SEI on glassy carbon by local electrochemistry
- A. Ganassin, V. Colic, J. Tymoczko, A. S. Bandarenka, W. Schuhmann, *PhysChemChemPhys* **17** (2015) 8349-8355. Non-covalent interactions in water electrolysis: influence on the activity of Pt(111) and iridium oxide catalysts in acidic media
- K. Sliozberg, H. S. Stein, C. Khare, B. A. Parkinson, A. Ludwig, W. Schuhmann, *ACS Appl. Mater. Int.* **7** (2015) 4883-4889. Fe-Cr-Al containing oxide semiconductors as potential solar water splitting materials
- J. Tymoczko, V. Colic, A. Ganassin, W. Schuhmann, A. S. Bandarenka, *Catal. Today* **244** (2015) 96-102. Influence of the alkali metal cations on the activity of Pt(111) towards model electrocatalytic reactions in acidic sulfuric media
- R. Gutkowski, D. Schäfer, T. C. Nagaiah, J. Yanez-Heras, W. Busser, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **27** (2015) 285-292. Efficient deposition of semiconductor powders for photoelectrocatalysis by airbrush spraying
- T. Kothe, W. Schuhmann, M. Rögner, N. Plumeré, *Biohydrogen* (M. Rögner, ed.), deGruyter, Berlin, 2015, 189-210. Semi-artificial photosynthetic Z-scheme for hydrogen production from water
- R. A. Rincón, A. Battistel, E. Ventosa, X. Chen, M. Nebel, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **8** (2015) 560-566. Using cavity microelectrodes for electrochemical noise studies of oxygen-evolving catalysts
- P. Pinyou, S. Pöller, X. Chen, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **27** (2015) 200-208. Optimization of Os-complex modified redox polymers for improving biocatalysis of PQQ-sGDH based electrodes
- K. Hasan, K. Vijalapuram Raghava Reddy, V. Eßmann, K. Górecki, P. Ó. Conghaile, W. Schuhmann, D. Leech, C. Hägerhäll, Lo Gorton, *Electroanalysis* **27** (2015) 118-127. Electrochemical communication between electrodes and *Rhodobacter capsulatus* grown in different metabolic modes
- K. Sliozberg, R. Meyer, A. Ludwig, W. Schuhmann, *ChemPlusChem* **80** (2015) 136-140. A combinatorial study of photoelectrochemical properties of Fe-W-O thin films
- R. Chetty, K. Kumar Maniam, W. Schuhmann, M. Muhler, *ChemPlusChem* **80** (2015) 130-135. Oxygen plasma-functionalized carbon nanotubes as support for Pt-Ru catalysts applied in electrochemical methanol oxidation
- V. Colic, J. Tymoczko, A. Maljusch, A. Ganassin, W. Schuhmann, A. S. Bandarenka, *ChemElectroChem* **2** (2015) 143-149. Experimental aspects in benchmarking of the electrocatalytic activity
- A. Contin, N. Plumeré, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **51** (2015) 50-53. Controlling the charge of pH-responsive redox hydrogels by means of redox-silent biocatalytic processes. A biocatalytic off/on-switch

- V. Eßmann, D. Jambrec, A. Kuhn, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **50** (2015) 77-80. Linking glucose oxidation to luminol-based electrochemiluminescence using bipolar electrochemistry
- J. Tymoczko, V. Colic, A. S. Bandarenka, W. Schuhmann, *Suf. Sci.* **631** (2015) 81–87. Detection of 2D phase transitions at the electrode/electrolyte interface using electrochemical impedance spectroscopy
- M. Alles, A. Rosenhahn, *Biofouling* **31(5)** (2015) 469. Microfluidic detachment assay to probe the adhesion strength of diatoms
- K.L. Cho, A. Rosenhahn, R. Thelen, M. Grunze, M. Lobban, M. Karahka, H.J. Kreuzer, *Langmuir* **31(40)** (2015) 11105. Shear-induced detachment of polystyrene beads from SAM-coated surfaces
- M. Rose, P. Skopintsev, D. Dzhigayev, O. Gorobtsov, T. Senkbeil, A. von Gundlach, T. Gorniak, A. Shabalin, J. Viefhaus, A. Rosenhahn, I.A. Vartanians, *Journal of Synchrotron Radiation* **22** (2015) 819. Water window ptychographic imaging with characterized coherent X-rays
- S.M. Vater, J. Finlay, M.E. Callow, J.A. Callow, T. Ederth, B. Liedberg, M. Grunze, A. Rosenhahn, *Biofouling* **31(2)** (2015) 229. Holographic microscopy provides new insights into the settlement of zoospores of the green alga *Ulva linza* on cationic oligopeptide surfaces
- S. Maleschlijski, S. Bauer, A. Di Fino, H. Sendra, A.S. Clare, A. Rosenhahn, *Journal of the Royal Society Interface* **12(102)** (2015) 20141104. Classification of the pre-settlement behaviour of barnacle cyprids
- S. Vock, K. Tschulik, M. Uhlemann, C. Hengst, S. Fähler, L. Schultz, V. Neu, *J. Appl. Phys.* **118** (2015) 233901. Magnetostatic nearest neighbor interactions in a  $\text{Co}_{48}\text{Fe}_{52}$  nanowire array probed by in-field magnetic force microscopy
- B. J. Plowman, K. Tschulik, N. P. Young, R. G. Compton, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** (2015) 26054-26058. Capping agent promoted oxidation of gold nanoparticles: cetyl trimethylammonium bromide
- K. Ngamchuea, K. Tschulik, R. G. Compton, *Nano Res.* **8** (2015) 3293-3306. Magnetic control: Switchable ultrahigh magnetic gradients at  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticles to enhance solution-phase mass transport
- S. V. Sokolov, K. Tschulik, C. Batchelor-McAuley, K. Jurkschat, R. G. Compton, *Anal. Chem.* **87** (2015) 10033-10039. Reversible or Not? Distinguishing Agglomeration and Aggregation at the Nanoscale
- S. Eloul, E. Kätelhöhn, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, R. G. Compton, *J. Electroanal. Chem.* **755** (2015) 136-142. Diffusional impacts of nanoparticles on microdisc and microwire electrodes: The limit of detection and first passage statistics
- E. E. L. Tanner, K. Tschulik, R. Tahany, K. Jurkschat, C. Batchelor-McAuley, R. G. Compton, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 18808-18815. Nanoparticle capping agent dynamics and electron transfer: polymer-gated oxidation of silver nanoparticles
- K. Tschulik, K. Ngamchuea, C. Ziegler, M. G. Beier, C. Damm, A. Eychmueller, R. G. Compton, *Adv. Funct. Mater.* **25** (2015) 5149-5158. Core-shell nanoparticles: characterizing multifunctional materials beyond imaging-distinguishing and quantifying perfect and broken shells
- B. J. Plowman, K. Tschulik, E. Walport, N. P. Young, R. G. Compton, *Nanoscale* **7** (2015) 12361-12364. The fate of nano-silver in aqueous media
- C. Lin, X. Jiao, K. Tschulik, C. Batchelor-McAuley, R. G. Compton, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 16121-16130. Influence of adsorption kinetics upon the electrochemically reversible hydrogen oxidation reaction
- S. V. Sokolov, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, S. Fletcher, R. G. Compton, *Chem. – Eur. J.* **21** (2015), 10741-10746. Are nanoparticles spherical or quasi-spherical?
- K. Ngamchuea, S. Eloul, K. Tschulik, R. G. Compton, *Anal. Chem.* **87** (2015) 7226-7234. Advancing from rules of thumb: quantifying effects of small density changes in mass transport to electrodes. understanding natural convection
- X. Li, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, L. Shao, R. G. Compton, *ChemPhysChem* **16** (2015) 2322-2325. Ultra-small palladium nanoparticle decorated carbon nanotubes: conductivity and reactivity

- S. Eloul, E. Kätelhön, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, R. G. Compton, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 14400-14410. Diffusional nanoimpacts: the stochastic limit
- K. Ngamchuea, K. Tschulik, S. Eloul, R. G. Compton, *ChemPhysChem* **16** (2015) 2338-2347. In Situ Detection of Particle Aggregation on Electrode Surfaces
- C. Batchelor-McAuley, J. Ellison, K. Tschulik, P. L. Hurst, R. Boldt, R. G. Compton, *Analyst* **140** (2015) 5048-5054. In situ nanoparticle sizing with zeptomole sensitivity
- L. Sepunaru, K. Tschulik, C. Batchelor-McAuley, R. Gavish, R. G. Compton, *Biomater. Sci.* **3** (2015) 816-820. Electrochemical detection of single E. coli bacteria labeled with silver nanoparticles
- T. R. Bartlett, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, K. Jurkschat, R. G. Compton, *ChemElectroChem* **2** (2015) 522-528. Metal-halide Nanoparticle Formation: Electrolytic and Chemical Synthesis of Mercury(I) Chloride Nanoparticles
- X. Jiao, C. Batchelor-McAuley, E. Kätelhön, J. Ellison, K. Tschulik, R. G. Compton, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 9402-9410. The Subtleties of the Reversible Hydrogen Evolution Reaction Arising from the Nonunity Stoichiometry
- J. Zhao, S. Xu, K. Tschulik, R. G. Compton, M. Wei, D. O'Hare, D. G. Evans, X. Duan, *Adv. Funct. Mater.* **25** (2015) 2745-2753. Molecular-scale hybridization of clay monolayers and conducting polymer for thin-film supercapacitors
- J. Ellison, S. Eloul, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, C. Salter, R. G. Compton, *J. Electroanal. Chem.* **745** (2015) 66-71. The effect of insulator nano-sheath thickness on the steady state current at a micro-disc electrode
- J. Poon, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, R. G. Compton, *Chem. Sci.* **6** (2015) 2869-2876. Single graphene nanoplatelets: capacitance, potential of zero charge and diffusion coefficient
- K. Tschulik, W. Cheng, C. Batchelor-McAuley, S. Murphy, D. Omanović, R. G. Compton, *ChemElectroChem* **2** (2015) 112-118. Non-invasive probing of nanoparticle electrostatics
- J. Poon, C. Batchelor-McAuley, K. Tschulik, R. G. Palgrave, R. G. Compton, *Nanoscale* **7** (2015) 2069-2075. Bifunctional redox tagging of carbon nanoparticles
- G. Mutschke, K. Tschulik, M. Uhlemann, J. Fröhlich, *Magnetohydrodynamics* **51** (2015) 369-374. Numerical simulation of the mass transfer of magnetic species at electrodes exposed to small-scale gradients of the magnetic field
- G. Mutschke, S. Mühlenhoff, X. Yang, K. Eckert, K. Tschulik, M. Uhlemann, J. Fröhlich, A. Bund, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **365** (2015) 182-186. 3. Workshop "Meßtechnik für stationäre und transiente Mehrphasenströmungen", 14. Oktober 1999 in Rossendorf

## Anorganische Chemie I / Inorganic Chemistry I

- D. Wang, C. Richter, A. Rühling, P. Drücker, D. Siegmund, N. Metzler-Nolte, F. Glorius, H.-J. Galla, *Chem. Eur. J.* **21** (2015) 15123-15126. A remarkably simple class of imidazolium-based lipids and their biological properties
- C. Muegge, T. Marzo, L. Massai, J. Hildebrandt, G. Ferraro, A. Merlino, N. Metzler-Nolte, L. Messori, W. Weigand, P. Rivera-Fuentes, *Inorg. Chem.* **54** (2015) 8560-8570. Platinum(II) Complexes with O,S Bidentate Ligands: Biophysical Characterization, Antiproliferative Activity and Crystallographic Evidence of Protein Binding.
- M. Graf, Y. Gothe, N. Metzler-Nolte, R. Czerwieniec, K. Sünkel, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **641** (2015) 1798-1802. Cyclometalated Iridium(III) Complexes Containing Semicarbazone Ligands: Synthesis, Characterization, Photophysical and Biological Studies

- D. Bulfield, M. Maschke, M. Lieb, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem* **797** (2015) 125-130. Synthesis, Chemical Reactivity and Electrochemical Behaviour of Mono- and Difluoro Metallocenes
- A. Leonidova, C. Foerster, M. Schubert, K. Zarschler, H.-J. Pietzsch, J. Steinbach, R. Bergmann, N. Metzler-Nolte, H. Stephan, G. Gasser, *Chem. Sci.* **6** (2015) 5601 – 5616. *In vivo* Demonstration of an Active Tumor Pretargeting Approach with Peptide Nucleic Acid Bioconjugates as Complementary System
- J. L. Jios, N. Metzler-Nolte, P. G. Vázquez, G. P. Romanelli, *Res. Chem. Intermed.* **42** (2015) 977-986. One-pot synthesis of ferrocenyl-pyrimidones using a recyclable molibdosilicic H<sub>4</sub>SiMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub> heteropolyacid
- M. Maschke, J. Grohmann, C. Nierhaus, M. Lieb, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **16** (2015) 1333-1342. Peptide Bioconjugates of Electron-poor Metallocenes – Synthesis, Characterization, and Anti-Proliferative Activity
- B. C. Hoffknecht, D. J. Worm, P. Prochnow, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *ChemMedChem* **10** (2015) 1564-1569. Influence of Multivalency of Ultrashort Arg-Trp- based Antimicrobial Peptides (AMP) on the Antibacterial Activity
- Y. Gothe, L. Messori, T. Marzo, N. Metzler-Nolte, *Chem. Commun.* **51** (2015) 3151-3153. Cytotoxic Activity and Protein Binding through an unusual oxidative mechanism by an Iridium(I)–NHC Complex
- M. Strack, S. Langklotz, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, H. B. Albada, *Org. Chem. Front.* **2** (2015) 531-535. Synthesis of Bisarylethyne-Containing Peptides
- B. C. Hoffknecht, H. B. Albada, M. Sturm, P. Prochnow, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Med. Chem. Commun.* **6** (2015) 372–376. Synthesis and Antibacterial Activity of Trivalent Ultrashort Arg-Trp- based Antimicrobial Peptides (AMPs)
- L. Danne, M. Aktas, J. Gleichenhagen, N. Grund, D. Wagner, H. Schwalbe, B. Hoffknecht, N. Metzler-Nolte, F. Narberhaus, *Mol. Microbiol.* **95** (2015) 313-331. Membrane-binding mechanism of a bacterial phospholipid N-methyltransferase
- M. Patra, M. Wenzel, P. Prochnow, V. Pierroz, G. Gasser, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Chem. Sci.* **6** (2015) 214-224. An organometallic structure-activity relationship study reveals the essential role of a Re(CO)<sub>3</sub> moiety in the activity against gram-positive pathogens including MRSA
- A. Gross, H. Alborzinia, S. Piantavigna, L. L. Martin, S. Wölfl, N. Metzler-Nolte, *Metallomics* **7** (2015) 371-384. <sup>1</sup>H NMR Vesicular Disruption of Lysosomal Targeting Organometallic Polyarginine Bioconjugates
- U. P. Preiss, D. H. Zaitsau, W. Beichel, D. Himmel, A. Higelin, K. Merz, N. Caesar, S. P. Verevkin, *ChemPhysChem* **16** (2015) 2890-2898. Estimation of lattice enthalpies of ionic liquids supported by hirshfeld analysis
- A. Juergensen, N. Heutz, H. Raschke, K. Merz, R. Hergenroeder, *Analytical Chemistry* **87** (2015), 7848-7856. Behavior of supported palladium oxide nanoparticles under reaction conditions, studied with near ambient pressure XPS
- K. Merz, A. Kupka, *Crystal Growth & Design* **15** (2015) 1553-1558. Deuterium perturbs the molecular arrangement in the solid state
- S. Schoeler, K. Merz, A. Puls, M. Winter, G. Dyker, *European Journal of Inorganic Chemistry* **2015** (2015) 53-57. Synthesis and characterization of ortho-thio-functionalized triarylmethyl palladium complexes
- R. Goy, L. Bertini, C. Elleouet, H. Goerls, G. Zampella, L. De Gioia, P. Schollhammer, U.-P. Apfel, W. Weigand, *Dalton Trans* **44** (2015) 1690-1699. A sterically stabilized FeI-FeI semi-rotated conformation of [FeFe] hydrogenase subsite model
- A. Petuker, C. Merten, U.-P. Apfel, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2015) 2139-2144. Modulating Sonogashira cross-coupling reactivity in four-coordinate nickel complexes by using geometric control
- C. T. Anderson, R. J. Radford, Daniel Y. Zhang, U.-P. Apfel, S. J. Lippard, T. Tzounopoulos, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **112** (2015), E2705-E2714. Modulation of extrasynaptic NMDA receptors by synaptic and tonic zinc

## Anorganische Chemie II / Inorganic Chemistry II

- W. Aigner, G. K. Nenova, M. A. Sliem, R. A. Fischer, M. Stutzmann, R. N. Pereira, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 16276-16285. Electronic changes induced by surface modification of Cu<sub>2-x</sub>S nanocrystals
- H. Banh, C. Gemel, R. W. Seidel, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* **51** (2015) 2170-2172. A solvated zinc analogue of the calomel-dication
- V. Bon, J. Pallmann, E. Eisbein, H. C. Hoffmann, I. Senkovska, I. Schwedler, A. Schneemann, S. Henke, D. Wallacher, R. A. Fischer, G. Seifert, E. Brunner, S. Kaskel, *Microporous Mesoporous Mater.* **216** (2015) 64-74. Characteristics of flexibility in metal-organic framework solid solutions of composition [Zn<sub>2</sub>(BME-bdc)<sub>x</sub>(DB-bdc)<sub>2-x</sub>dabco]<sub>n</sub>: In situ powder X-ray diffraction, in situ NMR spectroscopy, and molecular dynamics simulations
- Z. Fang, B. Bueken, D. E. De Vos, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 7234-7254. Defect-engineered metal-organic frameworks
- K. Freitag, H. Banh, C. Gemel, P. Jerabek, R. W. Seidel, G. Frenking, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **54** (2015) 352-358. Dizinc cation [Zn<sub>2</sub>](2+) trapped in a homoleptic metalloid coordination environment stabilized by dispersion forces: [Zn<sub>2</sub>(GaCp\*)<sub>6</sub>][BAr<sub>4</sub>(F)]<sub>2</sub>
- K. Freitag, C. Gemel, P. Jerabek, M. I. Oppel, R. W. Seidel, G. Frenking, H. Banh, K. Dilchert, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 4370-4374. The σ-aromatic clusters [Zn<sub>3</sub>]<sup>+</sup> and [Zn<sub>2</sub>Cu]: embryonic brass
- L. Heinke, M. Tu, S. Wannapaiboon, R. A. Fischer, C. Woell, *Microporous Mesoporous Mater.* **216** (2015) 200-215. Surface-mounted metal-organic frameworks for applications in sensing and separation
- K. Khaletskaya, A. Pougin, R. Medishetty, C. Roesler, C. Wiktor, J. Strunk, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **27** (2015) 7248-7257. Fabrication of gold/titania photocatalyst for CO<sub>2</sub> reduction based on pyrolytic conversion of the metal-organic framework NH<sub>2</sub>-MIL-125(Ti) loaded with gold nanoparticles
- J. Kim, M. Halbherr, C. Gemel, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **54** (2015) 9675-9677. Oxidation of Ni-ECp\* complexes: stable open-shell Ni(I) cations [Ni(ECp\*)<sub>n</sub>(PPh<sub>3</sub>)(4-n)]<sup>+</sup> (n = 2, 4; E = Al, Ga)
- S. J. Kim, V.-S. Dang, K. Xu, D. Barreca, C. Maccato, G. Carraro, R. K. Bhakta, M. Winter, H.-W. Becker, D. Rogalla, C. Sada, R. A. Fischer, A. Devi, *Phys. Status Solidi A* **212** (2015) 1563-1570. MOCVD of TiO<sub>2</sub> thin films from a modified titanium alkoxide precursor
- Luz, C. Roesler, K. Epp, F. X. Llabres i. Xamena, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2015** (2015) 3904-3912. Pd@UiO-66-Type MOFs prepared by chemical vapor infiltration as shape-selective hydrogenation catalysts
- C. Roesler, R. A. Fischer, *CrystEngComm* **17** (2015) 199-217. Metal-organic frameworks as hosts for nanoparticles
- Schneemann, S. Henke, R. A. Fischer, E. D. Bloch, J. R. Long, E. D. Bloch, P. L. Llewellyn, *Chemistry* **21** (2015) 18764-18769. Influence of solvent-like sidechains on the adsorption of light hydrocarbons in metal-organic frameworks
- Z. Sun, E. Madej, C. Wiktor, I. Sinev, R. A. Fischer, G. van Tendeloo, M. Muhler, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Chem. - Eur. J.* **21** (2015) 16154-16161. One-pot synthesis of carbon-coated nanostructured iron oxide on few-layer graphene for lithium-ion batteries
- M. Tu, S. Wannapaiboon, K. Khaletskaya, R. A. Fischer, *Adv. Funct. Mater.* **25** (2015) 4470-4479. Engineering zeolitic-imidazolate framework (ZIF) thin film devices for selective detection of volatile organic compounds
- S. Wannapaiboon, M. Tu, K. Sumida, K. Khaletskaya, S. Furukawa, S. Kitagawa, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem. A* **3** (2015) 23385-23394. Hierarchical structuring of metal-organic framework thin-films on quartz crystal microbalance (QCM) substrates for selective adsorption applications
- S. Bureekaew, V. Balwani, S. Amirjalayer, R. Schmid, *CrystEngComm* **17** (2015) 344-352. Isorecticular isomerism in 4,4-connected paddle-wheel metal-organic frameworks: structural prediction by the reverse

topological approach

- L. Vanduyfhuys, S. Vandenbrande, T. Verstraelen, R. Schmid, M. Waroquier, V. Van Speybroeck, *J. Comput. Chem.* **36** (2015) 1015-1027. QuickFF: A program for a quick and easy derivation of force fields for metal-organic frameworks from ab initio input
- M. Peksa, S. Burrekaew, R. Schmid, J. Lang, F. Stallmach, *Micropor. Mesopor. Mat.* **216** (2015) 75-81. Rotational and translational dynamics of CO<sub>2</sub> adsorbed in MOF Zn<sub>2</sub>(bdc)<sub>2</sub>(dabco)

## Physikalische Chemie I / Physical Chemistry I

- G. Antczak, W. Kamiński, A. Sabik, Chr. Zaum, K. Morgenstern, *J. Am. Chem. Soc.* **137** (2015) 14920-14929. Complex surface diffusion mechanisms of cobalt phthalocyanine molecules on Ag(100)
- O. Godsi, G. Corem, T. Kravchuk, C. Bertram, K. Morgenstern, H. Hedgeland, A. P. Jardine, W. Allison, J. Ellis, G. Alexandrowicz, *J. Phys. Chem. Lett.* **6** (2015) 4165-4170. Correlated diffusion on a nano-structured surface: Na/Cu(115)
- A. Wykrota, M. Bazarnik, R. Czajka, K. Morgenstern, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 28830-28836. Manipulation of 1,3-dichlorobenzene on Ge(001) between two adsorption sites by inelastic tunneling electron manipulation
- F. Calle-Vallejo, J. Tymoczko, V. Colic, Q.H. Vu, M.D. Pohl, K. Morgenstern, D. Loffreda, Ph. Sautet, W. Schuhmann, A.S. Bandarenka, *Science* **350** (2015) 185-189. Can we design active catalysts by simply counting nearest neighbors?
- B. Gerß, N. Osterloh, S.-C. Heidorn, K. Morgenstern, *Cryst. Growth Des.* **15** (2015) 3046-3051. Diffusion limited aggregation in low temperature growth of sodium chloride
- K. Boom, M. Müller, F. Stein, St. Ernst, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 17718-17724. Adsorption of a switchable industrial dye on Au(111) and Ag(111)
- A. Beichert, Ch. Zaum, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **92** (2015) 045422 – 1-6. Dependence of alloying and island composition on terrace width
- K. Morgenstern, D. Marx, M. Havenith, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8295-8296. Editorial of the PCCP themed issue on “Solvation Science”
- D. Marx, K. Morgenstern, M. Havenith, M. Muhler, *Bunsenmagazin* **2** (2015) 36. Solvation Science - main topic of the Bunsentagung 2015
- D. Marx, K. Morgenstern, M. Havenith, M. Muhler, *Bunsenmagazin* **2** (2015) 33. At the heart of the Ruhr Metropolis: Bochum explores Solvation Science
- Ch. Zaum, K.M. Meyer-auf-der-Heide, M. Mehlhorn, S. McDonough, W.F. Schneider, K. Morgenstern, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 146104. Differences between adiabatic and non-adiabatic diffusion
- S.-C. Heidorn, C. Bertram, P. Cabrera-Sanfelix, K. Morgenstern, *ACS Nano* **9** (2015) 3572-3578. Consecutive mechanism in the diffusion of D<sub>2</sub>O on a NaCl(100) bilayer
- M. Bazarnik, L. Jurczyszyn, R. Czajka, K. Morgenstern, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 5366-5371. Mechanism of a molecular photo-switch adsorbed on Si(100)
- G. Antczak, W. Kamiński, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **119** (2015) 1442-1450. Stabilizing CuPc coordination networks on Ag(100) by Ag atoms
- J. Henzl, K. Boom, K. Morgenstern, *J. Chem. Phys.* **142** (2015) 101920 – 1-5. Influence of water onto the structure formation of molecular islands

## Physikalische Chemie II / Physical Chemistry II

- E. Edengeiser, K. Meister, E. Bründermann, S. Büning, S. Ebbinghaus, M. Havenith, *RSC Advances* **5** (14) (2015) 10424-10429. Non-invasive chemical assessment of living human spermatozoa
- E. Edengeiser, J.-W. Lackmann, E. Bründermann, S. Schneider, J. Benedikt, J. E. Bandow, M. Havenith, *J. Biophotonics* **8**, No. 11–12, (2015) 918–924. Synergetic effects of atmospheric pressure plasma-emitted components on DNA oligomers: a Raman spectroscopic study
- D. Leicht, D. Habig, G. Schwaab, M. Havenith, *J. Physical Chemistry A* **119** (6) (2015) 1007-1012. Complexation of allyl radicals and hydrochlorid acid in helium nanodroplets
- R. Pothiraja, K. Kartaschew, N. Bibinov, M. Havenith, P. Awakowicz, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48** (2015) 115201. Diamond single micro-crystals and graphitic micro-balls formation in plasmoids under atmospheric pressure
- D. Decka, G. Schwaab, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 11898 – 11907. A THz/FTIR fingerprint of the solvated proton: evidence for Eigen structure and Zundel dynamics
- K. Kartaschew, M. Mischo, S. Baldus, E. Bründermann, P. Awakowicz, M. Havenith, *Biointerphases* **10** (2) (2015) 029516. Unraveling the interactions between cold atmospheric plasma and skin-components with vibrational microspectroscopy
- S. Bauer, J. Stern, F. Böhm, C. Gainaru, M. Havenith, T. Loerting, R. Böhmer, *Vibrational Spectroscopy* **79** (2015) 59-65. Vibrational study of anharmonicity, supramolecular structure, and hydrogen bonding in two octanol isomer
- D. Habig, D. Leicht, G. Schwaab, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **143** (2) (2015) 024308/1-024308/4. Reassignment of  $\nu_{2,3}$  IR band of the allyl radical in liquid helium nanodroplets
- F. Böhm, V. Sharma, G. Schwaab, M. Havenith, *PCCP* **17** (2015) 19582-19591. The low frequency modes of solvated ions and ion pairs in aqueous electrolyte solutions: iron(II) and iron(III) chloride
- L. Knake, G. Schwaab, K. Kartaschew, M. Havenith, *J. Phys. Chem. B* **119** (43) (2015) 13842-13851. Solvation dynamics of trimethylamine N-Oxide in aqueous solution probed by Terahertz spectroscopy
- Y. Xu, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **143** (17) (2015) 170901/1-170901/7. Perspective: watching low-frequency vibrations of water in biomolecular recognition by THz spectroscopy
- E. Decaneto, S. Suladze, Chr. Rosin, M. Havenith, W. Lubitz, R. Winter, *Biophysical Journal* **109** (11) (2015) 2371-238. Pressure and temperature effects on the activity and structure of the catalytic domain of human MT2-MMP
- M. Havenith, *Angewandte Chemie, Intl. Edition* **55** (4) (2015) 1218-1219. Solvation Science: A new interdisciplinary field
- T. Vöpel, R. Scholz, L. Davico, M. Groß, S. Büning, S. Kareth, E. Weidner, S. Ebbinghaus. *Chem. Commun.* **51** (2015) 6913-6916. Infrared laser triggered release of bioactive compounds from single hard shell microcapsules
- D. Gnutt, M. Gao, O. Brylski, M. Heyden, S. Ebbinghaus. *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**(8) (2015) 2548-2551. Excluded-volume effects in living cells
- D. Gnutt, M. Gao, O. Brylski, M. Heyden, S. Ebbinghaus. *Angew. Chem.* **127** (2015) 2578-2581. Effekte des Volumenausschlusses in lebenden Zellen
- M. Gao, K. Estel, J. Seeliger, R.P. Friedrich, S. Dogan, E.E. Wanker, R. Winter, S. Ebbinghaus. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8338-8348. Modulation of human IAPP fibrillation: cosolutes, crowders and chaperones
- F. Kanal, D. Schleier, P. Nuernberger, *ChemPhysChem* **16** (2015) 3143–3146. Ultrafast photogeneration of a tetrazoliny radical

- P. Nuernberger, S. Ruetzel, T. Brixner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 11368–11386. Multidimensional electronic spectroscopy of photochemical reactions; *Angew. Chem.* **127** (2015) 11526–11546. Multidimensionale elektronische Spektroskopie photochemischer Reaktionen
- P. Nuernberger, S. Ruetzel, T. Brixner, *Proc. SPIE* **9361** (2015) 936108. Elucidating photodynamics with ultrafast pulse sequences: pump-repump, multidimensional spectroscopy, and beyond
- A. Steinbacher, P. Nuernberger, T. Brixner, *Springer Proc. Phys.* **162** (2015) 369–372. Discriminating racemic from achiral solutions with femtosecond accumulative spectroscopy
- A. Steinbacher, S. Roeding, T. Brixner, P. Nuernberger, *Springer Proc. Phys.* **162** (2015) 180–183. The ultrafast Wolff rearrangement in the gas phase
- P. K. Verma, A. Steinbacher, F. Koch, P. Nuernberger, T. Brixner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8459–8466. Monitoring ultrafast intramolecular proton transfer processes in an unsymmetric  $\beta$ -diketone
- Steinbacher, P. Nuernberger, T. Brixner, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 6340–6346. Optical discrimination of racemic from achiral solutions

## Biochemie I / Biochemistry I

- S. Pachernegg, Y. Münster, E. Muth-Köhne, G. Fuhrmann, M. Hollmann, *Frontiers in Cellular Neuroscience* **9** art. 69 (2015) 1-14. GluA2 is rapidly edited at the Q/R site during neural differentiation *in vitro*. **Open Access**
- A. Bliznyuk, B. Aviner, H. Golan, M. Hollmann, Y. Grossman, *European Journal of Neuroscience* **42** (2015) 2577-2584. The N-methyl-D-aspartate receptor's neglected subunit: GluN1 matters under normal and hyperbaric conditions
- L. Laprell, E. Repak, V. Franckevicius, F. Hartrampf, J. Terhag, M. Hollmann, M. Sumser, N. Rebola, David DiGregorio, D. Trauner, *Nature Communications* **6** art. 8076 (2015) 1-11. Optical control of NMDA-receptors with a diffusible photoswitch
- V. Matschke, C. Theiss, M. Hollmann, E. Schulze-Bahr, F. Lang, G. Seebohm, N. Strutz-Seebohm, *Frontiers in Cellular Neuroscience* **9** art. 387 (2015) 1-14. NDRG2 phosphorylation provides negative feedback for SGK1-dependent regulation of a kainate receptor in astrocytes. **Open Access**
- M. Hollmann, *114th General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry*, Bochum, 14.-16.05.2015, Special Volume, Faculty of Chemistry and Biochemistry, Ruhr University Bochum (2015) 22-23. Ionotropic glutamate receptors: structure, function, regulation, and modulation
- N. Krogsgaard-Larsen, M. Storgaard, C. Møller, C.S. Demmer, J. Hansen, L. Han, R.N. Monrad, B. Nielsen, D. Tapken, D.S. Pickering, J.S. Kastrop, K. Frydenvang, L. Bunch, *Journal of Medicinal Chemistry* **58(15)** (2015) 6131-6150. Structure-activity relationship study of ionotropic glutamate receptor antagonist (2S,3R)-3-(3-carboxyphenyl)pyrrolidine-2-carboxylic acid

## Biochemie II / Biochemistry II

- A. Gesper, D. Thatenhorst, S. Wiese, T. Tsai, I. D. Dietzel, P. Happel, *Scanning* **37** (2015) 226-231. Long-term, long-distance recording of a living migrating neuron by Scanning Ion Conductance Microscopy, (DOI: 10.1002/sca.21200)
- B. A. Igelhorst, V. Niederkinkhaus, C. Karus, M. D. Lange, Dietzel, I. D., *Philosophical Transactions of The Royal Society B-Biological Sciences* **370** (2015) 20140194. Regulation of neuronal excitability by release of proteins from glial cells (DOI: 10.1098/rstb.2014.0194)

- B. Kohl, I. Rothenberg, S. A. Ali, M. Alam, G. Seebohm, H. Kalbacher, W. Voelter, R. Stoll, *Toxicon* **101** (2015) 70-78. A chemical lift-off process. Solid phase synthesis, NMR structure determination of  $\alpha$ -KTx3.8, its in silico docking to Kv1.x potassium channels, and electrophysiological analysis provide insights into toxin-channel selectivity
- A. Korste, H. Wulforth, T. Ikegami, M. M. Nowaczyk, R. Stoll, *Biomol NMR Assign.* **9** (2015) 169-171.  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and  $^{15}\text{N}$  chemical shift assignments of the NDH-1 complex subunit CupS
- A. Korste, H. Wulforth, T. Ikegami, M. M. Nowaczyk, R. Stoll, *Biochim Biophys Acta* **1847** (2015) 1212-1119. Solution structure of the NDH-1 complex subunit CupS from *Thermosynechococcus elongatus*
- A. Korste, H. Wulforth, T. Ikegami, M. M. Nowaczyk, R. Stoll, *Data Brief.* **6** (2015) 249-252. NOE distance and dihedral angle restraints to calculate the solution structure of the NDH-1 complex subunit CupS from *Thermosynechococcus elongatus*
- S. K. Gaßmeyer, H. Yoshikawa, J. Enoki, N. Hülsemann, R. Stoll, K. Miyamoto, R. Kourist, *ChemBioChem* **16** (2015) 1943-1949. STD-NMR-based protein engineering of the unique arylpropionate-racemase AMDase G74C

## Didaktik der Chemie / Didactics of Chemistry

- Chr. Strippel, K. Sommer, *International Journal of Science Education* (2015) **Vol. 37, No. 18**, 2965-2989. Teaching nature of scientific inquiry in chemistry: how do german chemistry teachers use labwork to teach NOSI?
- H. Steff, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **26** (2015) 150, 32-35. Sanierputze und dichtungsschlämme – Dnwendungsbeispiele im Modellexperiment
- K. Sommer, H. Steff, S. Venke, *Unterricht Chemie* **26** (2015) 150, 6-10. Bauchemie – ein Thema für den Unterricht?
- U. Krupp, K. Sommer, M. Klein, Chr. Schneider, *Unterricht Chemie* **26** (2015) 148, 24-31. Nachwachsende Rohstoffe – immer nachhaltig?
- N. Efing, A. Kakoschke, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **26** (2015) 147, 24-29. Experimentelle Hausaufgaben
- T.P. Schröder, H. Steff, K. Sommer, *Praxis der Naturwissenschaften – Chemie in der Schule* **64** (2015) 5, S. 10-14. Die Low-Cost-Hartmannapparatur – selbst gebaut.

## Organische Chemie I / Organic Chemistry I

- J. R. Frost, S. M. Huber, S. Breitenlechner, C. Bannwarth, T. Bach, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 691-695. Enantiotopos-selective CH oxygenation catalyzed by a supramolecular ruthenium complex
- A. Linke, S. H. Jungbauer, S. M. Huber, S. R. Waldvogel, *Chem. Commun.* **51** (2015) 2040-2043. Potent affinity material for tracing acetone and related analytes based on molecular recognition by halogen bonds
- S. H. Jungbauer, S. Schindler, E. Herdtweck, S. Keller, S. M. Huber, *Chem. Eur. J.* **21** (2015) 13625-13636. Multiple multidentate halogen bonding in solution, in the solid state, and in the (calculated) gas phase
- S. H. Jungbauer, S. M. Huber, *J. Am. Chem. Soc.* **137** (2015) 12110-12120. Cationic multidentate halogen bond donors in halide abstraction organocatalysis: catalyst optimization by preorganization

## Organische Chemie II / Organic Chemistry II

- J. Mieres-Perez, E. Mendez-Vega, K. Velappan, W. Sander, *J. Org. Chem.* **80** (2015), 11926-11931. Reaction of triplet phenylnitrene with molecular oxygen
- B. P. Kar, W. Sander, *ChemPhysChem.* **16** (2015), 3603-3606. Reversible carbene formation in the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium acetate by vaporization and condensation
- S. Henkel, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015), 4603-4607. Activation of molecular hydrogen by a singlet carbene through quantum mechanical tunneling
- P. Costa, I. Trosien, M. Fernandez-Oliva, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015), 2656-2660. The Fluorenyl Cation
- K. Hanke, M. Kaufmann, G. Schwaab, M. Havenith, C. T. Wolke, O. Gorlova, M. A. Johnson, B. Prasat, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, *PCCP* **17** (2015), 8518-8529. Understanding the ionic liquid [NC<sub>4111</sub>][NTf<sub>2</sub>] from individual building blocks: an IR-spectroscopic study
- P. Costa, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **28** (2015), 71-74. 1-Phenyl-1,2,4,6-cycloheptatetraene: the missing intermediate of the diphenylcarbene to fluorene rearrangement
- D. Li, H. Li, B. Zhu, X. Zeng, H. Willner, H. Beckers, P. Neuhaus, D. Grote, W. Sander, *PCCP* **17** (2015), 6433-6439. Decomposition of fluorophosphoryl diazide: a joint experimental and theoretical study
- S. Schoeler, K. Merz, A. Puls, M. Winter, G. Dyker, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2015) 53-57. Synthesis and characterization of *ortho*-thio-functionalized triarylmethyl palladium complexes
- G. Dyker, C. Dietz, S. Grimme, I. M. Oppel, M. Richter, *Tetrahedron* **71** (2015) 5830-5834. Conformational alignment of isoquinolinyl substituents at the resorcinarene rim
- C. Merten, V. Smyrniotopoulos, D. Tasdemir, *Chem. Commun.* **51** (2015) 16217-16220. Assignment of absolute configurations of highly flexible linear diterpenes from the brown alga *Bifurcaria bifurcata* by VCD spectroscopy
- C. Merten, C. H. Pollok, S. Liao, B. List, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 8841-8845. Stereochemical communication within a chiral ion pair based catalyst
- S. Murarka, Z.-J. Jia, C. Merten, C.-G. Daniliuc, A. P. Antonchick, H. Waldmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015) 7653-7656. Rhodium(II)-catalyzed enantioselective synthesis of troponoids
- M. Potowski, C. Merten, A. P. Antonchick, H. Waldmann, *Chem. Eur. J.* **21** (2015) 4913-4917. Catalytic aerobic oxidation and tandem enantioselective cycloaddition in cascade multicomponent synthesis

## Technische Chemie / Industrial Chemistry

- A. Bordoloi, J. Anton, H. Ruland, M. Muhler, S. Kaluza, *Catal. Sic. Technol.* **5** (2015) 3603-3612. Metal-support interactions in surface-modified Cu-Co catalysts applied in higher alcohol synthesis
- M. Buchholz, Q. Li, H. Noei, A. Nefedov, Y. Wang, M. Muhler, K. Fink, C. Wöll, *Top. Catal.* **58** (2015) 174-183. The interaction of formic acid with zinc oxide: a combined experimental and theoretical study on single crystal and powder samples
- P. Chen, L. Wang, P. Wang, A. Kostka, M. Wark, M. Muhler, R. Beranek, *Catalysts* **5** (2015) 270-285. CNT-TiO<sub>2</sub>-delta composites for improved cocatalyst dispersion and stabilized photocatalytic hydrogen production
- K. Mette, S. Kuehl, A. Tarasov, H. Düdder, K. Kähler, M. Muhler, R. Schlögl, M. Behrens, *Catal. Today* **242** (2015) 101-110. Redox dynamics of Ni catalysts in CO<sub>2</sub> reforming of methane
- A. Lüken, M. Muhler, J. Strunk, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 10391-10397. On the role of gold nanoparticles in the selective photooxidation of 2-propanol over Au/TiO<sub>2</sub>

- J. Anton, H. Ruland, S. Kaluza, M. Muhler, *Catal. Lett.* **145** (2015) 1374-1381. Fast and reproducible testing of Cu-Co-based catalysts applied in the conversion of synthesis gas to ethanol and higher alcohols
- K. Xie, F. Yang, P. Ebbinghaus, A. Erbe, M. Muhler, W. Xia, *J. Energ. Chem.* **24** (2015) 407-415. A reevaluation of the correlation between the synthesis parameters and structure and properties of nitrogen-doped carbon nanotubes
- G. W. Busser, B. Mei, P. Weide, P. C. K. Vesborg, K. Stuehrenberg, M. Bauer, X. Huang, M.-G. Willinger, I. Chorkendorff, R. Schlögl, M. Muhler, *ACS Catal.* **5** (2015) 5530-5539. Cocatalyst designing: a regenerable molybdenum-containing ternary cocatalyst system for efficient photocatalytic water splitting
- J. Anton, J. Nebel, H. Song, C. Froese, P. Weide, H. Ruland, M. Muhler, S. Kaluza, *Appl. Catal. A* **505** (2015) 326-333. Structure-activity relationships of Co-modified Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts applied in the synthesis of higher alcohols from synthesis gas
- W. Dong, S. Reichenberger, S. Chu, P. Weide, H. Ruland, S. Barcikowski, P. Wagener, M. Muhler, *J. Catal.* **330** (2015) 479-506. The effect of the Au loading on the liquid-phase aerobic oxidation of ethanol over Au/TiO<sub>2</sub> catalysts prepared by pulsed laser ablation
- P. Wang, P. Weide, M. Muhler, R. Marschall, M. Wark, *APL Mater.* **3** (2015) 104412. New insight into calcium tantalate nanocomposite photocatalysts for overall water splitting and reforming of alcohols and biomass derivatives

## Theoretische Chemie / Theoretical Chemistry

- S. D. Ivanov, I. M. Grant, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **143** (2015) 124304-1-9. Quantum free energy landscapes from ab initio path integral metadynamics: double proton transfer in the formic acid dimer is concerted but not correlated
- S. Imoto, H. Forbert, and D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 24224-24237. Water structure and solvation of osmolytes at high hydrostatic pressure: pure water and TMAO solutions at 10 kbar versus 1 bar
- P. Seema, J. Behler, D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **115** (2015) 036102-1-5. Peeling by nanomechanical forces: a route to selective creation of surface structures
- M. Böckmann, N. L. Doltsinis, D. Marx, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (2015) 2429-2439. Adaptive switching of interaction potentials in the time domain: an extended Lagrangian approach tailored to transmute force field to QM/MM simulations and back
- L. Martinez--Suarez, N. Siemer, J. Frenzel, D. Marx, *ACS Catal.* **5** (2015) 4201-4218. Reaction network of methanol synthesis over Cu/ZnO nanocatalysts
- M. Wollenhaupt, M. Krupicka, D. Marx, *ChemPhysChem (Communication)* **16** (2015) 1593-1597. Should the Woodward-Hoffmann rules be applied to mechanochemical reactions?
- M. Smiechowski, J. Sun, H. Forbert, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8323-8329. Solvation shell resolved THz spectra of simple aqua ions-distinct distance- and frequency-dependent contributions of solvation shells
- M. Krupicka, D. Marx, *J. Chem. Theory Comput. (Letter)* **11** (2015) 841-846. Disfavoring mechanochemical reactions by stress-induced steric hindrance
- Md. E. Ali, V. Staemmler, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 6289-6296. Magnetostructural dynamics of Rieske versus ferredoxin iron-sulfur cofactors
- M. E. Zoloff Michoff, J. Ribas-Arino, D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 075501-1-5. Nanomechanics of bidentate thiolate ligands on gold surfaces
- C. Drechsel-Grau, D. Marx, *Nat. Phys.* **11** (2015) 216-218. Tunneling in chiral water clusters: protons in concert (invited "News and Views" Article)

- K. Morgenstern, D. Marx, M. Havenith, M. Muhler, (Guest Editors), *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (13) (2015) 8285-8540. Solvation Science (Themed Issue)
- G. Sutmann, J. Grotendorst, G. Gompper, D. Marx (Editors), Institute for Advanced Simulation and Jülich Supercomputing Centre, Forschungszentrum Jülich 2015. Computational trends in solvation and transport in liquids (vi+614 pages)
- J. Behler, *Int. J. Quantum Chem.* **115** (2015) 1032-1050. Constructing high-dimensional neural network potentials: a tutorial review
- D. Campi, D. Donadio, G. C. Sosso, J. Behler, M. Bernasconi, *J. Appl. Phys.* **117** (2015) 015304. Electron-phonon interaction and thermal boundary resistance at the crystal-amorphous interface of the phase change compound GeTe
- S. Kondati Natarajan, T. Morawietz, J. Behler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8356-8371. Representing the potential-energy surface of protonated water clusters by high-dimensional neural network potentials
- G. C. Sosso, M. Salvalaglio, J. Behler, M. Bernasconi, *J. Phys. Chem. C* **115** (2015) 6428-6434. Heterogeneous crystallization of phase change materials via atomistic simulations
- S. Gabardi, S. Caravati, G. C. Sosso, J. Behler, M. Bernasconi, *Phys. Rev. B* **92** (2015) 054201. Microscopic origin of resistance drift in the amorphous state of the phase change compound GeTe
- R. Zalesny, Guangjun Tian, Christof Hättig, Wojciech Bartkowiak, Hans Ågren, *J. Comput. Chem.*, **36** (2015) 1124-1131. Toward Assessment of Density Functional for Vibronic Coupling in Two-Photon Absorption: A Case Study of 4-Nitroaniline
- D. Hrsak, A. M. Khah, O. Christiansen, C. Hättig, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (2015) 3669-3678. Polarizable embedded RI-CC2 method for two-photon absorption. Calculations
- N. K. Graf, D. Fries, N. O. C. Winter, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **143** 244108. Excited state polarizabilities for CC2 using the resolution-of-the-identity approximation
- H. Qiu, V. Staemmler, H. Kühlenbeck, E. Bauer, H.-J. Freund, *Surf. Sci.* **641** (2015) 30-36. Weak thermal reduction of biphasic Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) films grown on Pt(111): Sub-surface Fe<sup>2+</sup> formation
- G. M. Torres, R. Frauenlob, R. Franke, A. Börner, *Catal. Sci. Tech.*, **5** (2015) 34-54. Production of alcohols via hydroformylation
- A. Kaftan, A. Schönweiz, J. Nikifondis, W. Hieringer, K. M. Dyballa, R. Franke, A. Görling, J. Libuda, P. Wasserscheid, M. Laurin, M. Haumann, *J. Catal.*, **321** (2015) 32-38. Supported homogeneous catalyst makes its own liquid phase
- S. Walter, M. Haumann, P. Wasserscheid, H. Hahn, R. Franke, *AIChE J.*, **61** (2015) 893-897. n-Butane carbonylation to n-pentanal using a cascade reaction of dehydrogenation and SILP-catalyzed hydroformylation
- P. Rollbusch, M. Bothe, M. Becker, M. Ludwig, M. Grünewald, M. Schlüter, R. Franke, *Chem. Eng. Sci.*, **126** (2015) 660-678. Bubble columns operated under industrially relevant conditions – current understanding of design parameters
- A. Dutta Chowdhury, J. Julis, K. Grabow, B. Hannebauer, U. Bentrup, M. Adam, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *ChemSusChem*, **8** (2015) 323-330. Photocatalytic acceptorless alkane dehydrogenation: scope, mechanism, and conquering deactivation with carbon dioxide
- Q. Liu, K. Yuan, P. Arockiam, R. Franke, H. Doucet, R. Jackstell, M. Beller, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54** (2015) 4493-4497. Regioselective Pd-catalyzed methoxycarbonylation of alkenes using both paraformaldehyde and methanol as CO surrogates
- R. Franke, G. Sutman, J. Grotendorst, G. Gompper, D. Marx, *Computational Trends in Solvation and Transport in Liquids*, (Eds., Schriften des Forschungszentrums Jülich, IAS Series 28, Jülich 2015) 281-311. Continuum solvation modeling of solute-solvent interaction

- P. Rollbusch, M. Becker, M. Ludwig, A. Bieberle, M. Grünwald, U. Hampel, R. Franke, *Int. J. Multiphase Flow*, **75** (2015) 88-106. Experimental investigation of the influence of column scale, gas density and liquid properties on gas holdup in bubble columns
- T. Seifert, J. M. Elischewski, S. Sievers, F. Stenger, B. Hamers, M. Priske, M. Becker, R. Franke, G. Schembecker, C. Bramsiepe, *Chem. Eng. Proc.*, **95** (2015) 124-134. Multivariate risk analysis of an intensified modular hydroformylation process
- J. Liu, Q. Liu, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *J. Am. Chem. Soc.*, **137** (2015) 8556-8563. Ligand-controlled palladium-catalyzed alkoxycarbonylation of allenes: regioselective synthesis of  $\alpha,\beta$ - and  $\beta,\gamma$ -unsaturated esters
- B. Elsler, A. Wiebe, D. Schollmeyer, K. M. Dybala, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Chem. Eur. J.*, **21** (2015) 12321-12325. Source of selectivity in oxidative cross-coupling of aryls by solvent effect of 1,1,1,3,3,3-hexafluoropropan-2-ol
- A. Behr, A. Kämper, M. Nickel, R. Franke, *Appl. Catal., A*, **505** (2015) 243-248. Crucial role of additives in iridium-catalyzed hydroformylation
- S. Fritschi, W. Korth, J. Julis, D. Kruse, H. Hahn, R. Franke, I. Fleischer, A. Dutta Chowdhury, N. Weding, R. Jackstell, M. Beller, A. Jess, *Chem. Ing. Tech.*, **87** (2015) 1313-1326. Energieeffiziente Synthese von aliphatischen Aldehyden aus Alkanen und Kohlendioxid: Valeraldehyd aus Butan und CO<sub>2</sub> – Valery
- K. Dong, R. Sang, J.-F. Soule, C. Bruneau, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Chem. Eur. J.*, **21** (2015) 12321-12325. Efficient domino hydroformylation/benzoin condensation: highly selective synthesis of  $\alpha$ -hydroxy ketones
- C. Kubis, I. Profir, I. Fleischer, W. Baumann, D. Selent, C. Fischer, A. Spannenberg, R. Ludwig, D. Hess, R. Franke, A. Börner, *Chem. Eur. J.*, **21** (2015) 12321-12325. In situ FTIR- and NMR-spectroscopic investigations on catalysts for ruthenium catalyzed alkene hydroformylation
- M. Sawall, N. Rahimdoust, C. Kubis, H. Schröder, D. Selent, D. Hess, H. Abdollahi, R. Franke, A. Börner, K. Neymeyr, *Chemometrics Intell. Lab. Sys.*, **21** (2015) 12321-12325. Soft constraints for reducing the intrinsic rotational ambiguity of the area of feasible solutions
- T. Quell, M. Mirion, D. Schollmeyer, K. M. Dybala, R. Franke, S. R. Waldvogel, *ChemistryOpen* **21** (2015) 12321-12325. Solvent-dependent facile synthesis of diaryl selenides and biphenols employing selenium dioxide
- A. Blees, K. Reichel, S. Trowitzsch, O. Fisette, C. Bock, R. Abele, G. Hummer, L. Schäfer, R. Tampé, *Sci. Rep.* **5** (2015) 17341. Assembly of the MHC I peptide-loading complex determined by a conserved ionic lock-switch
- G. Fleischmann, O. Fisette, C. Thomas, R. Wieneke, F. Tumulka, C. Schneeweiss, S. Springer, L. Schäfer, R. Tampé, *J. Immunol.* **195** (2015) 4503-4513. Mechanistic basis for epitope proofreading in the peptide-loading complex
- A. B. Kuhn, S. M. Gopal, L. Schäfer, *J. Chem. Theory Comput.* **11** (2015) 4460-4472. On using atomistic solvent layers in hybrid all-atom/coarse-grained molecular dynamics simulations
- A. Debnath, L. Schäfer, *J. Phys. Chem. B* **119** (2015) 6991-7002. Structure and dynamics of phospholipid nanodiscs from all-atom and coarse-grained simulations
- S. M. Gopal, A. B. Kuhn, L. Schäfer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** (2015) 8393-8406. Systematic evaluation of bundled SPC water for biomolecular simulations
- M. Roemelt *J. Chem. Phys.* **143** (2015) 044112. Spin orbit coupling for molecular ab initio density matrix renormalization group calculations: application to g-tensors
- A. B. Vliegthart, F. A. L. Welling, M. Roemelt, R. J. M. Klein Gebbink, M. Otte *Org. Lett.* **17** (2015) 4172-4175. Synthesis and characterization of a Brønsted pair functionalized shape-persistent macrocycle

## Awarded PhD in 2015

| Name                     | First Name           | Supervisor                   | Date       | Title                                                                                                                                                        |
|--------------------------|----------------------|------------------------------|------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Becerikli                | Ahmet Esat           | Prof. Dr. M. Muhler          | 18.12.2015 | Fundamental studies of Cu <sub>x</sub> O/TiO <sub>2</sub> photocatalysts                                                                                     |
| Dong                     | Weiwen               | Prof. Dr. M. Muhler          | 18.12.2015 | Synthesis and Characterization of Au/TiO <sub>2</sub> and Pd/CNT Catalysts and Their Applications in the Selective Oxidation of Alcohols in the Liquid Phase |
| Minero                   | Gabriel Khose Antoni | Prof. Dr. J. S. McCaskill    | 18.12.2015 | Electronically controlled DNA processing on a chip                                                                                                           |
| Shydlovskiy              | Sergii               | Prof. Dr. Ch. Herrmann       | 18.12.2015 | Biophysical Characterization of the Mechanism of Large GTP-binding Proteins                                                                                  |
| Wahsner                  | Jessica              | Prof. Dr. M. Seitz           | 18.12.2015 | Macrobicyclic Lanthanide Cryptates - Flexible Synthetical Scaffold for Innovative Applications                                                               |
| Cimiotti geb. Kindsvater | Diana                | Prof. Dr. Kornelia Jaquet    | 11.12.2015 | Restriktive Kardiomyopathie: Troponin I R170G/W und das Zusammenspiel der Sarkomerproteine                                                                   |
| Neubert                  | Susann               | Prof. Dr. R. Beránek         | 11.12.2015 | Interface Engineering of Photocatalysts for Water Decontamination and Artificial Photosynthesis of Fine Chemicals                                            |
| Wang                     | Lidong               | Prof. Dr. R. Beránek         | 11.12.2015 | Synthesis and Characterization of Hybrid Materials for Solar Water Splitting                                                                                 |
| Zimmermann               | Tobias               | Prof. Dr. F. Schüth          | 09.12.2015 | Selective Oxidation of Methane in Sulfuric Acid: Understanding and Improving Catalyst Activity, Stability, and Selectivity in the Periana System             |
| Namanga                  | Jude Eko             | Prof. Dr. A.-V. Mudring      | 07.12.2015 | Structural Modification of Light-emitting Iridium-based Ionic Transition Metal Complexes and their Uses in Light-emitting Electrochemical Cells (LECs)       |
| Berger                   | Nadja                | Prof. Dr. W. Sander          | 04.12.2015 | Conformations and Dynamics of Small Model Cyclic Tetrapeptides                                                                                               |
| Büning                   | Steffen              | Jun. Prof. Dr. S. Ebbinghaus | 04.12.2015 | Conformational Dynamics and Aggregation of Huntingtin Exon 1 in Living Cells                                                                                 |
| Grimm                    | Immanuel             | Prof. Dr. R. Erdmann         | 04.12.2015 | Einblick in den Mechanismus des Pex1p/Pex6p-AAA <sup>+</sup> -Komplexes der peroxisomalen Matrixprotein-Importmaschinerie mittels Struktur-Funktionsanalysen |
| Pougin                   | Anna                 | Prof. Dr. M. Muhler          | 04.12.2015 | Molecular Titanate and Titania as Photocatalysts in the Photocatalytic Conversion of CO <sub>2</sub> and H <sub>2</sub> O                                    |

| Name              | First Name          | Supervisor                 | Date       | Title                                                                                                                                                |
|-------------------|---------------------|----------------------------|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Zychma            | Andreas Siegmund    | Dr. A. Birkner             | 04.12.2015 | Untersuchung des Oxidationsverhaltens von orientierten Messing-Einkristallen zur Aufklärung der Bildung von Zinkoxid auf kupferähnlichen Oberflächen |
| Majchrzak         | Britta              | Prof. Dr. St. Hahn         | 02.12.2015 | miRNAs und HNPCC: Die Bedeutung des miRNA Effektor-Moleküls AGO2 beim Hereditären Non-Polypösen kolorektalen Karzinom                                |
| Anton             | Johan               | Prof. Dr. M. Muhler        | 27.11.2015 | Structure-activity relationship of Cu-Co-based catalysts applied in higher alcohol synthesis from syngas                                             |
| Jänisch           | Thorsten            | Prof. Dr. M. Muhler        | 27.11.2015 | Gasphasenacetalisierung von Formaldehyd mit Methanol zu Methylal                                                                                     |
| Rossrucker        | Lisa                | Dr. K. J. J. Mayrhofer     | 27.11.2015 | Electrochemical dissolution characteristics of Zn, Mg, Al and ZnMg(Al) alloys                                                                        |
| Ince              | Semra               | Prof. Dr. Ch. Herrmann     | 20.11.2015 | Molecular mechanism of homo and hetero interactions of human Guanylate Binding Protein isoforms                                                      |
| Athanasopoulos    | Panagiotis Sotiriou | Prof. Dr. R. Heumann       | 13.11.2015 | Investigating the Intracellular Molecular Mechanisms of Parkinson's Disease                                                                          |
| Doffek            | Christine           | Prof. Dr. M. Seitz         | 13.11.2015 | Multiphonon-Quenching in Near-Infrared Luminescent Lanthanoid Cryptates                                                                              |
| Mezzavilla        | Stefano             | Prof. Dr. F. Schüth        | 06.11.2015 | Nanostructured Catalysts for the Application in Proton Exchange Membrane Fuel Cells                                                                  |
| Düdder            | Hendrik             | Prof. Dr. M. Muhler        | 30.10.2015 | Heterogeneous catalysis at high temperatures: The kinetics of carbon combustion and dry reforming of methane                                         |
| Slizberg          | Kirill              | Prof. Dr. W. Schuhmann     | 30.10.2015 | High-throughput photoelectrochemical characterization of semiconductor thin film materials libraries                                                 |
| Bobersky          | Sandra              | Prof. Dr. N. Metzler-Nolte | 21.10.2015 | Tailoring peptide-metal bioconjugates as targeted agents to find and fight cancer                                                                    |
| Nunes de Oliveira | Heitor Fernando     | Dr. R. Rinaldi             | 13.10.2015 | Organic Solutions of Ionic Liquids and Aqueous Solutions of Electrolytes as Solvents for Cellulose Chemistry                                         |
| Tu                | Min                 | Prof. Dr. R. A. Fischer    | 08.10.2015 | Engineering Functional Metal-Organic Framework Thin Film Devices                                                                                     |
| Soldat            | Julia               | Prof. Dr. M. Wark          | 28.09.2015 | Modifizierung von heterogenen Bariumtantalat-Mischoxid-Katalysatoren zur photokatalytischen Wasserstoffproduktion und Wasserspaltung                 |
| Vimalanandan      | Ashokanand          | Dr. M. Rohwerder           | 28.09.2015 | Investigation of Redox-Responsive Coatings for Zinc Corrosion Protection                                                                             |

| Name                 | First Name    | Supervisor                  | Date       | Title                                                                                                                                                                          |
|----------------------|---------------|-----------------------------|------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Immohr               | Sarah Maria   | Prof. Dr. F. Schüth         | 25.09.2015 | Mechanokatalytische Prozesse in der Kugelmühle                                                                                                                                 |
| Pitz                 | Demian Tobias | Jun.-Prof. Dr. R. Beránek   | 25.09.2015 | Structure-Property Relationship of Luminescent Ionic Polymers: Towards new Phosphors for Lighting Applications                                                                 |
| Richter              | Mark Richard  | PD Dr. Rochus Schmid        | 14.09.2015 | Ungewöhnliche Bindungssituationen in Komplexen mit schweren Elementen                                                                                                          |
| Haering geb. Kösters | Simon Chris   | Prof. Dr. M. Hollmann       | 03.09.2015 | Identification and functional characterization of claudin subunits as new transmembrane AMPA receptor regulatory proteins                                                      |
| Kühn                 | Sandra        | PD Dr. S. Joachim           | 25.08.2015 | Zusammenhang zwischen Immunsystem und Neurodegeneration in Tiermodellen des retinalen Zelluntergangs                                                                           |
| Hoffknecht           | Barbara Caren | Prof. Dr. N. Metzler-Nolte  | 21.08.2015 | Arginine and Tryptophan rich Antimicrobial Peptides (AMP) - Influence of Multivalency, Preorganization and Metallocenes on the Antibacterial Activity                          |
| Veena Nambiar        | Pothera Veedu | Prof. Dr. R. Heumann        | 17.07.2015 | Molecular basis of Rheb mediated apoptosis                                                                                                                                     |
| Pengel               | Stefanie      | Dr. A. Erbe                 | 03.07.2015 | Anwendung eines Quantenkaskadenlasers in der zeitaufgelösten Laserabsorptionsspektroskopie zur kinetischen Untersuchung der elektrochemischen Sauerstoffreduktion an Germanium |
| Steff                | Henning       | Prof. Dr. K. Sommer         | 01.07.2015 | Untersuchungen über Modellexperimente des Chemieunterrichts - dargestellt am Beispiel der Mehlstaubexplosion                                                                   |
| Morawietz            | Tobias        | Dr. J. Behler               | 26.06.2015 | Efficient Simulations of Water with <i>Ab Initio</i> Accuracy: Development of High-Dimensional Neural Network Potentials for Water Clusters and Bulk Water                     |
| Bravo-Rodriguez      | Kenny         | Dr. E. Sánchez-García       | 19.06.2015 | Regulation of protein properties by small molecules and computational mutagenesis                                                                                              |
| Decka                | Dominique     | Prof. Dr. M. Havenith-Newen | 19.06.2015 | Terahertz-Spektroskopie von Ionen und Molekülen in wässriger Lösung                                                                                                            |
| Chen                 | Jing          | Prof. Dr. Katrin Marcus     | 12.06.2015 | Molecularly Imprinted Polymers for the Analysis of Protein Phosphorylation and the Role of HtrA2/Omi Protein in Parkinson's Disease                                            |
| Fan                  | Mu            | Dr. F. La Mantia            | 12.06.2015 | Characterization of Instability Phenomena during the Anodization of Titanium                                                                                                   |

| Name          | First Name         | Supervisor                     | Date       | Title                                                                                                                                                                                                                                     |
|---------------|--------------------|--------------------------------|------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Zampardi      | Giorgia            | Prof. Dr. W. Schuhmann         | 12.06.2015 | <i>In-situ</i> Analysis of Surface and Bulk Phenomena in Lithium-ion Batteries by means of Scanning Electrochemical Microscopy                                                                                                            |
| Tymoczko      | Jakub              | Prof. Dr. W. Schuhmann         | 08.06.2015 | Engineering of model electrocatalysts for energy conversion and storage                                                                                                                                                                   |
| Fischer       | Andreas            | Prof. Dr. W. Sander            | 22.05.2015 | Development of a molecular beam mass spectrometer and a supersonic jet expansion pyrolyzer for the characterization of reactive organic intermediates                                                                                     |
| Brinkmann     | Swaantje           | Prof. Dr. Ch. Herrmann         | 08.05.2015 | Molekularer Mechanismus der Homo- und Heterodimerisierung von der MST1-Kinase und des Nore1A-Effektorproteins                                                                                                                             |
| Günnewig      | Kathrin            | Prof. Dr. J. Rassow            | 08.05.2015 | Funktion der Matrixschleifen des ADP/ATP-Translokators in mitochondrialer Zielerkennung und Membraninsertion                                                                                                                              |
| Maschke       | Marcus             | Prof. Dr. N. Metzler-Nolte     | 17.04.2015 | Metallocene mit CF <sub>3</sub> -haltigen Substituenten: Synthese, Struktur-Wirkungsbeziehung und Biokonjugation                                                                                                                          |
| Laska         | Claudius Alexander | Dr. K.J.J. Mayrhofer           | 27.03.2015 | Development of a Scanning Flow Cell system with dynamic electrolyte change for fully automated parameter screening - the corrosion of zinc in various electrolytes                                                                        |
| Hilgert       | Jakob              | Prof. Dr. F. Schüth            | 19.03.2015 | Mechanocatalytic depolymerization of cellulose and subsequent hydrogenation                                                                                                                                                               |
| Albrecht      | Jan                | Prof. Dr. J. Rassow            | 26.02.2015 | Pathobiochemische Funktionen der p33-Untereinheit des vakuolisierenden Zytotoxins VacA von <i>Helicobacter pylori</i>                                                                                                                     |
| Stefanski     | Anja               | Prof. Dr. Helmut E. Meyer      | 06.02.2015 | Proteomanalytische Charakterisierung des Glioblastoms im Hinblick auf das Langzeitüberleben                                                                                                                                               |
| Tripathi      | Vishwadeepak       | PD Dr. Wolfgang M. J. Obermann | 06.02.2015 | Characterization of Hsp90 activator Aha1 as an autonomous Chaperone                                                                                                                                                                       |
| Ertelt        | Melanie Inga       | Prof. Dr. W. Sander            | 30.01.2015 | Untersuchung von quantenmechanischem Schweratomtunneln in chemischen Reaktionen und Charakterisierung reaktiver Intermediate mittels Matrixisolation und die Synthese eines Bausteins zur Darstellung von von monodeutertem Semibullvalen |
| Vivekananthan | Jeevanthi          | Prof. Dr. W. Schuhmann         | 30.01.2015 | Microstructured Electrodes for Fuel Cell Applications                                                                                                                                                                                     |