

Research 2016

Faculty of Chemistry
and Biochemistry

Ruhr-Universität
Bochum

RUHR
UNIVERSITÄT
BOCHUM

RUB

Forschung 2016

Fakultät für Chemie
und Biochemie

Ruhr-Universität
Bochum

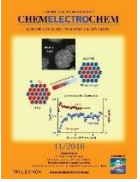
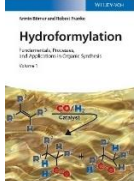
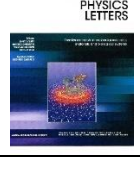


Table of contents

Journal Covers.....	4
Preface.....	5
Analytical Chemistry – Analytische Chemie	7
Wolfgang Schuhmann	7
Axel Rosenhahn	8
Kristina Tschulik	9
Nicolas Plumeré	10
Inorganic Chemistry I – Anorganische Chemie I.....	11
Nils Metzler-Nolte.....	11
Ulf-Peter Apfel.....	12
Inorganic Chemistry II – Anorganische Chemie II.....	13
Viktoria Däschlein-Gessner	13
Anjana Devi.....	14
Rochus Schmid.....	15
Biochemistry I – Biochemie I	16
Michael Hollmann.....	16
Biochemistry II – Biochemie II.....	17
Thomas Günther-Pomorski	17
Rolf Heumann	18
Raphael Stoll	19
EPR Spectroscopy – EPR-Spektroskopie	20
Enrica Bordignon	20
Organic Chemistry I – Organische Chemie I.....	21
Lukas J. Gooßen.....	21
John S. McCaskill	22
Stefan M. Huber	23
Frank Schulz.....	24
Organic Chemistry II – Organische Chemie II	25
Wolfram Sander	25
Christian Merten.....	26
Physical Chemistry I – Physikalische Chemie I.....	27
Karina Morgenstern.....	27

Christian Herrmann	28
Physical Chemistry II – Physikalische Chemie II	29
Martina Havenith.....	29
Patrick Nuernberger	30
Simon Ebbinghaus.....	31
Industrial Chemistry – Technische Chemie	32
Martin Muhler	32
Wolfgang Grünert	33
Theoretical Chemistry – Theoretische Chemie	34
Dominik Marx	34
Christof Hättig.....	35
Lars Schäfer.....	36
Jörg Behler	37
Michael Roemelt	38
Robert Franke	39
Didactics of Chemistry – Didaktik der Chemie	40
Katrin Sommer	40
List of publications in 2016.....	41
Analytical Chemistry – Analytische Chemie	41
Inorganic Chemistry I – Anorganische Chemie I.....	45
Inorganic Chemistry II – Anorganische Chemie II	47
Biochemistry I – Biochemie I	48
Biochemistry II – Biochemie II.....	48
EPR Spectroscopy – EPR-Spektroskopie	49
Organic Chemistry I – Organische Chemie I.....	50
Organic Chemistry II – Organische Chemie II	51
Physical Chemistry I – Physikalische Chemie I.....	51
Physical Chemistry II – Physikalische Chemie II.....	52
Industrial Chemistry – Technische Chemie	54
Theoretical Chemistry – Theoretische Chemie	56
Didactics of Chemistry – Didaktik der Chemie	59
Awarded PhD in 2016	60

Journal Covers

	Estrada-Vargas, A.; Jambrec, D.; Kayran, Y. U.; Kuznetsov, V.; Schuhmann, W. Differentiation between Single- and Double-Stranded DNA through Local Capacitance Measurements. <i>ChemElectroChem</i> 2016 , 3 (6), 855–857.		Senske, M.; Constantinescu-Aruxandei, D.; Havenith, M.; Herrmann, C.; Weingärtner, H.; Ebbinghaus, S. The Temperature Dependence of the Hofmeister Series: Thermodynamic Fingerprints of Cosolute–protein Interactions. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 2016 , 18 (43), 29698–29708.
	Reinsdorf, A.; Korth, W.; Jess, A.; Terock, M.; Klasovsky, F.; Franke, R. Insights into Deactivation and Regeneration of an Industrial Cu/Ni/Cr-Al ₂ O ₃ Catalyst During Aldehyde Hydrogenation. <i>ChemCatChem</i> 2016 , 8 (23), 3592–3599.		Petrova, O.; Kulp, C.; Pohl, M.-M.; ter Veen, R.; Veith, L.; Grehl, T.; van den Berg, M. W. E.; Brongersma, H.; Bron, M.; Grünert, W. Chemical Leaching of Pt-Cu/C Catalysts for Electrochemical Oxygen Reduction: Activity, Particle Structure, and Relation to Electrochemical Leaching. <i>ChemElectroChem</i> 2016 , 3 (11), 1768–1780.
	Loy, N. S. Y.; Choi, S.; Kim, S.; Park, C.-M. The Synthesis of Pyrroles and Oxazoles Based on Gold α -Imino Carbene Complexes. <i>Chem. Commun.</i> 2016 , 52 (46), 7336–7339.		Luong, T. Q.; Xu, Y.; Bründermann, E.; Leitner, D. M.; Havenith, M. Hydrophobic Collapse Induces Changes in the Collective Protein and Hydration Low Frequency Modes. <i>Chemical Physics Letters</i> 2016 , 651, 1–7.
	Wiebe, A.; Schollmeyer, D.; Dyballa, K. M.; Franke, R.; Waldvogel, S. R. Selektive Synthese Teilgeschützter Unsymmetrischer Biphenole Durch Reagens- Und Metallfreie Anodische Kreuzkupplung. <i>Angewandte Chemie</i> 2016 , 128 (39), 11979–11983.		Börner, A.; Franke, R. Hydroformylation: Fundamentals, Processes, and Applications in Organic Synthesis, 1. Auflage.; Wiley-VCH: Weinheim, 2016.
	Henkel, S.; Pollok, C. H.; Schleif, T.; Sander, W. Azulenylcarbenes: Rearrangements on the C ₁₁ H ₈ Potential Energy Surface. <i>Chemistry - A European Journal</i> 2016 , 22 (35), 12479–12486.		Albada, B.; Metzler-Nolte, N. Organometallic–Peptide Bioconjugates: Synthetic Strategies and Medicinal Applications. <i>Chemical Reviews</i> 2016 , 116 (19), 11797–11839.
	Kuznetsov, V.; Estrada-Vargas, A.; Maljusch, A.; Berkes, B. B.; Bandarenka, A. S.; Souto, R. M.; Schuhmann, W. Kinetic Passivation Effect of Localized Differential Aeration on Brass. <i>ChemPlusChem</i> 2016 , 81 (1), 49–57.		Sokol, K. P.; Mersch, D.; Hartmann, V.; Zhang, J. Z.; Nowaczyk, M. M.; Rögnér, M.; Ruff, A.; Schuhmann, W.; Plumeré, N.; Reisner, E. Rational Wiring of Photosystem II to Hierarchical Indium Tin Oxide Electrodes Using Redox Polymers. <i>Energy Environ. Sci.</i> 2016 , 9 (12), 3698–3709.
	Molitor, S.; Gessner, V. H. Alkali Metal Carbenoids: A Case of Higher Stability of the Heavier Congeners. <i>Angewandte Chemie International Edition</i> 2016 , 55 (27), 7712–7716.		Matheis, C.; Wagner, V.; Gooßen, L. J. Sandmeyer-Type Trifluoromethylthiolation and Trifluoromethylselenolation of (Hetero)Aromatic Amines Catalyzed by Copper. <i>Chemistry - A European Journal</i> 2016 , 22 (1), 79–82.
	Xu, Y.; Bäumer, A.; Meister, K.; Bischak, C. G.; DeVries, A. L.; Leitner, D. M.; Havenith, M. Protein-water Dynamics in Antifreeze Protein III Activity. <i>Chemical Physics Letters</i> 2016 , 647, 1–6.		

Preface

Another year has passed, in which the scientific work groups at the Faculty of Chemistry and Biochemistry of the Ruhr-Universität Bochum have again accomplished a lot. This report highlights the diversity of research performed in the year 2016.

In this year, the report has been organized again by the participants of the internship "Introduction to the Scientific Community" (ITSC). Master students have been in contact with the principle investigators of the faculty, collecting the highlights and assembling them to this report. This was a valuable experience for all students involved within this project, initiating knowledge exchange between students and researchers. In addition, it 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 provided in the research highlights. Or you just visit the website of our faculty at www.chemie.rub.de.

We hope you enjoy the reading.

With the best wishes,

Faculty Report Team of the ITSC internship 2016/17

Ilja Rodstein

Martin Wilken

Nils Boysen

Patrick Marx

Daniel Obitz



Dear Reader /

sehr geehrte Leserin und Leser,

I am proud to present you the 2016 Edition of the *Research Report* of our Faculty. As in previous years, this report has been compiled and edited by Master students of our Faculty as part of their introductory training course “*Introduction to the Scientific Community*”. My warmest thanks to them and all other contributors to this project!

The report highlights the many achievements of members of our Faculty. You can read about the latest research results of the individual research groups, but you also get an impression about the total research output by browsing through the 15+ pages of publications from our Faculty members at the end of this report. Finally, it is people, not papers or numbers that make the difference, and you can therefore find the names of all 81 of our 2016 PhD graduates as well as the topics of their theses in this report. It is an amazing variety, which nicely mirrors the diversity of the research topics described before in this report.

I hope you enjoy reading!

Ich freue mich, Ihnen hiermit die Ausgabe 2016 des *Forschungsberichts* unserer Fakultät präsentieren zu dürfen. Der Bericht ist wie schon in den vorigen Jahren von Studierenden unserer Masterstudiengänge im Rahmen des Praktikums „*Introduction to the Scientific Community*“ zusammengestellt und editiert worden. Allen Beteiligten ganz herzlichen Dank dafür!

Dieser Report berichtet über die Vielfalt der Leistungen der Wissenschaftler unserer Fakultät. Sie können sich über ausgewählte Publikationen der einzelnen Arbeitsgruppen informieren, oder sich einfach von den mehr als 15 Seiten Gesamt-Publikationsverzeichnis beeindrucken lassen. Schließlich geht es in der Arbeit von Universitäten vor allem um Personen, und so geben die Namen aller 81 Doktorandinnen und Doktoranden, die im Jahr 2016 erfolgreich promoviert haben, am Ende dieses Berichts ein lebendiges Bild zur Vielfalt der Forschungsthemen unserer Fakultät.

Genießen Sie die Lektüre!

N. Metzler-Nolte

Nils Metzler-Nolte

Dekan der Fakultät / Dean of the Facul

Analytical Chemistry – Analytische Chemie

Wolfgang Schuhmann

Chair of Analytic Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

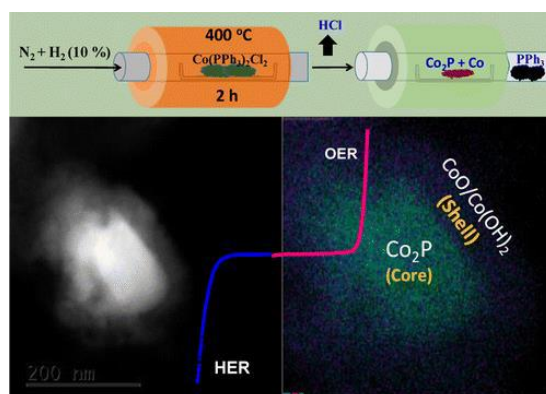
Tel.: 0049 234 3226200; Fax.: 0049 234 3214683

Email: wolfgang.schuhmann@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/elan/>

J. Masa, S. Barwe, C. Andronesco, I. Sinev, A. Ruff, K. Jayaramulu, K. Elumeeva, B. Konkena, B. R. Cuenya, W. Schuhmann, *ACS Energy Lett.*, 2016, 1 (6), 1192–1198.

Low Overpotential Water Splitting Using Cobalt–Cobalt Phosphide Nanoparticles Supported on Nickel Foam

In this work, a low-cost catalyst for splitting water into hydrogen and oxygen was reported. The catalyst, comprised of mixture of cobalt and cobalt phosphide nanoparticles drives both the hydrogen evolution reaction and the oxygen evolution reaction at very low overpotentials in an alkaline electrolyte. When this catalyst was supported on nickel foam, it attained a current density of 50 mA cm⁻² during oxygen evolution at an overpotential of only 0.19 V in 1.0 M KOH, placing it among the most efficient catalysts for electrochemical water splitting. This study is therefore of significance because it raises the hope reducing the energy consumption during power-to-gas conversion which is a bottleneck for wider spread implementation of power to hydrogen energy conversion.



Scheme showing the synthesis of a cobalt phosphide catalyst, and a depiction of the active state of the cobalt phosphide catalyst under oxygen evolution conditions.

In der hier vorgestellten Arbeit ging es um einen günstigen Katalysator für die Wasserspaltung. Dieser besteht aus einer Mischung aus Kobalt- und Kobaltoxidnanopartikeln, welche sowohl die Entstehung von Wasserstoff als auch von Sauerstoff sehr effektiv bei niedrigen Überspannungen katalysiert. In Kombination mit Nickel wurde in 0,1 M KOH eine Ladungsdichte von 50 mA cm⁻² bei einer Überspannung von nur 0,19 V erreicht. Dies sind mit die besten Werte, die bisher für Katalysatoren dieser Reaktion erreicht wurden. Durch diese Katalysatoren könnten die Energieverluste, die bisher bei der power-to-gas Umwandlung auftreten, erheblich reduziert werden, was eine größere Nutzung von Wasserstoff als Energiespeicher in Zeiten von Erneuerbaren Energiequellen ermöglichen würde.

Axel Rosenhahn

Analytical Chemistry – Biointerfaces

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

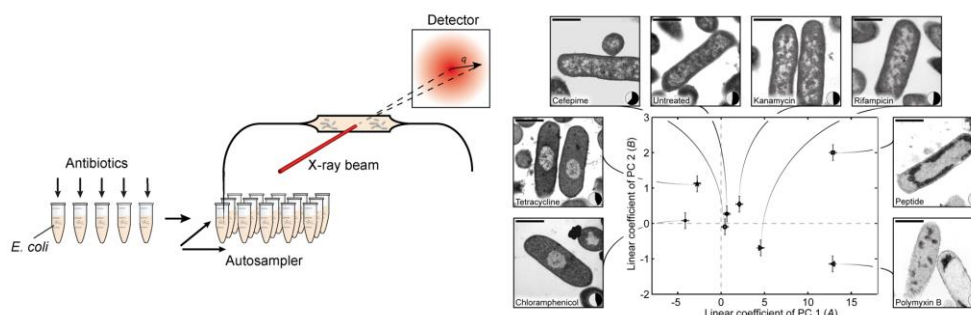
Tel.: +49-234-3224200; FAX +49-234-3214420

email: axel.rosenhahn@rub.de; www.rub.de/biointerfaces

A.R. von Gundlach, V.M. Garamus, T. Gorniak, H.A. Davies, M. Reischl, R. Mikut, K. Hilpert, A. Rosenhahn, *Biochimica et Biophysica Acta* 2016, 1858(5), 918

Small angle X-ray Scattering as a high-throughput method to classify antimicrobial modes of action

Multi-drug resistant bacteria are currently undermining the worldwide health care system. While novel antimicrobial drugs, such as antimicrobial peptides, are urgently needed, identification of new modes of action is money and time consuming. Even worse, tests are not available in a high throughput manner. We explored how small angle X-ray scattering (SAXS) as high throughput method can contribute to classify the mode of action of antimicrobial compounds. The key finding is that SAXS as a structure sensitive tool provides a rapid feedback on drug induced ultrastructural alterations in whole *E. coli* cells. We could show that different antibiotics with known modes of action can be distinguished using a PCA analysis of the data. The great advantage of SAXS is that it contains statistically relevant information averaged over millions of cells. The measurement takes only seconds, while conventional tests to identify a mode of action require days or weeks per single substance. We envision SAXS to become a useful tool within the high-throughput screening pipeline of modern drug discovery.



High throughput SAXS analysis of bacteria and principle component analysis to analyze morphological consequences of antimicrobial treatment

Multiresistente Bakterien sind eine große Gefahr für das weltweite Gesundheitssystem. Obwohl neue Medikamente dringend notwendig sind, ist ihre Entdeckung aufwändig und teuer. Vor allem sind die etablierten Tests nicht mit hohem Durchsatz möglich. Wir haben untersucht, in wie weit Röntgenkleinwinkelstreuung (SAXS) einen Beitrag zur Klassifizierung des Wirkmechanismus von antimikrobiellen Substanzen leisten kann. Wir konnten zeigen, dass SAXS eine geeignete Methode ist um schnell Informationen über Strukturveränderungen in ganzen *E. coli* Zellen zu erhalten. Die Wirkmechanismen von verschiedenen etablierten Antibiotika mit unterschiedlichen Wirkmechanismen konnten mittels PCA Analyse unterschieden werden. Der große Vorteil von SAXS ist die statistische Relevanz der erhaltenen Informationen, die über viele Millionen Zellen gemittelt wurde. Die Methode benötigt nur Sekunden während konventionelle Tests um Wirkmechanismen zu identifizieren Tage oder Wochen pro Substanz benötigen. SAXS wird in Zukunft ein nützliches Tool in der Hochdurchsatzanalyse von antimikrobiellen Wirkstoffen werden.

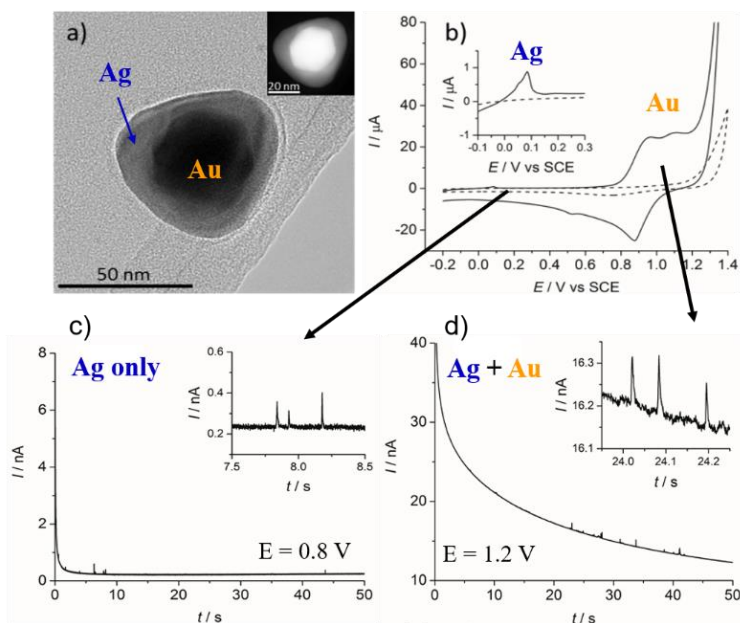
L. R. Holt, B. J. Plowman, N. P. Young, K. Tschulik, R. G. Compton, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2016, 55, 397–400.

The Electrochemical Characterization of Single Core–Shell Nanoparticles

In recent years, single nanoparticle electrochemistry has been introduced as a tool to characterize individual metallic and metal oxide nanoparticles based on the charge passed during their Brownian motion-based stochastic impact at a microelectrode. It was reported that their size, concentration, and agglomeration state can conveniently be determined by this approach. In this paper we report the direct electrochemical solution-phase characterization of individual gold core silver shell nanoparticles. Selectivity between the core and shell components is achieved based on their different redox activities in the used electrolyte. First the shell thickness is probed at a potential that enables selective oxidation of the silver, revealing the silver oxidation charge and hence the amount of silver contained in the particle

shell. Then, applying a higher potential to oxidize both the core and shell and subtracting the previously determined silver charge, the amount of gold contained in the core are determined.

The electrochemically determined core–shell sizes are in excellent agreement with transmission electron microscopy (TEM) based results. Thus we successfully demonstrate the electrochemical characterization of individual core–shell nanoparticles, yielding both the thickness of the shell and the size of the core.



a) TEM and EDX (inlay) analysis of Au core Ag shell nanoparticles, b) electrochemical ensemble response of multiple nanoparticles and chronoamperograms showing single nanoparticle oxidation spikes of c) the shell and d) the entire particle.

Elektrochemische Untersuchungen an einzelnen Nanopartikeln gestatten es deren Größe, Agglomerationsverhalten und Konzentration zu bestimmen. Diese Methode basiert auf dem zufälligen Einschlag solcher suspensierter Partikel an einer Elektrode unter Anlegen einer definierten Spannung. Hier zeigen wir, dass diese Methode es gestattet Kern-Schale Partikel zu charakterisieren. Auf Basis der unterschiedlichen Redoxaktivität des Kern- und Schalenmaterials demonstrieren wir für Au Kern, Ag Schale Nanopartikel, dass damit sowohl die Schalendicke, als auch der Kerndurchmesser für einzelne Nanopartikel bestimmt werden können. Die erhaltenen Daten wurden anhand von TEM Analysen validiert, wodurch die Anwendbarkeit dieser generellen, schnellen und kostengünstigen neuen Messmethode nachgewiesen werden konnte.

Nicolas Plumeré

Anal. Chem. – Center for Electrochemical Sciences; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3229434; FAX: ++49-(0)234- 32 14420
email: nicolas.plumere@rub.de

K P Sokol, D Mersch, V Hartmann, J Z Zhang, M M Nowaczyk, M Rögner, A Ruff, W Schuhmann, N Plumeré, E Reisner *Energy Environ. Sci.*, **9** (2016) 3698-3709.

Rational wiring of photosystem II to hierarchical indium tin oxide electrodes using redox polymers.



Photosystem II (PSII) is a multi-subunit enzyme responsible for solar-driven water oxidation to release O₂ and highly reducing electrons during photosynthesis. The study of PSII in protein film photoelectrochemistry sheds light into its biological function and provides a blueprint for artificial water-splitting systems. However, the integration of macromolecules, such as PSII, into hybrid bio-electrodes is often plagued by poor electrical wiring between the protein guest and the material host. Here, we report a new benchmark PSII–electrode system that combines the efficient wiring afforded by redox-active polymers with the high loading provided by hierarchically-structured inverse opal indium tin oxide (IO-ITO) electrodes. Compared to flat electrodes, the hierarchical IO-ITO electrodes enabled up to an

approximately 50-fold increase in the immobilisation of an Os complex-modified and a phenothiazine-modified polymer. When the Os complex-modified polymer is co-adsorbed with PSII on the hierarchical electrodes, photocurrent densities of up to $\sim 410 \mu\text{A cm}^{-2}$ at 0.5 V vs. SHE were observed in the absence of diffusional mediators, demonstrating a substantially improved wiring of PSII to the IO-ITO electrode with the redox polymer. The high photocurrent density allowed for the quantification of O₂ evolution, and a Faradaic efficiency of $85 \pm 9\%$ was measured. As such, we have demonstrated a high performing and fully integrated host–guest system with excellent electronic wiring and loading capacity. This assembly strategy may form the basis of all-integrated electrode designs for a wide range of biological and synthetic catalysts.

Inorganic Chemistry I – Anorganische Chemie I

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Nils.Metzler-Nolte@rub.de; <http://www.chemie.rub.de/ac1/>

H. B. Albada, Nils Metzler-Nolte, *Chem. Rev.* **116** (2016) 11797 – 11839.

Organometallic–Peptide Bioconjugates: Synthetic Strategies and Medicinal Applications



Peptides are important biological molecular entities in biomedical research. They can be readily prepared in a large variety of shapes, with a host of chemical functions, and tailored for specific applications. Organometallic medicinal chemistry is a relatively young field that explores biomedical and bioanalytical applications of organometallic complexes, that is, metal compounds with at least one direct, covalent metal–carbon bond. The conjugation of peptides to such medicinally active organometallic moieties started only about 20 years ago, and it was pioneered in large part in the Metzler-Nolte group. The development of metal-peptide conjugates has been very beneficial for the development of bioorganometallic

chemistry in general. Similarly, the biomedical properties of peptides have been altered by their conjugation to organometallic (OM) moieties. In this review, synthetic methods by which OM moieties can be conjugated to peptides via a carbon–metal bond are described, and selected medicinal applications of such conjugates are discussed.

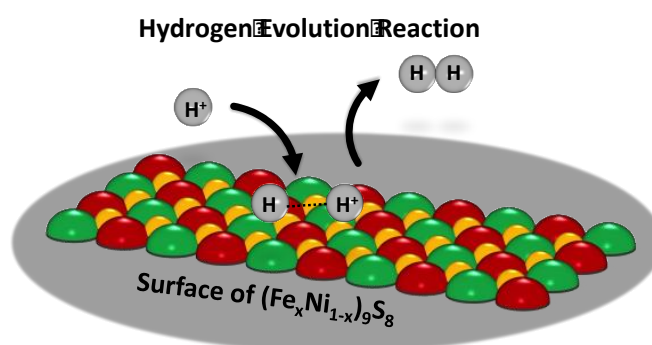
Peptide haben eine enorme Bedeutung für die biomedizinische Forschung. Sie können leicht in einer Vielzahl von verschiedenen Varianten hergestellt werden, und können mit den verschiedensten Funktionalitäten ausgestattet werden, um spezifischen Anwendungen zu genügen. Die medizinische Organometallchemie ist ein relativ junges Forschungsfeld, welches die biomedizinische und bioanalytische Anwendung von Organometallverbindungen untersucht. Als Organometallverbindungen werden solche Verbindungen definiert, die mindestens eine direkte, kovalente Metall-Kohlenstoffbindung haben. Die Synthese und Untersuchung von Konjugaten aus Peptiden und Organometallverbindungen begann erst vor etwa 20 Jahren und wurde maßgeblich durch die Arbeiten aus der Gruppe Metzler-Nolte vorangetrieben. Die Entwicklung von Metall-Peptid-Biokonjugaten hat die Bioorganometallchemie insgesamt befruchtet. Andererseits stellt sich auch heraus, daß die biomedizinischen Eigenschaften von Peptiden durch die Konjugation mit Organometallverbindungen entscheidend modifiziert werden können. In diesem Übersichtsartikel beschreiben wir, mit welchen Synthesemethoden Organometallverbindungen durch Metall-Kohlenstoffbindungen an Peptide gebunden werden können, und gehen auf einige ausgewählte Anwendungen solcher Biokonjugate ein.

Ulf-Peter Apfel

Inorganic Chemistry I – Bioinorganic Chemistry
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3224187; Fax.: ++49-(0)234-3214378
Email: ulf.apfel@rub.de; www.rub.de/smallmolecules

B. Konkena, K. Junge Puring, O. Khavryuchenko, I. Sinev, S. Piontek, M. Muhler, W. Schuhmann, U.-P. Apfel, *Nature Commun.* **2016**, 7:12269, DOI: 10.1038/ncomms12269.
Pentlandite Rocks as Highly Efficient, Sustainable and Stable Electrocatalysts for H₂ Generation.

The need for sustainable catalysts for an efficient hydrogen evolution reaction is of significant interest for modern society. Inspired by comparable structural properties of [FeNi]-hydrogenase, here we present the natural ore pentlandite (Fe_{4.5}Ni_{4.5}S₈) as a direct ‘rock’ electrode material for hydrogen evolution under acidic conditions with an overpotential of 280 mV at 10 mA cm⁻². Furthermore, it reaches a value as low as 190 mV after 96 h of electrolysis due to surface sulfur depletion, which may change the electronic structure of the catalytically active nickel–iron centres. The ‘rock’ material shows an unexpected catalytic activity with comparable overpotential and Tafel slope to some well-developed metallic or nanostructured catalysts. Notably, the ‘rock’ material offers high current densities (~ 650 mA cm⁻²) without any loss in activity for approximately 170 h. The superior hydrogen evolution performance of pentlandites as ‘rock’ electrode labels this ore as a promising electrocatalyst for future hydrogen-based economy.



Hydrogen evolution reaction on NiFe-sulfides as ‘rock electrocatalysts’.

Die effiziente Reduktion von Wasser zu Wasserstoff unter milden Bedingungen und ohne den Einsatz von teuren Edelmetallen ist ein erstrebenswertes Ziel für eine zukunftsweisende und nachhaltige Energiespeicherung. Zudem besitzt der gewonnene Wasserstoff die höchste Energiedichte aller kommerziellen Brennstoffe und erzeugt als Abfallprodukt lediglich Wasser. Während nur wenige effektive nicht-edelmetallhaltige Materialien für diesen Zweck bekannt sind, betreiben Enzyme und die [FeNi]-Hydrogenasen diese Umwandlung höchst effizient. Diese Enzyme sind mit einem Eisen-Nickel-Schwefel Zentrum ausgestattet. Überraschenderweise besitzt das Mineral Pentlandit einen mit dem Enzym vergleichbaren molekularen Aufbau und kann als günstiger, robuster und hoch effizienter Elektrokatalysator für die Protonenreduktion eingesetzt werden.

Inorganic Chemistry II – Anorganische Chemie II

Viktoria Däschlein-Gessner

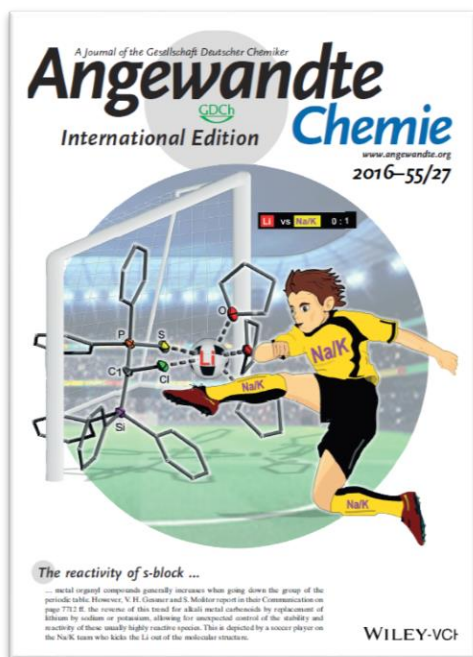
Chair of Inorganic Chemistry II – Organometallic Chemistry
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

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

Email: viktoria.daeschlein-gessner@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac2/>

S. Molitor, V. H. Gessner, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 128, 7843-7847.

Alkali Metal Carbenoids: A Case of Higher Stability of the Heavier Congeners.



Due to their ambiphilic nature alkali metal carbenoids are unique organometallic reagents which exhibit a versatile reactivity pattern. However, broad applications in synthetic chemistry are still extremely limited owing to the high reactivity and thermal instability of these compounds. In order to develop new applications of carbenoids a control of their stability and reactivity is required. Surprisingly, we found that such a stabilization can be achieved by replacement of lithium with its heavier congeners, sodium or potassium. This observation contrasts the typical trend in stabilities in the periodic table, but can be explained by the different strengths of the metal-carbon and metal-halogen interactions in the structure of the carbenoids. This leads – depending on the metal – to a hampered metal salt elimination and thus in a higher stability in case of the heavier metals. Using this

stabilization effect, we could generate readily isolable reagents, which showed higher selectivities in carbene transfer reactions compared to the lithium systems. The stability and selectivity could further be manipulated by employment of additional Lewis bases, thus demonstrating the tunability of carbenoid reactivity.

Alkalimetallcarbenoide sind aufgrund ihres ambiphilen Charakters äußerst außergewöhnliche metallorganische Reagenzien, die eine facettenreiche Reaktivitätsvielfalt aufweisen. Nichtsdestotrotz sind synthetische Anwendungen aufgrund ihrer hohen Reaktivität und thermischen Instabilität noch immer stark limitiert. Um neuer Anwendungsgebiete für Carbenoide zu eröffnen, ist daher eine gezielte Kontrolle ihrer Stabilität und Reaktivität erforderlich. Überraschenderweise konnten wir nun zeigen, dass eine derartige Stabilisierung durch Austausch von Lithium mit seinen schwereren Homologen, Na oder K, gelingt. Diese Beobachtung widerspricht dem typischen Trend in den Stabilitäten von Metallorganylen im Periodensystem. Ursache hierfür sind die unterschiedlich stark ausgeprägten Metall–Kohlenstoff- und Metall–Halogen-Wechselwirkungen in den verschiedenen Alkalimetallverbindungen, was eine erschwerte Metallsalzeliminierung und damit eine höhere Stabilität im Falle der schwereren Homologen zur Folge hat. Mit Hilfe dieser Stabilisierung gelang es uns einfach zu isolierende Reagenzien aufzubauen, die sich als deutlich selektiver in Carben-transferreaktionen erwiesen als ihre leichteren Lithiumverbindungen. Eine weitere Stabilitäts- und Selektivitätskontrolle konnte durch Einsatz zusätzlicher Lewis-Basen erreicht werden, was die Kontrollierbarkeit der Reaktivität von Carbenoiden untermauert.

Anjana Devi

AG Chemie Anorganischer Materialien; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

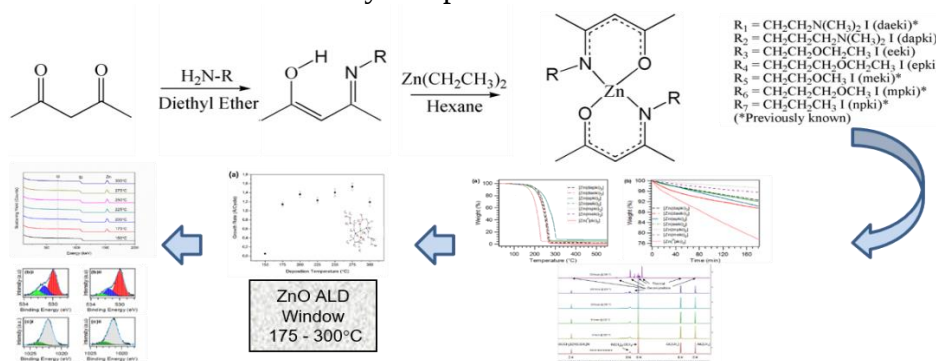
Tel.: ++49-(0)234-3224150; FAX: ++49-(0)234-3214174

Email: anjana.devi@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2/devi/>

R. O'Donoghue, D. Peeters, D. Rogalla, H-W. Becker, J. Rechmann, S. Henke, M. Winter
and A. Devi, *Dalton Trans.* 2016, 45, 19012-19023

Systematic molecular engineering of Zn-ketoiminates for application as precursors in atomic layer depositions of zinc oxide

This work showcases the synthesis of closely related zinc ketoiminate compounds which were evaluated in terms of their precursor properties for atomic layer deposition (ALD). The complexes were engineered at the molecular level to determine the influence of the functional groups at the imine side chain of the ligands in order to deduce their effect upon the volatility, reactivity and thermal stability of the complexes. Through extensive investigation and analysis, it was determined that the smallest alteration to the ligand skeleton resulted in profound effects on the physico-chemical properties. The compound $[\text{Zn}(\text{eeki})_2]$ was selected as the most promising in terms of thermal properties and was implemented in a water assisted thermal ALD process where it demonstrated self-saturating behavior for the growth of zinc oxide (ZnO) from 175-300 °C. This is the first stable high temperature ALD process (above 200 °C) to return highly promising growth rates. This precursor extends the library of known zinc precursors for ALD and provides a solution to the known at high temperature inconsistency of diethyl zinc, the standard precursor for ALD of ZnO. It also allows for a greater choice of potential organic co-reactant molecules for molecular layer depositions.



In dieser Arbeit wird die Synthese der eng miteinander verwandten Zink-ketoiminatverbindungen präsentiert, die im Bezug auf ihre Prekursoreigenschaften für die Atomlagenabscheidung (ALD) untersucht wurden. Diese Metallkomplexe wurden auf molekularer Ebene entwickelt und den Einfluss der funktionellen Gruppen an den Imin Seitenketten auf den Liganden um deren Effekt auf die Verdampfbarkeit, Reaktivität und thermische Stabilität des Komplexes abzuleiten. Durch intensive Studien und Analytik konnte gezeigt werden, dass kleinste Änderungen der Ligandensphere großen Einfluss auf die physiochemischen Eigenschaften haben. Die Verbindung $[\text{Zn}(\text{eeki})_2]$ wurde aufgrund ihrer vielversprechenden thermischen Eigenschaften ausgewählt und in einen wassergestützten thermischen ALD Prozess eingesetzt bei dem selbstlimitiertes Zinkoxidwachstum zwischen 175-300 °C nachgewiesen werden konnte. Es handelt sich hierbei um den ersten stabilen Hochtemperatur-ALD Prozess (>200 °C) mit vielversprechenden Wachstumsraten. Diese Verbindung erweitert das Spektrum der Zinkprecursoren für ALD und erlaubt die Verwendung hoher Prozesstemperaturen im Gegensatz zu Diethylzink, dem Standard-ALD Prekursor für ALD von ZnO. Desweiteren erlaubt die thermische Stabilität dieser Verbindung den potentiellen Einsatz anderer organischer Co-Reaktanten für Molekularlagenabscheidung.

Rochus Schmid

Chair of Inorganic Chemistry II – Computational Materials Chemistry Group

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-32 24166 Email: rochus.schmid@ruhr-uni-bochum.de;

<http://www.rochusschmid.de>

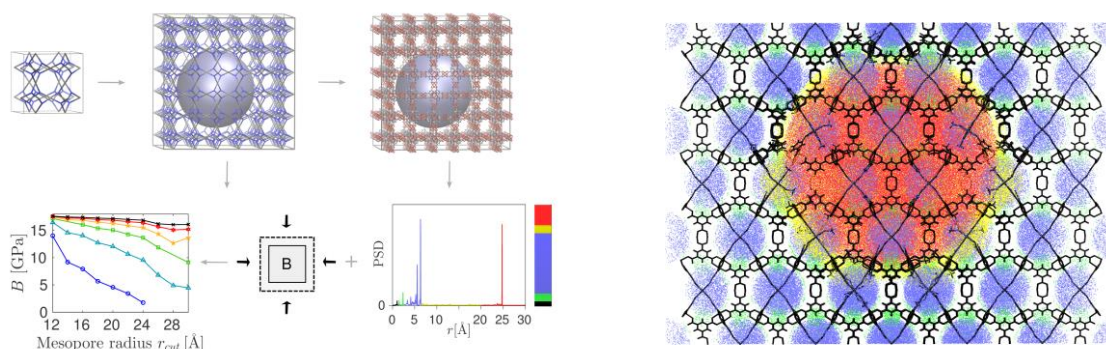
Johannes P. Dürholt, Julian Keupp, and Rochus Schmid. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, 4517–4523

The Impact of Mesopores on the Mechanical Stability of HKUST-1: A Multiscale Investigation

Metal Organic Frameworks (MOFs) are crystalline porous coordination polymers with very interesting properties. By introducing so called “defect linkers” with missing anchor groups, defect-engineered MOFs with mesoporosity (pore sizes $> 2\text{ nm}$) have recently been synthesized. The nature of these mesopores could not be characterized experimentally.

Therefore, in a theoretical study we constructed models of possible mesoporous defects in HKUST-1 by varying defect size and concentration. We investigated the pore structure and its relation to the mechanical stability of the overall system in order to draw conclusions about the nature of these pores. Due to the mere size of the systems, containing such large mesopores, a coarse-grained simulation was performed, where groups of atoms are replaced by a single ‘bead’ particle. For the pore analysis atomistic structures were generated from the optimized coarse-grained models. In this multiscale investigation we found that for a given void fraction, many small pores are preferred over fewer larger pores with respect to stability.

Furthermore, a large number of small mesopores can lead to an effective increase in the gravimetric surface area, which is of importance for the interpretation of experimental results.



Metallorganische Gerüstverbindungen (MOFs) sind poröse kristalline Koordinationspolymere mit interessanten Eigenschaften. Durch das Einführen von ‘Defekt-Linkern’ mit fehlenden Ankergruppen konnten kürzlich mesoporöse Strukturen (Porengröße $> 2\text{ nm}$) in MOFs synthetisiert werden. Experimentell ist über die Art der Poren wenig bekannt. Daher haben wir in einer theoretischen Untersuchung mesoporöse Defekte in HKUST-1 mit verschiedenen Größen und Konzentrationen konstruiert. Wir untersuchten die Porenstruktur und deren Zusammenhang mit der mechanischen Stabilität um tieferen Einblick in die Art der Poren zu gewinnen. Aufgrund der Systemgröße wurde ein ‘Coarse-Grained’ (CG) Modell verwendet, bei dem Atomgruppen zu einem sog. ‘bead’ zusammengefasst werden. Für die Porenanalyse wurden aus den optimierten CG Modellen atomistische Strukturen generiert. In diesem Multiskalenansatz fanden wir, dass bei gleichem Poren-Gesamtvolumen viele kleinere Poren stabiler sind als wenige große Poren. Zudem kann eine große Zahl kleiner Mesoporen zu einer effektiv höheren gravimetrischen Oberfläche führen, was für die Interpretation experimenteller Daten von Bedeutung ist.

Biochemistry I – Biochemie I

Michael Hollmann

Biochemie I – Rezeptorbiochemie

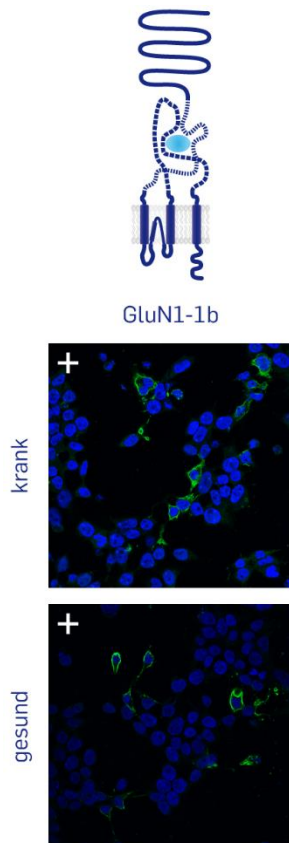
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

Email: michael.hollmann@rub.de; Website: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1>

E. Castillo-Gomez, B. Oliveira, D. Tapken, S. Bertrand, C. Klein-Schmidt, H. Pan, P. Zafeiriou, J. Steiner, B. Jurek, R. Trippe, H. Prüss, W.-H. Zimmermann, D. Bertrand, H. Ehrenreich, M. Hollmann, *Molecular Psychiatry* 2016, 00, 1-9.

All naturally occurring autoantibodies against the NMDA receptor subunit NR1 have pathogenic potential irrespective of epitope and immunoglobulin class.



Topology of the classical NMDA-type glutamate receptor subunit GluN1-1b. The subunit was expressed in HEK cells and probed with serum of a neurological patient ("krank") and a healthy control ("gesund"). Green fluorescence shows immunoreactivity in both cases. Blue = nuclear stain

Glutamate receptors underlie the majority of excitatory signaling between nerve cells. Like other proteins, these receptors can erroneously become the target of the immune system. Autoantibodies against the NMDA receptor subtype in particular may cause severe symptoms such as epileptic seizures, movement disorders, psychoses, and cognitive deficiencies. This condition, called anti-NMDA receptor encephalitis, was believed to be based on IgG-type antibodies against an extracellular receptor epitope. We showed that, contrary to current doctrine, autoantibodies can be of the IgG, IgM, or IgA types and target very different domains of NMDA receptors, even intracellular epitopes. Most importantly, autoantibodies are independent of any disease and even occur in healthy controls. This means that anti-NMDA receptor autoantibodies don't necessarily indicate a neurological disease. For such a disease to manifest itself, the blood-brain barrier, which normally prevents antibodies from reaching the brain, very likely has to be compromised. Consequently, a blood test positive for NMDA receptor autoantibodies alone is no proof of a neurological disease and does not warrant immunosuppressive treatment.

Glutamatrezeptoren vermitteln die Mehrheit der erregenden neuronalen Signale. Wie andere Proteine können diese Rezeptoren fälschlicherweise Ziele des Immunsystems werden. Autoantikörper, insbesondere gegen den NMDA-Rezeptor-Subtyp, können epileptische Anfälle, Bewegungsstörungen, Psychosen und kognitive Einschränkungen verursachen. Dieser Zustand, anti-NMDA-Rezeptor-Enzephalie genannt, wurde auf IgG-Antikörper gegen ein bestimmtes extrazelluläres Epitop zurückgeführt. Wir konnten zeigen, dass entgegen der aktuellen Doktrin Antikörper sowohl vom IgG-, IgM- oder IgA-Typ und auch gegen intrazelluläre Epitope gerichtet sein können. Der wichtigste Befund aber war, dass Autoantikörper unabhängig von neurologischen Defekten auftreten, auch in völlig gesunden Menschen. Das bedeutet, dass anti-NMDA-Rezeptor-Autoantikörper nicht notwendigerweise ein neurologisches Problem anzeigen. Zur Ausbildung der Krankheit bedarf es vermutlich eines Zusammenbruchs der Blut-Hirn-Schranke, die normalerweise den Zutritt von Antikörpern ins Gehirn verhindert. Das bedeutet, dass ein positiver Bluttest auf anti-NMDA-Rezeptor-Autoantikörper für sich allein noch kein Beweis für einen neurologischen Defekt ist und keine Behandlung mit Immunsuppressiva erfordert.

Biochemistry II – Biochemie II

Thomas Günther-Pomorski

Biochemistry II – Molecular Biochemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224230; Fax.: ++49-(0)234-3214105

Email: Thomas.Guenther-Pomorski@ruhr-uni-bochum.de;

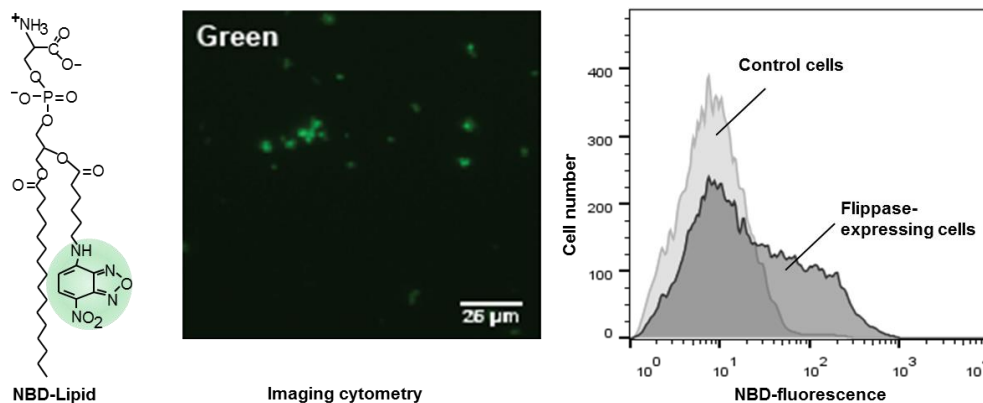
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc2/>

Jensen MS, Costa SR, Theorin L, Christensen JP, Pomorski TG, López-Marqués RL.

Cytometry A. 2016; 89: 673-80.

Application of image cytometry to characterize heterologous lipid flippases in yeast

Lipid transporters, also termed lipid flippases, are integral membrane proteins that play a central role in moving lipids across cellular membranes, thereby controlling numerous cellular processes including vesicle biogenesis, cell signaling, morphogenesis and migration. Characterization of these proteins is often accomplished by their heterologous expression in yeast, followed by incubation of the cells with fluorescent lipids. Uptake of these probes is then quantified by flow cytometry, a time consuming and expensive method. In a joined venture with the research group of Rosa López-Marqués at the University of Copenhagen we have now optimized a protocol to use an automated image-based cell counter to accurately measure lipid uptake by heterologous lipid transporters expressed in yeast. The method extends the number of techniques available for characterization of lipid transporter activities, and should be readily adaptable to analyze a variety of other transport systems in yeast, parasites and mammalian cells.



Lipidtransporter sind integrale Membranproteine, die den Transport von Lipiden über zelluläre Membranen vermitteln und dadurch zahlreiche lebenswichtige zelluläre Prozesse, wie die Vesikelbildung und Zellkommunikation, kontrollieren. Die Charakterisierung dieser Proteine basiert oft auf deren heterologe Expression in Hefe und anschließender Inkubation der Zellen mit fluoreszierenden Lipiden. Die Quantifizierung der Lipidaufnahme erfolgt dann durch *Flow Cytometry*, einer zeitaufwändigen und teuren Methode. In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Rosa López-Marqués an der Universität von Kopenhagen haben wir ein optimiertes Verfahren erarbeitet, dass den Gebrauch eines automatisierten, bildgebendem Zellzählers für die akkurate Messung der Lipidaufnahme ermöglicht. Diese Methode erweitert das Spektrum der verfügbaren Techniken zur Charakterisierung von Lipidtransporters und ermöglicht die Analyse einer Vielzahl anderer Transportsysteme in Hefen, Parasiten und Säugetierzelle.

Rolf Heumann

Biochemistry II – Molecular Neurobiochemistry Group

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228230; Fax.: ++49-(0)234-123456

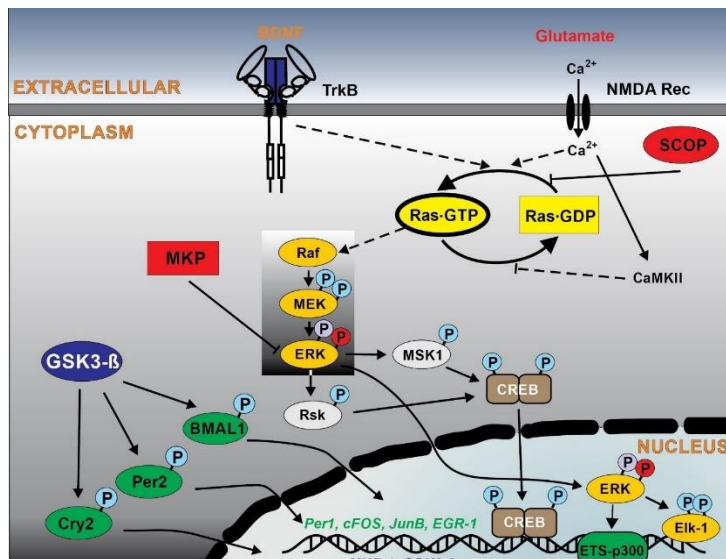
Email: rolf.heumann@rub.de;

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/mol-neurobio/Lehrstuhl/Molneurobio.html>

Serchov, T. Jilg, A. Wolf, C.T. Radtke, I. Stehle, J. Heumann, R. *Mol. Neurobiol* 2016 53; 1843-1855.

Ras Activity Oscillates in the Mouse Suprachiasmatic Nucleus and Modulates Circadian Clock Dynamics

The circadian clock “ticks” in every cell of the body; a central master clock, however, is located in a brain region named *Nucleus suprachiasmaticus*. Its activity determines the cycle’s period length, which is close to but not exactly 24 hours. It has to be continuously adjusted by external signals such as light, motor activity or food intake to the exact 24-hour rhythm. Such regulation is the result of the activity of many proteins interacting in various signal cascades. A central switch for such signal cascades is the Ras protein, which is present either in its active or in its inactive form. We demonstrated in mice that Ras activity in the *Nucleus suprachiasmaticus* is high during the day and low during the night. Moreover, Ras activity was increased after brief exposure to light during the night and permanent activation of Ras shortened the cycle’s period length. The activity of the Ras protein is linked with the activity of an enzyme in the glycogen metabolism, namely GSK3 β . Via Ras, that enzyme is also involved in the regulation of



circadian clock. **Relevance:** Other studies have shown that a dysregulation of the GSK3 β enzyme leads to major disturbances in circadian rhythms, and is linked to the symptoms of bipolar disorder.

Die circadiane Uhr „tickt“ in jeder Körperzelle; der zentrale Taktgeber sitzt jedoch im Gehirn, in einer Region, die *Nucleus suprachiasmaticus* genannt wird. Seine Aktivität gibt die Periodenlänge des Zyklus vor. Die

innere Uhr ist nicht automatisch auf einen 24-Stunden-Rhythmus eingestellt; durch äußere Signale wie Licht, Bewegung oder Nahrungsaufnahme wird sie ständig nachjustiert. An dieser Regulation sind viele Proteine beteiligt, die in Signalkaskaden zusammenwirken. Ein zentraler Schalter solcher Signalkaskaden ist das Ras-Protein, das in einem aktiven und in einem inaktiven Zustand vorliegt. Wir konnten zeigen, dass die Ras-Aktivität im *Nucleus suprachiasmaticus* während des Tages hoch ist und während der Nacht niedrig. Eine kurze Lichteinwirkung während der Nacht erhöhte die Ras-Aktivität und eine dauerhafte Aktivierung von Ras führte zu einer Verkürzung der Periodenlänge des circadianen Rhythmus. Die Aktivität des Ras-Proteins hängt zusammen mit der Aktivität eines Enzyms aus dem Glykogen-Stoffwechsels, GSK3 β genannt. Es ist über Ras an der Regulation der inneren Uhr beteiligt. Medizinische Relevanz: Andere Studien haben gezeigt, dass eine Fehlregulation des Enzyms GSK3 β zu Rhythmusstörungen führt und mit dem Krankheitsbild der bipolaren Störungen gekoppelt ist.

Raphael Stoll

Biomolekulare Spektroskopie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: raphael.stoll@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bionmr>

K. T. Yip, X. Y. Zhong, N. Seibel, S. Pütz, J. Autzen, R. Gasper, E. Hofmann, J. Scherkenbeck, R. Stoll, *Scientific Reports* **6** (2016) 25119.

Small Molecules Antagonise the MIA-Fibronectin Interaction in Malignant Melanoma

Melanoma inhibitory activity (MIA), an extracellular protein highly expressed by malignant melanoma cells, plays an important functional role in melanoma development, progression, and metastasis. After its secretion, MIA directly interacts with extracellular matrix proteins, such as fibronectin (FN). By this mechanism, MIA actively facilitates focal cell detachment from surrounding structures and strongly promotes tumour cell invasion and migration. Hence, the molecular understanding of MIA's function provides a promising target for the development of new strategies in malignant melanoma therapy. Here, we describe for the first time the

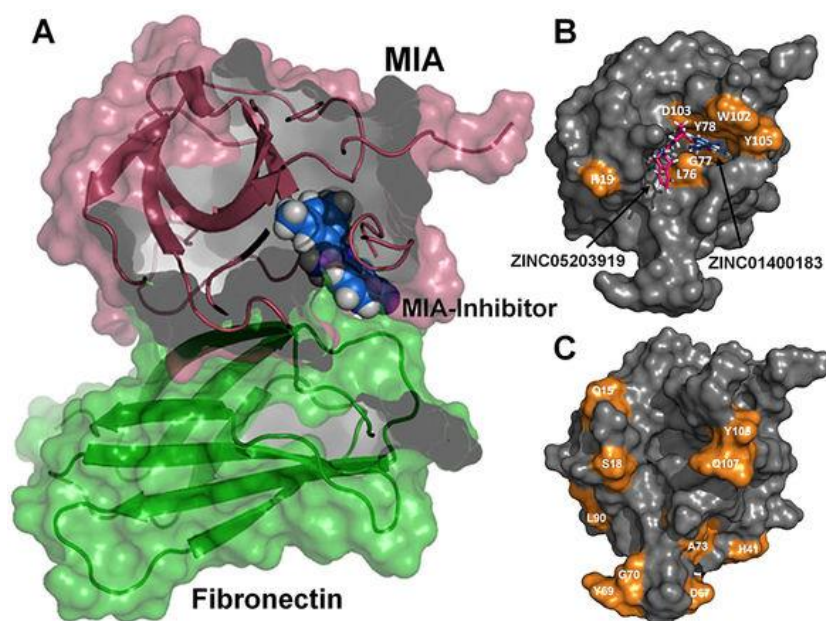


Figure 1. Small molecular compounds antagonise the interaction between MIA and FN.

discovery of small molecules that are able to disrupt the MIA-FN complex by selectively binding to a new druggable pocket, which we could identify on MIA by structural analysis and fragment-based screening. Our findings may inspire novel drug discovery efforts aiming at a therapeutically effective treatment of melanoma by targeting MIA.

MIA (Melanom-inhibitorische Aktivität) ist ein extrazelluläres Protein, welches von malignen Melanomzellen stark

exprimiert wird. Es spielt eine wichtige Rolle bei der Entstehung und Progression des Melanoms sowie dessen Metastasierung. Nach erfolgter Sekretion des MIA-Proteins in die extrazelluläre Matrix interagiert es mit den dort befindlichen Proteinen, wie z. B. dem Fibronectin (FN). Dadurch ermöglicht das MIA-Protein aktiv das Ab- und Herauslösen von Zellen aus dem Gewebeverband der Haut und trägt somit zur Tumorzellinvasion und -migration bei. Von daher ist ein molekulares Verständnis dieses durch MIA vermittelten Prozesses von großer Bedeutung für die Entwicklung neuer Behandlungstherapien des malignen Melanoms, für das MIA ein vielversprechendes Zielpotein darstellt. In dieser Arbeit beschreiben wir zum ersten Mal die Entdeckung niedermolekularer Substanzen, welche die Bildung des MIA-FN-Proteinkomplexes verhindern können, indem sie in eine neu entdeckte Kavität auf der Oberfläche des MIA-Protein binden. Diese Bindungstasche konnten wir durch strukturelle Untersuchungen im Rahmen eines Fragment-basierten Screenings identifizieren. Unsere Ergebnisse können nun als Grundlage für zukünftige Medikamentenentwicklungen dienen, um effektive Behandlungsmethoden des Melanoms auf der Basis des MIA-Proteins zu entwickeln.

EPR Spectroscopy – EPR-Spektroskopie

Enrica Bordignon

EPR Spectroscopy

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226239

Email: enrica.bordignon@rub.de; <http://www.epr.rub.de>

Hervé Celia, Nicholas Noinaj, Stanislav D. Zakharov, Enrica Bordignon, Istvan Botos, Monica Santamaria, Travis J. Barnard, William A. Cramer, Roland Lloubes & Susan K. Buchanan, *Nature* 2016, 538, 60–65.

Structural insight into the role of the Ton complex in energy transduction.

Prof. Bordignon closely interacted with scientists of, among others, the National Institutes of Health, Bethesda (US), and the Institut de Microbiologie de la Méditerranée, Marseille (France) to discover crucial structural details of a complicated assembly of proteins that transfer energy between the inner and outer membranes of *Escherichia coli* and pathogenic bacteria. She used Double Electron Electron Resonance (DEER) spectroscopy to elucidate that the energy-transferring complex is made of a pentamer called ExbB, interacting with a dimer (ExbD) and another specific protein (TonB). The latter acts as an energy elevator that delivers energy to vital transporters in the outer membrane. Before this work we had only a rough sketch of the interacting players. Now, thanks to a synergistic teamwork, we can draw a detailed and experimentally proven model of the three actors of the Ton system.

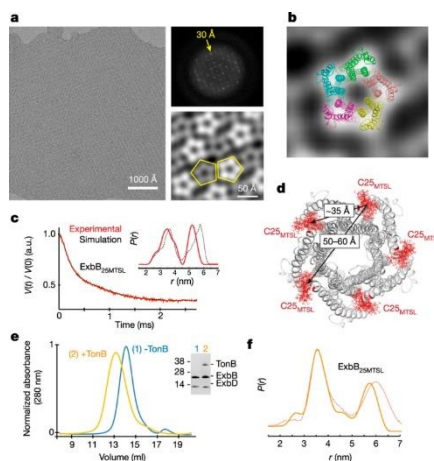


Figure 3 from doi 10.1038/nature 19757. a,b, Electron microscopy analysis of the Ton subcomplex shows that the complex is pentameric. c. DEER on the spin-labeled Ton subcomplex agrees with the simulation on the pentameric ExbB (black dashed lines and d). e. Purification of the fully assembled Ton complex (orange) and the subcomplex (blue). f. Distances in the fully assembled Ton complex (solid orange line) and subcomplex in DDM (dashed red line).

Prof. Bordignon hat unter anderem eng mit Wissenschaftlern des National Institutes of Health, Bethesda (US) und dem Institut de Microbiologie de la Méditerranée, Marseille (Frankreich) zusammengearbeitet, um entscheidende Details über komplizierte Ansammlungen von Proteinen, welche Energie zwischen der inneren und äußeren Membran der *Escherichia coli* und pathogenen Bakterien übertragen, zu entdecken. Sie verwendete Doppel-Elektron-Elektron-Resonanz (DEER) Spektroskopie um aufzuklären, dass der Energie-Transfer Komplex durch das Pentamer ExbB stattfindet. Welches mit dem Dimer (ExbD) und einem anderen spezifischen Protein (TonB) interagiert. Das letztere wirkt wie ein Fahrstuhl, welches die Energie zu den vitalen Transportern in der äußeren Membran liefert. Vor dieser Arbeit gab es nur eine grobe Vorstellung von den interagierenden Spezies. Nun kann, dank synergetischer Zusammenarbeit, ein detailliertes und experimentell bewiesenes Modell der drei Spezies in dem Ton System erstellt werden.

Organic Chemistry I – Organische Chemie I

Lukas J. Gooßen

Evonik Chair of Organic Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

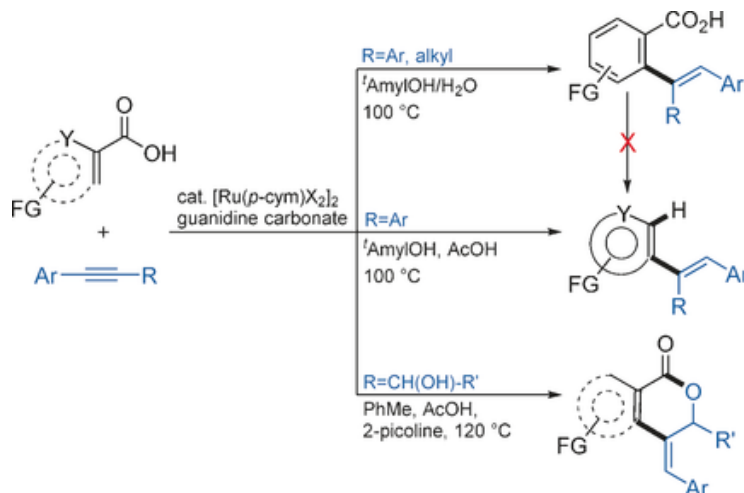
Tel.: +49-(0)234-32-19075; Fax.: +49-(0)234-32-14675

Email: lukas.goossen@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/goossen/index.html>

L. Huang, A. Biafora, G. Zhang, V. Bragoni, L. J. Gooßen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, 55, 6933-6937.

Regioselective C–H Hydroarylation of Internal Alkynes with Arenecarboxylates: Carboxylates as Deciduous Directing Groups.

In this publication, we disclose an atom-economic redox-neutral intermolecular *ortho*-C-H hydroarylation of benzoic acids catalyzed by ruthenium. Starting from benzoates and aryl(alkyl)acetylenes, a wide variety of 2-vinylbenzoic acids or aromatic δ -lactones are accessed from abundantly available precursors. The key feature is that in the decarboxylative pathway (center of scheme), no unwanted difunctionalization products are formed. The carboxylates thus become deciduous directing groups, in which the directing group may be compared to the leaf of a tree that is shed in autumn after it has fulfilled its purpose, in this case the intrinsically selective mono-*ortho*-C-H hydroarylation.



Ruthenium(II) catalyzed decarboxylative and non-decarboxylative alkenylation of benzoic acids.

In dieser Arbeit präsentieren wir eine rutheniumkatalysierte, atomökonomische und redox-neutrale *ortho*-C-H Hydroarylierung von Benzoesäuren mit Aryl(alkyl)alkinen zur Darstellung zahlreicher *ortho*-Vinylbenzoesäuren und aromatischer δ -Lactone. Interessanterweise werden unter decarboxylierenden Bedingungen (mittlere Abbildung) keine unerwünschten Difunktionalisierungsprodukten gebildet. Die Carboxylatgruppe kann daher als abfallende dirigierende Gruppe betrachtet werden. Direkt nach Bildung der ersten C-C Bindung wird die COOH Gruppe entfernt und ist daher nicht mehr verfügbar, um eine zweite Bindungsknüpfung einzuleiten. Das Carboxylat als dirigierende Gruppe ist vergleichbar mit einem Laubblatt im Herbst, welches abfällt nachdem es seinen Zweck erfüllt hat.

John S. McCaskill

Microsystems Chemistry and BioIT, BioMIP (OC1)

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227702; Fax.: ++49-(0)234-14047

Email: john.mccaskill@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rub.de/biomip/>

D. Funke, P. Mayr, T. Maeke, J.S. McCaskill, A. Sharma, L. Straczek, J. Oehm, *Anal. Integ. Circ. Sig. Proc.* 2016, E1-10.

Ultra low-power, -area and -frequency CMOS thyristor-based oscillator for autonomous microsystems.

Work in BioMIP in recent years has focussed on the integration of chemistry and electronics.

Electronic chemistry goes beyond classical electrochemistry in establishing a two-way information rich interface between the world of programmable digital electronics and chemical reactions. In 2016, an EU project MICREAgents, coordinated by McCaskill, completed the first autonomous microsystems in the form of microscopic particles called lablets that can control and sense chemical reactions. These differ from smart dust in communicating with one another and a host computer in an essentially chemical manner via pairwise docking, and are designed to exchange electrical signals and operate in aqueous solution (where wireless communication is strongly damped). The paper focusses on one aspect of these lablets: the low power slow oscillator clock, which allows the fast time scales of electronics to be matched to the slower timescales of electrochemical reactions: awarded the best paper award by the IEEE conference.

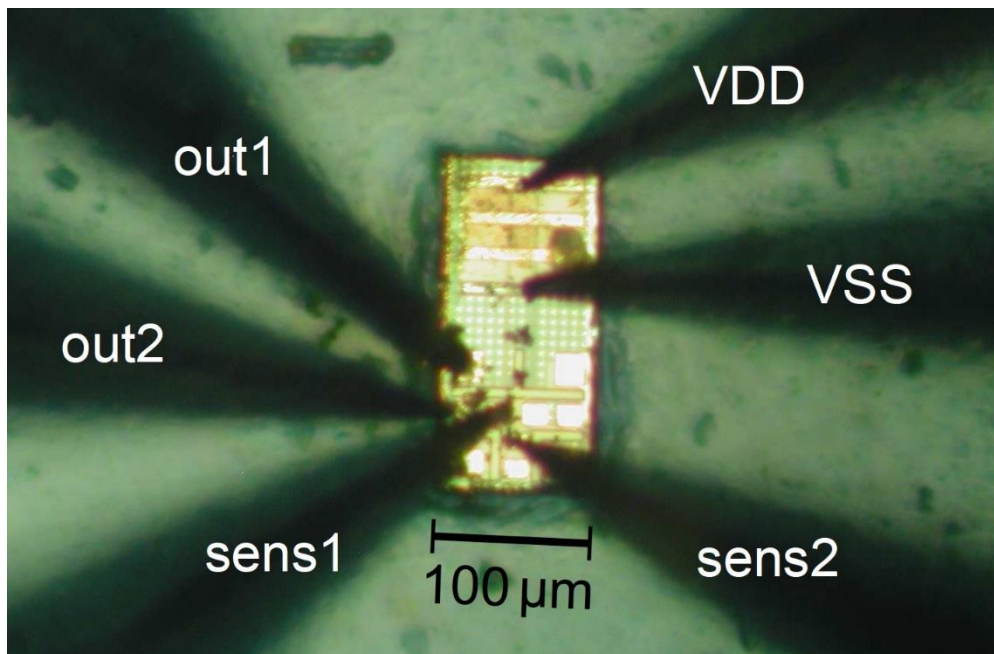


Image of one 100x200μm autonomous lablet with supercap structure in top half and channel and chemical communication structure in lower half.

Elektronische Chemie etabliert ein informationsreiches Interface zwischen digitaler Elektronik und chemischen Reaktionen. Das EU-Projekt MICREAgents erzeugte 2016 die ersten autonomen Mikropartikel („lablets“), die chemische Reaktionen detektieren und kontrollieren können. Die zitierte Arbeit berichtet über einen speziellen Aspekt, eine Niedrigstrom- (1.3nA) und Niedrigfrequenz-Clock, und wurde bei der IEE Tagung als „Best Paper“ ausgezeichnet.

Stefan M. Huber

Organische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

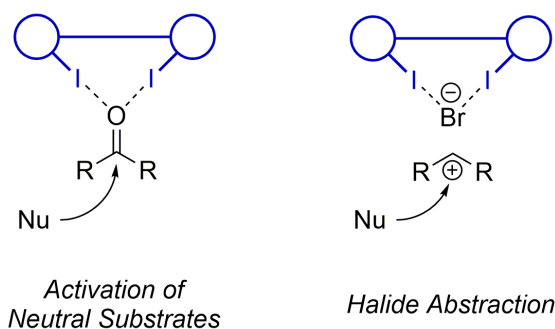
Email: stefan.m.huber@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/huber>

S. Bulfield, S. M. Huber, *Chem. Eur. J.* 22 (2016) 14434-14450.

Halogen Bonding in Organic Synthesis and Organocatalysis (Concept Article)

Halogen bonding is a non-covalent interaction similar to hydrogen bonding, which is based on electrophilic halogen substituents. Lately, halogen bonding has been introduced as a key interaction for the design of activators or organocatalysts. In this concept article, we provide an overview on the use of various cationic or polyfluorinated halogen bond donors in halide abstraction reactions or in the activation of neutral organic substrates.

Halogen Bond Donors



Halogenbrücken sind nichtkovalente Wechselwirkungen, die den weitaus bekannteren Wasserstoffbrücken ähneln, allerdings auf elektrophilen Halogensubstituenten basieren. In den letzten Jahren wurden Halogenbrücken als Designmotiv für Aktivatoren und Organokatalysatoren etabliert. In diesem Konzeptartikel geben wir einen Überblick über die Anwendung verschiedener kationischer oder polyfluorierter Halogenbrückendonoren in Halogenid-Abstraktionsreaktionen oder zur Aktivierung neutraler Substrate.

Frank Schulz

Chair of Organic Chemistry I – Chemistry and Biochemistry of Natural Products

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-27034

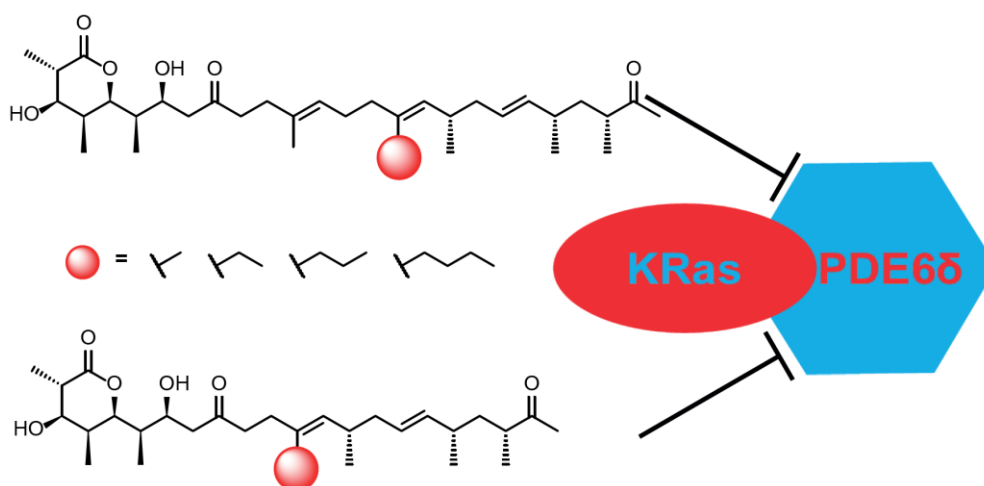
Email: frank.schulz@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/schulz/>

A. Ismail-Ali, E. K. Fansa, N. Pryk, S. Yahiaoui, S. Kushnir, M. Pflieger,

A. Wittinghofer, F. Schulz, *Org. Biomol. Chem.* 2016, 14, 7671-7675.

Biosynthesis-driven structure–activity relationship study of premonensin-derivatives.

Natural products are the most prolific source of bioactive compounds for modern medicine. The vast majority of all anticancer and anti-infective drugs are based on them; yet, natural products typically require structural optimization to render them applicable for human treatment. Due to the intriguing structural complexity, chemical derivatization strategies are too often not rewarding. Instead, genetic modification of the natural product producing microorganisms provides a valuable new toolbox for the medicinal chemistry of natural products. In this study, we introduced targeted manipulations of the biosynthetic pathway towards anti-cancer candidate compound premonensin to generate a number of derivatives. The experiments were carried out in *Streptomyces cinnamonensis*, the natural producer of this compound. The resulting substances were tested for biological activity in a structure-activity relationship study and found to be potent inhibitors of the oncogenic KRas signaling pathway.



Premonensin and its derivatives inhibit the KRas transport protein PDE6 δ , thereby preventing growth of KRas-dependent tumor cells, as found in ~30% of all tumors.

Naturstoffe sind die beste Quelle für bioaktive Substanzen in der modernen Medizin. Die überwiegende Mehrheit aller Wirkstoffe zur Bekämpfung von Tumoren oder Infektionen basiert auf Naturstoffen. Jedoch bedürfen diese in aller Regel der Derivatisierung, um im Menschen angewandt werden zu können. Aufgrund ihrer strukturellen Komplexität ist eine chemische Derivatisierung häufig nicht lohnend. Stattdessen bietet die genetische Modifikation der naturstoffproduzierenden Mikroorganismen zahlreiche neue Möglichkeiten für die medizinische Chemie. In dieser Studie haben wir den Biosyntheseweg zum Antitumor-Wirkstoff Premonensin durch gezielte Manipulationen so beeinflusst, dass wir eine Anzahl von Derivaten der Zielverbindung isolieren konnten. Diese Experimente wurden in *Streptomyces cinnamonensis* durchgeführt, dem natürlichen Produzenten von Premonensin. Die erhaltenen Substanzen wurden im Sinne einer Struktur-Wirkungs-Beziehung biologisch charakterisiert und starke Inhibitoren des oncogenen KRas-Weges wurden identifiziert.

Organic Chemistry II – Organische Chemie II

Wolfram Sander

Chair of Organic Chemistry II – Physical Organic Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-123456; Fax.: ++49-(0)234-123456

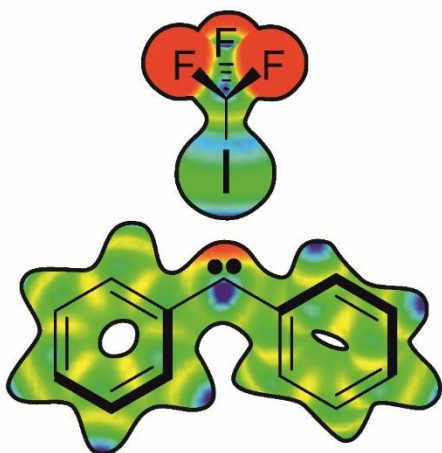
Email: Wolfram.Sander@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rub.de/oc2/>

S. Henkel, P. Costa, L. Klute, P. Sokkar, M. Fernandez-Oliva, W. Thiel, E. Sanchez-Garcia, and W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* 2016, 138, 1689-1697.

Switching the Spin State of Diphenylcarbene via Halogen Bonding

Diphenylcarbene (DPC) is prototypical carbene with a triplet ground state and a relatively small singlet-triplet splitting of 3-5 kcal/mol. DPC can be generated from diphenyldiazomethane by 530 nm photolysis at 3 K in a matrix of solid argon. Once isolated in the matrix, DPC can be investigated by spectroscopic methods and by quantum chemical calculations.

In this paper the interaction between DPC and the halogen bond donors CF_3I and CF_3Br were investigated in an argon matrix using IR, UV-vis, and electron paramagnetic resonance (EPR) in combination with QM and QM/MM calculations. Both halogen bond donors form very strong complexes with the singlet state of DPC, but only weakly interact with triplet DPC. This results in a switching of the spin state of DPC, the singlet complexes becoming more stable than the triplet complexes. Our study shows that halogen bonding not only influences the thermodynamic stability and structure of stable molecular aggregates, but can also drastically change the properties of reactive intermediates such as carbenes.



Diphenylcarben (DPC) ist ein musterhaftes Carben mit einem Triplett Grundzustand und einer relativ kleinen Singulett-Triplett Aufspaltung von 3-5 kcal/mol. DPC kann aus Diphenyldiazomethan durch Photolyse mit 530 nm bei 3 K in einer Matrix aus festem Argon gewonnen werden. Einmal in der Matrix isoliert, kann DPC mit spektroskopischen und quantenchemischen Methoden untersucht werden. In dieser Studie wurde die Wechselwirkung zwischen DPC und den Halogenbindungs-Donoren CF_3I und CF_3Br mit IR-, UV-vis und Elektronenspinresonanzspektroskopie (EPR) in Kombination mit QM- und QM/MM-Rechnungen untersucht. Beide Halogenbindungs-Donore bilden sehr starke Komplexe mit dem Singulett-Zustand von DPC, aber wechselwirken nur schwach mit Triplett DPC. Dies führt zu einem Umschalten des Spinzustandes von DPC. Unsere Untersuchungen zeigen, dass Halogenbindungs-Donore nicht nur die thermodynamische Stabilität und Struktur von stabilen molekularen Aggregaten beeinflusst, sondern auch die Eigenschaften von reaktiven Zwischenstufen, wie Carbene, drastisch verändern können.

Christian Merten

Chair of Organic Chemistry II

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

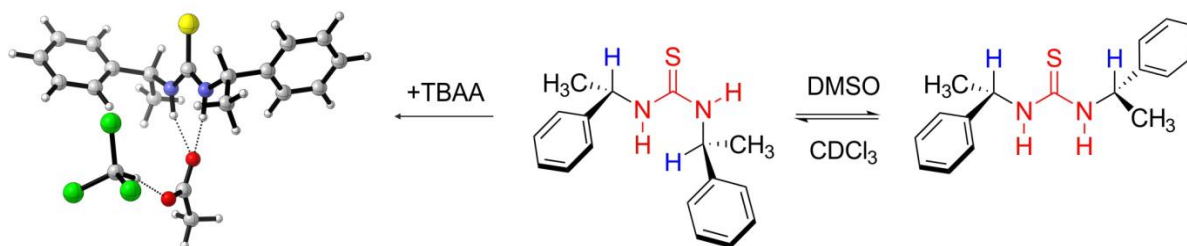
Tel.: ++49-(0)234-3224529; Fax.: ++49-(0)234-3214353

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

N. M. Kreienborg, C. H. Pollok, C. Merten, *Chem. Eur. J.* 22 (2016) 12455-12463.

Towards an observation of active conformations in asymmetric catalysis: Interaction-induced conformational preferences of a chiral thiourea model compound.

The observation of the active species, i.e. the complex of reactant and catalyst, is the goal of most spectroscopic investigations on enantioselective organocatalysts in solution. While NMR spectroscopy is widely applied, it has low sensitivity for conformational changes or the chiral nature of the interactions. In the present work, we exemplify the use of vibrational circular dichroism (VCD) spectroscopy for the characterization of a chiral thiourea model compound in non-polar and polar solvents. We show that the conformational preferences of the thiourea strongly depend on the solvent, and how the experimental VCD spectra in combination with spectra calculations can be used to unambiguously derive these preferences. Furthermore, we provide a detailed analysis of its interaction with a model reactant, and give evidence for an unexpected binding topology between the thiourea and an acetate anion.



Conformational preferences of the investigated model thiourea bis(α -phenylethyl)thiourea (PETU).

Das Ziel der meisten spektroskopischen Untersuchungen an enantioselectiven Organokatalysatoren ist die Charakterisierung ihrer ‚aktiven Konformation‘, also des molekularen Komplexes aus Reaktant und Katalysator. Häufig wird dazu die NMR-Spektroskopie verwendet, die jedoch eine sehr geringe Empfindlichkeit für unterschiedliche Konformere aufweist und die chirale Struktur der aktiven Konformation nur indirekt abbildet. In dieser Arbeit zeigen wir beispielhaft, wie der Schwingungszirkulardichroismus (VCD) für die Charakterisierung eines chiralen Thioharnstoffs in polaren und unpolaren Lösungsmitteln genutzt werden kann. Dabei gehen wir auf die bevorzugten Konformationen ein, die stark vom Lösungsmittel abhängen, und nutzen die experimentellen VCD Spektren zusammen mit berechneten Spektren um diese Konformationen zu bestimmen. In einem nächsten Schritt haben wir die Wechselwirkung des Thioharnstoffs mit einem Modells substrat untersucht. Dabei konnten wir zeigen, dass neben der üblicherweise angenommenen zweifach Wasserstoffbrücken-gebundenen Form auch andere, unerwartete Bindungstopologie eine Rolle spielt.

Physical Chemistry I – Physikalische Chemie I

Karina Morgenstern

Chair of Physical Chemistry I

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225529; Fax.: ++49-(0)234-3214182

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

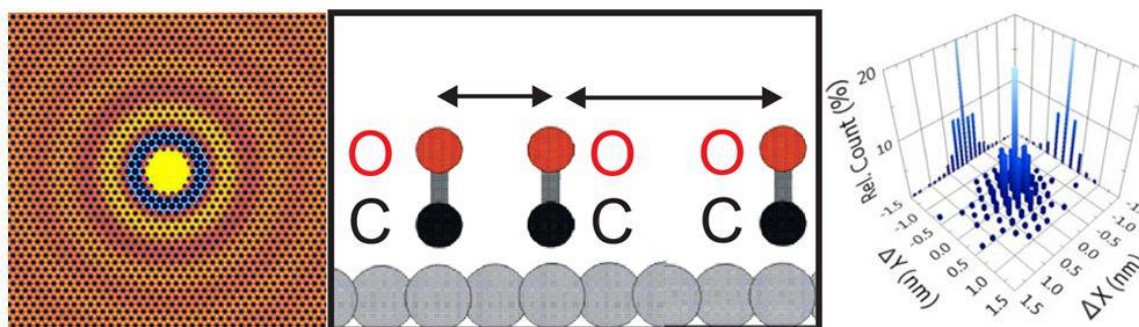
Christopher Zaum, Karina Morgenstern, *Nano Letters* 16 (2016) 3001.

Experimental evidence for a three-body interaction between diffusing CO molecules

Long-range interactions have been shown to influence adsorbate arrangements leading to subtle changes in energy. They play a vital role in quantitative description of reaction dynamics, stabilization of adsorbate superlattices and anomalous low prefactors determined from growth studies. They are also of importance to intermediate coverage as they cause a change in diffusion energy which decreases with increasing adsorbate separation and oscillates with half of the Fermi wavelength of the surface state.

Experimental studies conducted in determining the strength of long-range interaction for metallic and molecular adsorbates on several metallic fcc(111) surfaces using scanning tunneling microscopy has resulted to oscillatory distributions interpreted in terms of interaction between adsorbates pair only.

However, it has been suggested by He-spin echo measurements that pairwise interaction alone is not sufficient enough for long-range interactions full picture. Also fit at small adsorbates distances is less satisfactory than those at larger distances for all published scanning tunneling microscopy data, hence importance of high order term in the long-range interaction between adsorbates needs to be established.



Left: Modified diffusion potential seen by a CO molecule; middle: Sketch of three-body interaction; right: Diffusivity map.

We investigated diffusion of carbon monoxide molecules on Cu(111) using time-lapsed scanning tunneling microscopy at a temperature range from 30 to 38 K. We could follow the motion of the same set of molecules for extended periods of times up to days in real space. The studies provided an evidence for the surface state mediated trio interaction between three adsorbates.

The authors performed the measurements with a home-built low-temperature scanning tunneling microscope in an ultrahigh-vacuum. After cleaning of Cu(111) by standard sputtering and annealing cycles, 0.005 ML of carbon monoxide was deposited on the sample at 22 K before being transferred into the scanning tunneling microscopy where measurements were performed between 30 and 38 K.

The authors' findings are applicable for all two-dimensional oscillatory long-range interactions that influence diffusion barriers and all molecules that scatter the surface state electrons. The research team hopes results obtained in diffusion state can be extended to reaction and nucleation.

Christian Herrmann

Physical Chemistry I – Biophysical Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

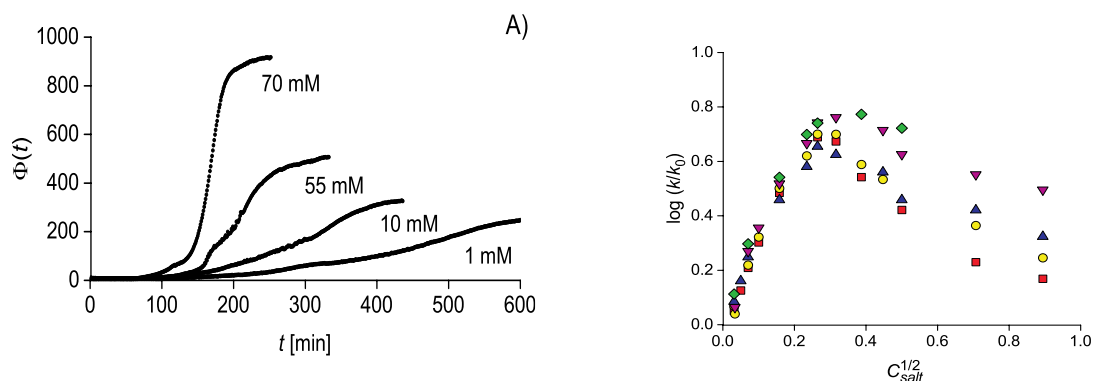
Tel.: ++49-(0)234-24173; Fax.: ++49-(0)234-14785

Email: chr.herrmann@rub.de; <http://www.rub.de/proin/>

M. Kutsch, P. Hortmann, C. Herrmann, S. Weibels, H. Weingärtner, *Biointerphases* 2016, 11, 019008.

Dissecting ion-specific from electrostatic salt effects on amyloid fibrillation: A case study of insulin.

Fibril formation of partially unfolded or misfolded proteins is responsible for human disease like Alzheimer, diabetes type II, Creutzfeldt-Jakob and others. Fibrillation is characterized by an initial delay phase when nuclei or seeding complexes are formed followed by a linear growth phase of the polymer. Various inorganic and organic salts were used in order to address the effect of electrostatics as well as Hofmeister effects on both, fibril nucleation and growth. The organic compounds tested include some salts from the group of organic liquids which span a large variety from hydrophilic to hydrophobic properties. Fibrillation of insulin at acidic pH was monitored by the increase of fluorescence of thioflavin T (ThT) incorporated into the polymer. The salts have a large, concentration dependent impact on both, the lag phase and the growth phase. While electrostatics dominate the influence at concentrations below 0.05 mol/l – and thus no compound specific effect is observed – the rate of polymer elongation passes a maximum at around 0.1 mol/l and decreases. Here, compound specific differences are observed following the Hofmeister categorization. Concludingly, fibril formation is controlled by various co-solvent effects. While screening of coulombic interactions leads to accelerated growth the presence of Hofmeister salts leads to a decrease of the fibril growth rate implying similar mechanisms under physiological solution conditions.



Growth rate of insulin fibrillation in the presence of various ionic compounds in water.

Amyloide Krankheiten des Menschen gehen auf die Polymerisation oder auf die Bildung fibrillärer Strukturen von missgefalteten Proteinen zurück. Insulin dient in dieser Studie als repräsentatives Protein mit dem Potenzial Fibrillen zu bilden. Es werden Salze wie Alkimetallchloride aber auch ionische, organische Verbindungen verwendet, um den Einfluss solcher Zusätze im Wasser auf die Geschwindigkeit und auf den Mechanismus der Fibrillierung zu untersuchen. Dabei wird im Konzentrationsbereich unterhalb 50 mM eine Beschleunigung der Wachstumsrate beobachtet, die auf eine zunehmende Abschirmung elektrostatischer Wechselwirkungen zurückzuführen ist. Bei höheren Konzentrationen kommen ionenspezifische Effekte zum Tragen, die sich nach der bekannten Hofmeister Serie ordnen lassen. Die dabei beobachteten Effekte führen zu einer Abnahme der Wachstumsrate, was physiologische Bedeutung oder sogar eine biomedizinische Relevanz hat.

Physical Chemistry II – Physikalische Chemie II

Martina Havenith

Lehrstuhl für Physikalische Chemie II

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

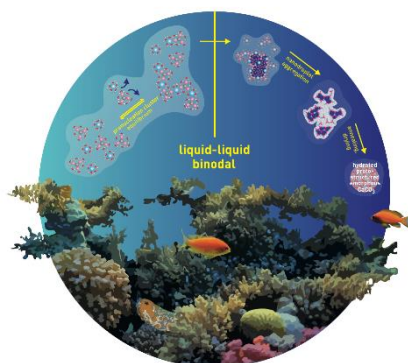
Tel.: ++49-(0)234-32 24249; FAX: ++49-(0)234-32 14183

Email: martina.havenith@rub.de ; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2>

F. Sebastiani, S.L.P. Wolf, B. Born, T.Q. Luong, H. Cölfen, D. Gebauer, M. Havenith,
Angew. Chem. Int. Ed. 56 (2017) 490-495.

Water Dynamics from THz Spectroscopy Reveal the Locus of a Liquid–Liquid Binodal Limit in Aqueous CaCO_3 Solutions

Calcium carbonate (CaCO_3) is pivotal to a variety of phenomena like rock formation and biomineralisation. Its nucleation process and the influence of soluble additives is also relevant for the development of new materials. However, the mechanism of CaCO_3 nucleation is still debated and the role of water remains enigmatic. It is often interpreted from the viewpoint of classical nucleation theory (CNT), where any role of the solvent is typically neglected. Alternatively, the so-called pre-nucleation cluster (PNC) pathway involves a stable cluster population prior to nucleation, whose formation is driven by the release of water molecules from the ion hydration layers. Terahertz (THz) spectroscopy has been proved as a powerful tool to assess water hydrogen bond network intermolecular dynamics and solvated ions modes in solution. Combined with a quantitative titration assay, this approach reveals the key role of water dynamics in the early stages of CaCO_3 precipitation, i.e. the binodal limit according to the PNC pathway, and of the influence of polycarboxylates.



Viele Naturphänomene hängen mit der Nukleation von CaCO_3 zusammen, wobei die Rolle des Wassers bis jetzt weitgehend unklar war. Änderungen in der Absorption im THz-Frequenzbereich während der frühen Stadien der CaCO_3 -Nukleation belegen Veränderungen in den gekoppelten Bewegungen der hydratisierten Calcium- und Carbonat-Ionen. Der direkte Zusammenhang zwischen diesen Effekten und der kontinuierlichen Entwicklung des Ionenaktivitätsproduktes zeigt die Lage einer flüssig-flüssig-binodalen Grenze. Die Daten lassen stark darauf schließen, dass sich proto-strukturiertes, amorphes CaCO_3 über die Verfestigung von anfänglich flüssigen Vorstufen bildet. Außerdem erhöhen Polycarboxylate, die flüssige Vorstufen von CaCO_3 stabilisieren, die kinetische Stabilität des metastabilen flüssig-flüssigen Zustands signifikant, aber sie beeinflussen nicht die Lage der binodalen Grenze. Die mechanistische Bedeutung der Dynamik von Wassernetzwerken bei der Phasentrennung kann als alternativer Weg der Nukleation über Pränukleationscluster rationalisiert werden und ist wahrscheinlich allgemein für wässrige Systeme gültig.

Patrick Nuernberger

Physical Chemistry II – Research Group „Ultrafast Photochemistry“

Ruhr-Uni Bochum; D-44780 Bochum

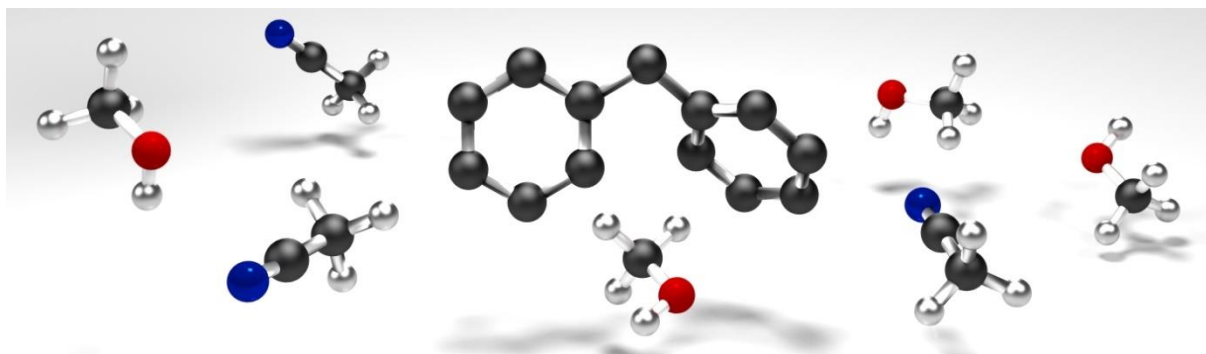
Tel.: +49-(0)234-3229946; FAX: +49-(0)234-3214293

email: patrick.nuernberger@rub.de; <http://www.rub.de/ag-nuernberger/>

J. Knorr, P. Sokkar, S. Schott, P. Costa, W. Thiel, W. Sander, E. Sanchez-Garcia,
P. Nuernberger, *Nature Communications* 2016, 7, 12968.

Competitive solvent-molecule interactions govern primary processes of diphenylcarbene in solvent mixtures

The primary reaction pathways of singlet diphenylcarbene (DPC) in the presence of a solvent comprise an intersystem crossing to the triplet state (e.g., in neat acetonitrile) and the formation of an ether product (in alcohols). By combining ultrafast spectroscopy and multiscale molecular dynamics simulations, the reactivity of DPC in solvent *mixtures* at room temperature could be unraveled. The observed dynamics are far from a linear combination of those observed in neat solvents, with the efficiency of different reaction channels varying significantly with the solvent mixing ratio. Although formally only a single methanol molecule is required for the formation of the final ether molecule, the reaction only occurs when a second methanol molecule is present. For this, there are two scenarios: in one, DPC first meets a single methanol molecule, forming a hydrogen-bonded complex, and then another one approaches later to trigger the insertion reaction. In the second scenario, DPC directly meets several methanol molecules incorporated in a hydrogen-bonded network, a proton transfer from one of them occurs and the reaction is eventually completed with another methanol molecule. In both cases, a single methanol molecule is not sufficient to make the reaction happen.



Die primären Reaktionspfade des Singulett-Diphenylcarbens (DPC) in Gegenwart eines Lösungsmittels umfassen ein Intersystem Crossing zu einem Triplet (z.B. in reinem Acetonitril) und die Bildung eines Etherprodukts (in Alkoholen). Durch Kombination von ultraschneller Spektroskopie und molekulardynamischen Computersimulationen konnte die Reaktivität von DPC in Lösungsmittelgemischen bei Raumtemperatur aufgeklärt werden. Die beobachtete Dynamik verhält sich nicht wie eine Linearkombination jener Dynamiken mit reinen Lösungsmitteln, sondern die Effizienz bestimmter Reaktionskanäle variiert beträchtlich mit dem Mischverhältnis der Lösungsmittel. Obwohl für die Bildung des finalen Ethermoleküls formal nur ein einziges Methanolmolekül benötigt wird, erfolgt die Reaktion erst dann, wenn ein zweites Methanolmolekül zugegen ist. Hierbei gibt es zwei Szenarien: Im ersten trifft DPC zunächst auf ein einzelnes Methanolmolekül, wobei ein Komplex mit einer starken Wasserstoffbrücke gebildet wird, und später kommt ein weiteres hinzu welches die Insertionsreaktion auslöst. Im zweiten Szenario trifft DPC direkt auf einen Verbund von Methanolmolekülen, wobei ein Protonentransfer stattfindet, die Reaktion aber letztendlich mit einem anderen Methanolmolekül komplettiert wird. In beiden Fällen ist ein einzelnes Methanolmolekül für das Zustandekommen der Reaktion nicht ausreichend.

Simon Ebbinghaus

Chair of Physical Chemistry II – Laser Spectroscopy and Biophotonics

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225277; Fax.: ++49-(0)234-3214183

Email: simon.ebbinghaus@ruhr-uni-bochum.de;

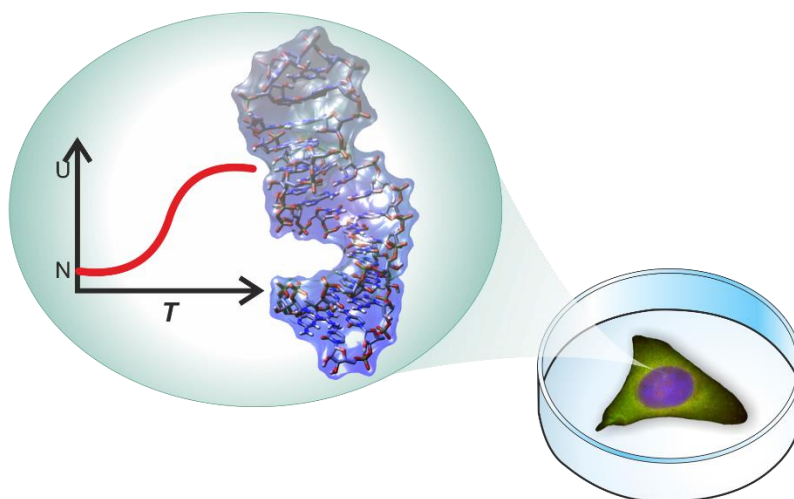
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2/ebbinghaus/index.html.en>

M. Gao#, D. Gnutt#, A. Orban, B. Appel, F. Righetti, R. Winter, F. Narberhaus, S. Müller, S. Ebbinghaus*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55(9), 3224-8.

#equal contributions / *corresponding author

RNA Hairpin Folding in the Crowded Cell.

Often, biomolecules are analyzed isolated in diluted environments, and it is questionable whether the results can be applied to the native cellular environment that is densely-packed. In this study, the folding of an RNA thermometer from the microorganism *Salmonella* was tested in different environmental conditions: in aqueous buffer, in buffer supplemented with co-solutes that are commonly used to mimic the cellular environment and directly inside the living cell. The results showed that RNA secondary structures, although heavily influenced by co-solute addition, are on average only marginally affected by the cell. Strikingly, a large variance was found between subcellular regions and between cellular populations hinting that dynamic changes of the cell might fine tune RNA folding to regulate biological processes.



The thermal stability of a RNA thermometer (4U RNA from Salmonella) was studied inside the living cell using laser induced temperature heating to gradually unfold the RNA hairpin. The fraction of unfolded RNA at each temperature was quantified by fluorescence microscopy.

Biomoleküle werden meist in isolierter Form in wässrigen Lösungen untersucht. Hierbei ist es fraglich, ob die Ergebnisse auf die native und dicht-gepackte zelluläre Umgebung übertragbar sind. In dieser Studie wurde die Faltung eines RNA Thermometers aus dem Mikroorganismus *Salmonella* in verschiedenen Bedingungen untersucht: In wässriger Lösung, in Anwesenheit verschiedener Ko-Solventien, die die zelluläre Umgebung nachstellen sollen, und direkt in der lebenden Zelle. Die Resultate zeigen, dass RNA Sekundärstrukturstabilität von der Zelle nur marginal beeinflusst wird, obwohl ein starker Einfluss der verschiedenen Ko-Solventien in wässriger Lösung gefunden wurde. Überraschenderweise konnte gezeigt werden, dass die RNA Faltung innerhalb einer Zelle sowie zwischen verschiedenen Zellen stark variiert. Dies deutet darauf hin, dass dynamische Änderungen der Zellumgebung ein wichtiger Faktor in der Regulierung biologischer Prozesse sein könnten.

Industrial Chemistry – Technische Chemie

Martin Muhler

Chair of Industrial Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

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

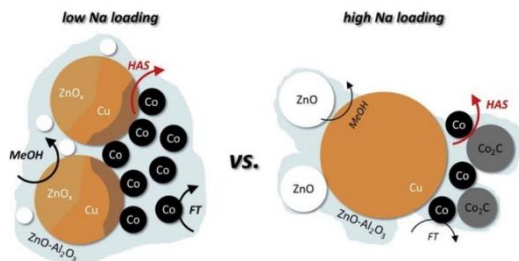
Email: muhler@techem.rub.de; <http://www.techem.rub.de>

Johan Anton, Janine Nebel, Huiqing Song, Christian Froese, Philipp Weide, Holger Ruland, Martin Muhler, Stefan Kaluza, *Journal of Catalysis*, 2016, 335, 175-186.

The effect of sodium on the structure–activity relationships of cobalt-modified Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts applied in the hydrogenation of carbon monoxide to higher alcohols.

Cobalt-copper based catalysts are considered an option for replacing noble-metal Rh-catalysts for higher alcohol synthesis (HAS). In this study a cobalt-modified Cu/ZnO/Al₂O₃ catalyst was prepared via co-precipitation. Then, loadings of up to 2.4 wt.% sodium were applied by means of wet impregnation to achieve an improved selectivity towards higher alcohols. After preparation, the catalyst powders were extensively characterized. Catalyst activity and degradation was measured for 40 h in a fixed-bed reactor under CO:H₂ (1:1) atmosphere at 280°C and 6 MPa and the reaction products were analyzed.

Na-loadings strongly influence the distribution of reaction products. For Na-loadings ≤ 0.4 wt.% a good selectivity for methanol and ethanol is achieved. Further increase to 0.8 wt.% Na promotes the formation of branched alcohols (mainly 1-propanol) and hydrocarbons. Even higher loadings (>0.8 wt.%) mitigate short-chained alcohols and hydrocarbons. Also, material with 2.4 wt.% Na displays an 70 % increase of CO conversion when compared to the Na-free material. The findings correlate with the microstructure of the analyzed catalysts. In the catalysts with low Na loadings the active sites of the gradually forming Cu-Co surface alloy determine the catalytic performance for HAS. In contrast, the presence of more than 0.8 wt.% Na promoted growth of the copper particles and led to fewer Cu-Co and Cu-ZnO interfaces. Instead, the formation of active Co-Co₂C and Co sites is favored, which in turn dominate HAS and hydrocarbon formation.



Katalysatoren auf Basis von Kobalt und Kupfer stellen eine Alternative zu Rh-Edelmetallkatalysatoren für die Synthese höherer Alkohole (HAS) dar. In dieser Studie wurde ein Kobalt-modifizierter Cu/ZnO/Al₂O₃ Katalysator mittels Kofällung hergestellt. Anschließend wurde das Material mit Natriumbeladungen von bis zu 2.4 Gew.% nassimprägniert, um eine verbesserte Selektivität für die Synthese höherer Alkohole zu erzielen. Nach der Herstellung wurden die Katalysatorpulver ausführlich charakterisiert. Die Aktivität und das Alterungsverhalten der Katalysatoren wurden über 40 h in einem Festbettreaktor unter Synthesebedingungen in CO:H₂ (1:1) bei 280°C und 6 MPa erfasst.

Die Na-Beladung bestimmt die Verteilung der Reaktionsprodukte. Beladungen ≤ 0.4 Gew.% Na führen zu einer guten Selektivität für Methanol und Ethanol. Eine weitere Erhöhung auf 0.8 Gew.% verstärkt die Reaktion zu verzweigten Alkoholen (vorwiegend 1-Propanol) und Kohlenwasserstoffen. Noch höhere Na-Beladungen >0.8 Gew.% unterdrücken die Entstehung kurzkettiger Alkohole und Kohlenwasserstoffe. Zusätzlich führt die Verwendung von 2.4 Gew.% Na zu einem Anstieg des CO-Umsatzes um 70 % (verglichen mit dem Na-freien Material). Die Ergebnisse korrelieren mit der Mikrostruktur der untersuchten Katalysatoren. Bei niedrigen Na-Beladungen bestimmt die allmähliche Ausbildung einer Cu-Co-Oberflächenlegierung die katalytische Aktivität für die HAS. Im Gegensatz dazu führt ein höherer Anteil an Na zu einem Wachstum der Kupferpartikel und zu weniger Cu-Co- bzw. Cu-ZnO-Grenzflächen. Stattdessen ist so die Ausbildung von aktiven Co-Co₂C- und Co-Zentren begünstigt, an welchen die HAS und die Kohlenwasserstoffsynthese ablaufen.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

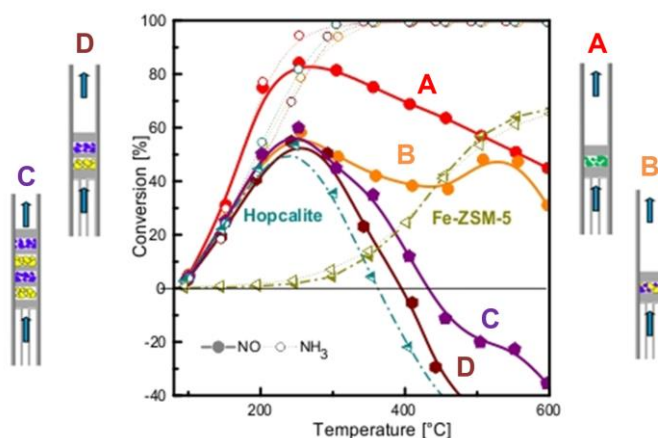
Tel.: +49-(0)234-3222088; FAX: +49-(0)234-3214115

email: Wolfgang.Gruenert@techem.rub.de; <http://www.techem.rub.de/>

M. Salazar, S. Hoffmann, O. P. Tkachenko, R. Becker, W. Grünert, *Appl. Catal. B* 182 (2016) 213-219.

Hybrid catalysts for the selective catalytic reduction of NO by NH₃: The influence of component separation on the performance of hybrid systems.

Selective catalytic reduction (SCR) of NO by NH₃, which is normally catalyzed by redox zeolites (Fe or Cu zeolites) can also be achieved at high rates by physical mixtures of an oxidation catalyst with an acidic zeolite. While SCR performance of these components may be poor, their interaction causes a drastic synergistic effect. This synergism was thought to be caused by NO₂ being formed over the oxidation catalyst reacting with NO and NH₃ in a very fast consecutive step (“fast SCR”) over the zeolite. We have now arranged mixtures with different distances between components, which resulted in breakdown of the effect. As an example, in mixtures between the oxidation component hopcalite (Cu-Mn mixed oxide) and Fe-ZSM-5, the synergy was drastic with components pressed together in particles (A, red), strongly suppressed when particles of the pure components were mixed (B, orange) and absent in layered configurations (C, D). This rejects NO₂ as an intermediate: the mechanism involves an unstable intermediate instead.



Die selektive katalytische Reduktion (SCR) von NO durch NH₃, normalerweise durch Redoxzeolithe (Cu-, Fe-Zeolithe) katalysiert, verläuft mit hoher Geschwindigkeit auch an physikalischen Mischungen eines Oxidationskatalysators mit einem sauren Zeolith. Trotz geringer SCR-Aktivität der Einzelkomponenten, schafft ihr Zusammenspiel drastische Synergismen. Diese wurden bisher auf NO₂ zurückgeführt, welches an der Oxidationskomponente entsteht und am Zeolith sehr schnell mit NO und NH₃ abreagieren kann („schnelle SCR“). Wir haben solche Mischungen mit unterschiedlichem Abstand der Komponenten zueinander arrangiert und einen Zusammenbruch des Effekts beobachtet. Beispielsweise erhält man beim Mischen der Oxidationskomponente Hopcalith (Cu-Mn-Mischoxid) mit Fe-ZSM-5 einen drastischen Synergismus, wenn die Komponenten zusammen in Partikeln verpresst sind (A, rote Kurve), er ist stark verringert, wenn Partikeln aus den reinen Komponenten gemischt werden (B, orange), und fehlt in Schichtanordnungen ganz (C, D). Dies schließt NO₂ als Intermediat aus: Der Mechanismus läuft über eine instabile Zwischenstufe.

Theoretical Chemistry – Theoretische Chemie

Dominik Marx

Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

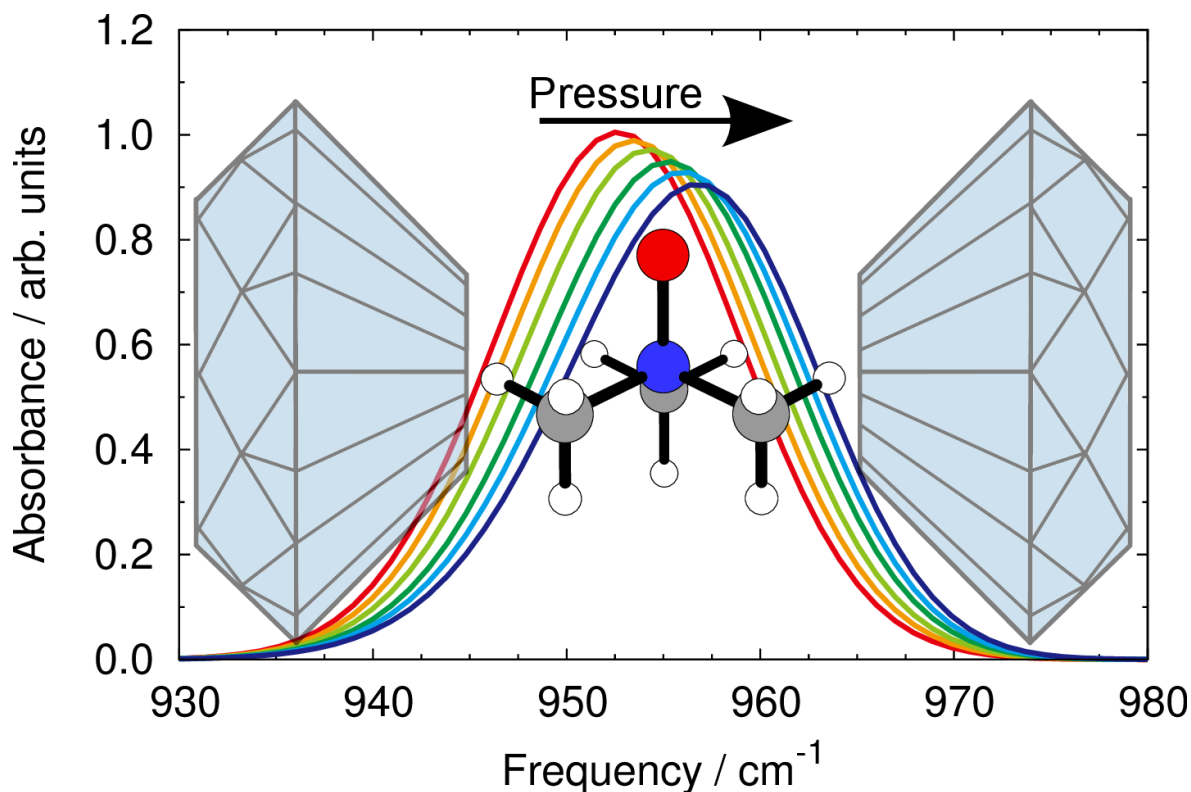
Tel.: ++49-(0)234-3228083; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

S. Imoto, P. Kibies, C. Rosin, R. Winter, S. M. Kast, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** (2016) 9534—9538.

Toward Extreme Biophysics: Deciphering the Infrared Response of Biomolecular Solutions at High Pressures.

In cooperation with colleagues in Dortmund, we have examined how the interactions between solvents and biomolecules change at high pressure. With theoretical infrared spectroscopy we have analysed the behaviour of the small molecule TMAO – short for trimethylamine oxide – in a pressure range from one bar to ten kilobars. These results could help us understand how organisms have adapted to life in the deep sea on the molecular level.



Wie sich die Wechselwirkungen zwischen Lösungsmittel und Biomolekülen bei hohem Druck verändern, haben wir in Zusammenarbeit mit Kollegen aus Dortmund untersucht. Mit theoretischer Infrarotspektroskopie analysierten wir das Verhalten des kleinen Moleküls TMAO – kurz für Trimethylaminoxid – in einem Druckbereich von einem Bar bis zehn Kilobar. Unsere Ergebnisse könnten helfen zu verstehen, wie Organismen auf molekularer Ebene an das Leben in der Tiefsee angepasst sind.

Christof Hättig

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

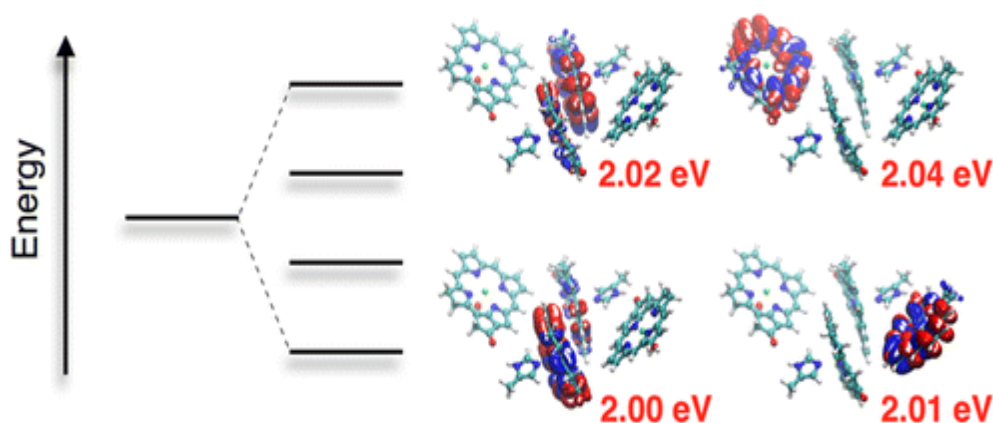
Tel.: +49 (0)234 32 28082; Fax.: +49 (0)234 32 1404

Email: Christof.Haettig@rub.de; <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de>

C.-M. Suomivuori, N.O.C. Winter, C. Hättig, D. Sundholm, V.R.I. Kaila, *J. Chem. Theory Comput.* 2016, 12, 2644-2661.

Exploring the Light-Capturing Properties of Photosynthetic Chlorophyll Clusters Using Large-Scale Correlated Calculations

We studied the excited states of monomeric, dimeric and tetrameric chlorophyll models of the Chl/BChl pigment centers P700 and P680/P870 of type I and type II photosystems with the correlated ab initio method ADC(2). In combination with the reduced virtual space approach and the recently developed Laplace-transformed algorithm for spin-opposite-scaled ADC(2) variant it became for the first time possible to address multimeric effects with a correlated wavefunction method and accurate basis sets. We obtained vertical excitation energies of 2.00-2.07 and 1.52-1.62 eV for the P680/P700 and the P870 pigment models, respectively, which agree well with the experimental absorption maxima of 1.82, 1.77, and 1.43 eV for P680, P700 and P870. The chromophore stacking interaction is found to strongly influence the electron localization properties of the light absorbing pigments, which may help to elucidate the mechanistic details for the charge separation process in type I and type II photosystems.



Splitting of the energy levels that arise from the lowest excited electronic of chlorophyll in the tetrameric complex. The results have been obtained with an in-house developed method.

In dieser Arbeit wurden die angeregten Zustände von monomeren, dimeren und tetrameren Chlorophyll-Modellen der Chl/BChl-Pigmentzentren P700 und P680/P870 der Typ I- und Typ II-Photosysteme mit der korrelierten ab initio-Methode ADC(2) untersucht. In Kombination mit dem "Reduced Virtual Space"-Ansatz und dem kürzlich entwickelten Laplace-transformierten Algorithmus für die Spin-Opposite-Scaled-Variante von ADC(2) war es erstmals möglich multimere Effekte mit einer korrelierten Wellenfunktionsmethode und genauen Basissätzen zu untersuchen. Wir erhielten vertikale Anregungsenergien von 2.00-2.07 und 1.52-1.62 eV für, respektive, die Modelle der Pigmentzentren P680/P700 und P870, die gut mit den experimentellen Absorptionmaxima bei 1.82, 1.77 und 1.43 eV für P680, P700 und P870 übereinstimmen. Die Wechselwirkung zwischen Chromophoren im Komplex haben einen großen Einfluss auf die Lokalisierung der Elektronen in den lichtabsorbierenden Pigmenten. Die beobachteten Ergebnisse könnten helfen mechanistische Details der Ladungstrennung in den Photosystemen I und II zu verstehen.

Lars Schäfer

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

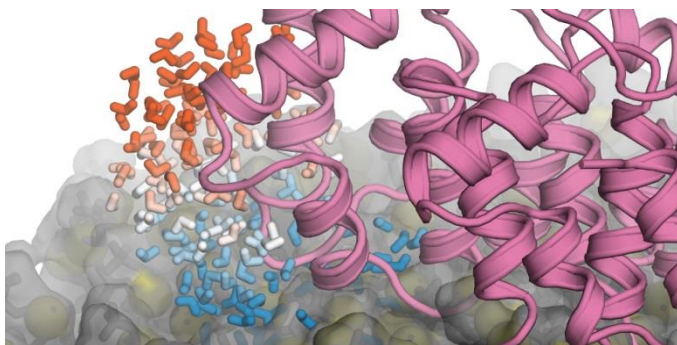
Tel.: + 49 (0)234 32 21582

Email: lars.schaefer@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.molecular-simulation.org>

O. Fisette, C. Päslock, R. Barnes, J. M. Isas, R. Langen, M. Heyden, S. Han, L. Schäfer,
J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 11526-11535.

Hydration Dynamics of a Peripheral Membrane Protein

Water has been coined the solvent of life, because it is the ubiquitous solvent in biological systems. Biomolecules such as proteins and their surrounding water shells are dynamically coupled, and the slow-down of water molecules in the vicinity of biomolecules can be important for their function. For example, slower diffusion can keep binding partners in place and ease biomolecular recognition and reactions. We studied the water dynamics in the hydration shells of the membrane-bound protein annexin B12 (see Figure) using a combination of large-scale molecular dynamics (MD) computer simulations and nuclear magnetic resonance (NMR) relaxometry enhanced by Overhauser dynamic nuclear polarization (ODNP) experiments. We show at atomic-level resolution that slowed-down water motions in the vicinity of the lipid membrane is extended by the presence of a membrane-bound protein, up to a distance of about 1 nm above the protein. Close to the membrane surface, electrostatic interactions between the water molecules and the lipid head-groups heavily slow down water dynamics, whereas the protein-induced retardation of water dynamics is much weaker and dominates only at distances beyond 1 nm away from the membrane surface. Furthermore, based on an analysis of intermolecular vibrations of the water network, we demonstrate a water entropy gradient from the membrane surface toward the bulk water. These results might have general implications for processes that take place at the membrane surface and involve a rearrangement of water molecules, such as molecular recognition, binding, and protein-protein interactions.



The annexin B12 protein (purple) binds to a membrane surface (bottom). The water at the protein/membrane interface has slower diffusion dynamics and reduced entropy compared to bulk water. The magnitude of these changes depends on the distance to the membrane, as illustrated by the color gradient of the shown individual water molecules.

Jörg Behler

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Current address: Institut für Physikalische Chemie, Universität Göttingen, D-37077 Göttingen

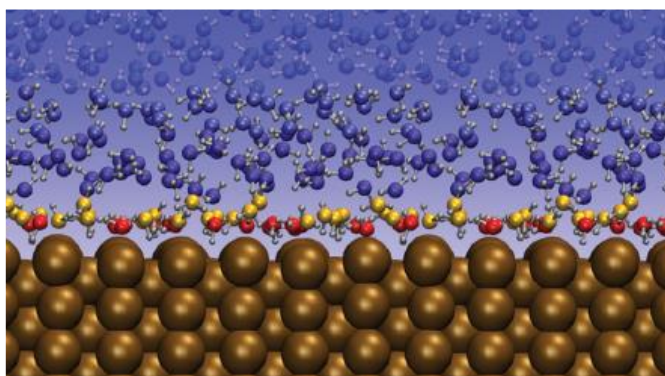
Tel.: ++49-(0)551-3912683; Fax.: ++49-(0)551-3919070

Email: joerg.behler@uni-goettingen.de; <http://www.uni-goettingen.de/de/556198.html>

S. Kondati Natarajan, J. Behler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2016, 18, 28704-28725.

Neural network molecular dynamics simulations of solid-liquid interfaces:
water at low-index copper surfaces.

Solid-liquid interfaces play a central role in important research fields like electrochemistry and heterogeneous catalysis. Still, surprisingly little is known about the structural and dynamical properties of the interfacial water layers, because experimentally these molecules are very difficult to investigate. Detailed insights can in principle be gained by molecular dynamics (MD) simulations, but the computational costs of ab initio MD are too high to perform converged simulations, while efficient empirical potentials lack the required accuracy. Here we develop a high-dimensional neural network potential, which allows to carry out large-scale simulations of solid-liquid interfaces with density-functional theory accuracy, using the low-index surfaces of copper as prototypical cases. In systematic convergence tests we identify the required system size, for which we then perform extended simulations to characterize the properties of the interfacial water molecules. While the overall interaction between copper and water is very weak, we find the strongest interaction at the Cu(110) surface.

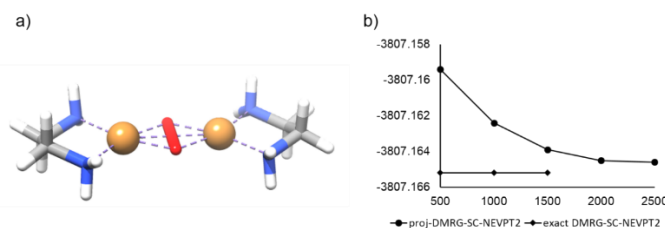


Interfacial water at the water-copper interface.

Fest-flüssig Grenzflächen spielen eine zentrale Rolle in wichtigen Forschungsfeldern wie der Elektrochemie und der heterogenen Katalyse. Dennoch ist bisher überraschend wenig über die strukturellen und dynamischen Eigenschaften der Wassermoleküle im Bereich der Grenzfläche bekannt, da diese Moleküle experimentell nur schwer zu untersuchen sind. Detaillierte Informationen könnten im Prinzip durch ab initio Molekulardynamik Simulationen erhalten werden, jedoch sind die hierfür erforderlichen Rechenzeiten zu hoch um konvergierte Rechnungen durchzuführen, während empirische Potentiale nicht die erforderliche Genauigkeit aufweisen. In dieser Arbeit entwickeln wir mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen ein hochdimensionales Potential, das die Durchführung großskaliger Simulationen der fest-flüssig Grenzfläche mit der Genauigkeit von Dichtefunktionaltheorie Rechnungen erlaubt, für eine Reihe von Kupferoberflächen in Kontakt mit Wasser. In systematischen Konvergenztests ermitteln wir die erforderliche Systemgröße, für die wir dann umfangreiche Simulationen zur Charakterisierung der Eigenschaften des Wassers an der Grenzfläche durchführen. Generell ist die Wechselwirkung zwischen Wasser und Kupferoberflächen sehr schwach, wobei die stärkste Wechselwirkung für die Cu(110) Oberfläche auftritt.

M. Roemelt, S. Guo, G. K.-L. Chan *J. Chem. Phys.* 2016, 144, 204113.
A projected approximation to strongly contracted N-electron valence perturbation theory for DMRG wavefunctions

In the last decade the *ab initio* density matrix renormalization group (DMRG) has been shown to provide a reasonable and accurate alternative to complete active space (CAS) methods as basis for molecular multireference calculations. A great advantage of DMRG is that it approximately solves a problem whose complexity scales exponentially with increasing system size by optimizing only a polynomial number of parameters. Owing to this favorable behavior DMRG is able to treat large active spaces on the order of 20-80 orbitals. However, quantitative accuracy is only reached if dynamic electron correlation effects are considered, too. Therefore we have developed a novel approach to the combination of DMRG and strongly contracted second order N-electron valence perturbation theory (SC-NEVPT2) for quantum chemical multireference calculations. The main objective of this approach is to lower the cost to treat systems with large active spaces and large orbital spaces with a moderate and controllable accuracy. As demonstrated for a dimeric Cu cluster the total energy (DMRG + SC-NEVPT2) converges rapidly and smoothly towards the exact value with increasing bond dimension, which is a user-defined control parameter.



Ball and stick visualization of $[\text{Cu}_2\text{O}_2(\text{en})_2]^{2+}$ (a) and the total energy calculated with the projected DMRG-NEVPT2 with respect to the bond dimension M (b).

In den letzten Jahren hat sich die *ab initio* density matrix renormalization group (DMRG) als sinnvolle und genaue Alternative zu complete active space (CAS) Ansätzen im Rahmen von molekularen Multireferenzrechnungen erwiesen. Ihr großer Vorteil besteht darin, dass sie eine nur polynomial ansteigende Anzahl von Parametern optimiert um ein Problem zu lösen, dessen Komplexität exponentiell mit der Größe des Systems wächst. Aufgrund dieses vorteilhaften Skalierungsverhaltens ist die DMRG in der Lage große aktive Räume von 20-80 Orbitalen zu beschreiben. Nichtsdestotrotz können Ergebnisse mit chemischer Genauigkeit nur erreicht werden wenn dynamische Elektronenkorrelation in die Rechnung miteinbezogen wird. Zu diesem Zweck haben wir einen neuartigen Ansatz für die Kombination von DMRG und der stark kontrahierten Variante der n-electron valence perturbation theory (SC-NEVPT2) in quantenchemischen Multireferenzrechnungen entwickelt. Das Hauptziel dieses Ansatzes war die Verminderung der benötigten Computer-Ressourcen um große aktive Räume und große Orbitalräume mit einer kontrollierbaren Genauigkeit beschreiben zu können. Dieses Ziel konnte durch die Projektion von einigen Störfunktionen auf einen reduzierten Hilbertraum erreicht werden. Wie für einen dimerischen Cu-Komplex gezeigt werden konnte, konvergiert die totale Energie (DMRG+SC-NEVPT2) bei steigender bond dimension, welche ein benutzerdefinierter Kontrollparameter ist, rapide und ebenmäßig zum exakten Wert.

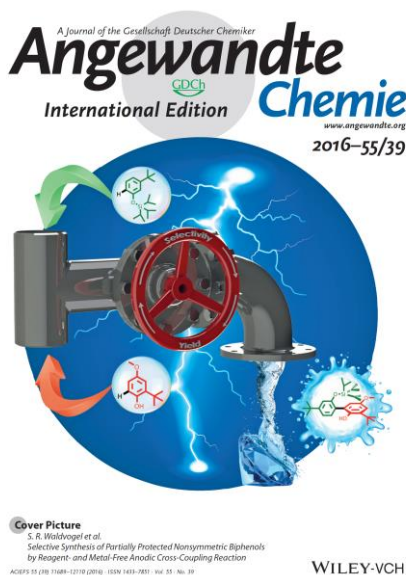
Robert Franke

Evonik Performance Materials GmbH, Paul-Baumann-Straße 1, D-45772 Marl
Tel.: ++49-(0)2365-492899; FAX: ++49-(0)2365-49802899
Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
email: robert.franke@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de>

A. Wiebe, D. Schollmeyer, K. M. Dyballa, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, (2016), 11801-11805

Selective Synthesis of Partially Protected Nonsymmetric Biphenols by Reagent- and Metal-Free Anodic Cross-Coupling Reaction

Die selektive Synthese teilgeschützter unsymmetrischer 2,2'-Biphenole gelingt in hohen Ausbeuten an isoliertem Produkt mittels elektroorganischer Synthese. Der Einsatz von elektrischem Strom als Oxidationsmittel ist reagensfrei und verhindert somit die Bildung von Reagensabfällen. Das sichere Verfahren eignet sich für eine einfache ungeteilte Elektrolysezelle sowie für Reaktionen in großem Maßstab. Die Verwendung von O-Silylgeschützten Phenolen resultiert sowohl in gesteigerten Ausbeuten als auch in erhöhten Selektivitäten bei der Synthese der unsymmetrischen 2,2'-Biphenole. Die Nutzung sperriger Silylgruppen zum Schützen der OH-Gruppe macht das Produkt weniger anfällig für Folgeoxidationen. Teilgeschützte 2,2'-Biphenole sind vielseitige Ausgangsverbindungen, die üblicherweise nur aufwändig in geringen Ausbeuten zugänglich sind. Diese Synthesestrategie ermöglicht eine Vielzahl neuer Substratkombinationen für oxidative Kreuzkupplungen.



The oxidative cross-coupling of aromatic substrates without the necessity of leaving groups or catalysts is described. The selective formation of partially protected nonsymmetric 2,2'-biphenols via electroorganic synthesis was accomplished with a high yield of isolated product. Since electric current is employed as the terminal oxidant, the reaction is reagent-free; no reagent waste is generated as only electrons are involved. The reaction is conducted in an undivided cell, and is suitable for scale-up and inherently safe. The implementation of O-silyl-protected phenols in this transformation results in both significantly enhanced yields and higher selectivity for the desired nonsymmetric 2,2'-biphenols. The use of a bulky silyl group to block one hydroxyl moiety makes the final product less prone to oxidation. Furthermore, the partially silylprotected 2,2'-biphenols are versatile building blocks that usually require tedious or low-yielding synthetic pathways. Additionally, this strategy facilitates a large variety of new substrate combinations for oxidative cross-coupling reactions.

Didactics of Chemistry – Didaktik der Chemie

Katrin Sommer

Chair of didactics of chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: 0234/32-27522; Fax.: 0234/32-14085

Email: katrin.sommer@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/didachem/index.html>

H. Steff, Th. Ph. Schröder, S. Buse, L. Bär, F. Vogel, M. Heller, K. Sommer, *Chemie in unserer Zeit* 1/2016, 50, 18 – 25.

Analytik rund ums Holi-Pulver. Indisches Ritual und zeitgemäße Ausbildung

These days, people use starch-containing, coloured powder to throw it at each other during Holi parties – events based on a Hindu ritual. Fire departments warn that sparks, for example from cigarettes, could lead to dust explosions. The explosiveness of dusts depends on a number of parameters. Composition, water content and particle size are important ones. This study examines these parameters for Holi powders from a German and an Indian provider. Composition proves to be the main influence on explosiveness. The “Indian” Holi powder is made up from over 90 % combustible (corn-)starch. The “German” product is more balanced containing starch and inert substances. Model mixtures are used to determine explosiveness. Mixtures with a starch content of over 90 % turn out to be highly explosive. All experiments are conducted with a low-cost Hartmann apparatus.



Holi, das Fest der Farben. Ursprünglich wurden die Farbpulver aus Pflanzenblüten, -blättern oder -wurzeln hergestellt; heute verwendet man meist synthetische Farben. [Bild: Fotolia].

Bei Holi-Parties wird – in Anlehnung an ein hinduistisches Ritual – ein stärkehaltiges gefärbtes Effekt-Pulver (Holi-Pulver) in Menschenmassen geworfen. Die Feuerwehr warnt: Durch Funken, z.B. von Zigaretten, könnte es zur Staubexplosion kommen. Wichtige Einflussparameter, die das Explosionsverhalten von Stäuben bestimmen, sind die stoffliche Zusammensetzung von Stäuben, der Wassergehalt und die Feinheit. Diese Parameter werden an Holi-Pulvern eines deutschen sowie eines indischen Anbieters untersucht. Der Parameter stoffliche Zusammensetzung erweist sich als zentral. Die Holi-Pulver des indischen Anbieters bestehen zu über 90 % aus brennbarer (Mais-)Stärke. Die Holi-Pulver des deutschen Anbieters sind so ausbalanciert, dass sowohl Stärke als auch Inertstoffe enthalten sind. Mit Hilfe von Modell-Stoffgemischen wird ermittelt, dass die Explosionsfähigkeit der Stoffgemische mit zunehmendem Inertstoffanteil deutlich herabgesetzt wird. Alle Zündversuche werden mit einer für Schule und Ausbildung entwickelten Low-Cost-Hartmann-Apparatur durchgeführt.

List of publications in 2016

Analytical Chemistry – Analytische Chemie

- Maljusch, A.; Conradi, O.; Hoch, S.; Blug, M.; Schuhmann, W. Advanced Evaluation of the Long-Term Stability of Oxygen Evolution Electrocatalysts. *Analytical Chemistry* **2016**, 88 (15), 7597–7602.
- Masa, J.; Weide, P.; Peeters, D.; Sinev, I.; Xia, W.; Sun, Z.; Somsen, C.; Muhler, M.; Schuhmann, W. Amorphous Cobalt Boride (Co₂B) as a Highly Efficient Nonprecious Catalyst for Electrochemical Water Splitting: Oxygen and Hydrogen Evolution. *Advanced Energy Materials* **2016**, 6 (6), 1502313.
- Pankratov, D.; Conzuelo, F.; Pinyou, P.; Alsaoub, S.; Schuhmann, W.; Shleev, S. A Nernstian Biosupercapacitor. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (49), 15434–15438.
- Bandarenka, A. S.; Williams, R.; Plumeré, N. Anodic Desorption Monitored by Voltammetric and Gravimetric Measurements for Fast Estimation of Surface Coverage of Complex Organic Molecules on Au Electrodes. *Electroanalysis* **2016**, 28 (10), 2382–2388.
- Masa, J.; Ventosa, E.; Schuhmann, W. Application of Scanning Electrochemical Microscopy (SECM) to Study Electrocatalysis of Oxygen Reduction by MN₄-Macrocyclic Complexes. In *Electrochemistry of N₄ Macrocyclic Metal Complexes*; Zagal, J. H., Bedioui, F., Eds.; Springer International Publishing: Cham, 2016; pp 103–141.
- Elumeeva, K.; Masa, J.; Tietz, F.; Yang, F.; Xia, W.; Muhler, M.; Schuhmann, W. A Simple Approach towards High-Performance Perovskite-Based Bifunctional Oxygen Electrocatalysts. *ChemElectroChem* **2016**, 3 (1), 138–143.
- Efrati, A.; Lu, C.-H.; Michaeli, D.; Nechushtai, R.; Alsaoub, S.; Schuhmann, W.; Willner, I. Assembly of Photo-Bioelectrochemical Cells Using Photosystem I-Functionalized Electrodes. *Nature Energy* **2016**, 1 (2), 15021.
- Garcia, G.; Schuhmann, W.; Ventosa, E. A Three-Electrode, Battery-Type Swagelok Cell for the Evaluation of Secondary Alkaline Batteries: The Case of the Ni-Zn Battery. *ChemElectroChem* **2016**, 3 (4), 592–597.
- Bauer, S.; Finlay, J. A.; Thomé, I.; Nolte, K.; Franco, S. C.; Ralston, E.; Swain, G. E.; Clare, A. S.; Rosenhahn, A. Attachment of Algal Cells to Zwitterionic Self-Assembled Monolayers Comprised of Different Anionic Compounds. *Langmuir* **2016**, 32 (22), 5663–5671.
- Ganassin, A.; Maljusch, A.; Colic, V.; Spanier, L.; Brandl, K.; Schuhmann, W.; Bandarenka, A. Benchmarking the Performance of Thin-Film Oxide Electrocatalysts for Gas Evolution Reactions at High Current Densities. *ACS Catalysis* **2016**, 6 (5), 3017–3024.
- Plumeré, N.; Nowaczyk, M. M. Biophotoelectrochemistry of Photosynthetic Proteins. In *Biophotoelectrochemistry: From Bioelectrochemistry to Biophotovoltaics*; Jeuken, L. J. C., Ed.; Springer International Publishing: Cham, 2016; Vol. 158, pp 111–136.
- Eßmann, V.; Barwe, S.; Masa, J.; Schuhmann, W. Bipolar Electrochemistry for Concurrently Evaluating the Stability of Anode and Cathode Electrocatalysts and the Overall Cell Performance during Long-Term Water Electrolysis. *Analytical Chemistry* **2016**, 88 (17), 8835–8840.
- Hanke-Roos, M.; Meseck, G. R.; Rosenhahn, A. Catch Bond Interaction Allows Cells to Attach to Strongly Hydrated Interfaces. *Biointerphases* **2016**, 11 (1), 018905.

- Hanke-Roos, M.; Fuchs, K.; Maleschlijski, S.; Sleeman, J.; Orian-Rousseau, V.; Rosenhahn, A. CD44 Mediates the Catch-Bond Activated Rolling of HEPG2 Iso Epithelial Cancer Cells on Hyaluronan. *Cell Adhesion & Migration* **2016**, 1–12.
- Chen, X.; Botz, A. J. R.; Masa, J.; Schuhmann, W. Characterisation of Bifunctional Electrocatalysts for Oxygen Reduction and Evolution by Means of SECM. *Journal of Solid State Electrochemistry* **2016**, 20 (4), 1019–1027.
- Aijaz, A.; Masa, J.; Rösler, C.; Xia, W.; Weide, P.; Botz, A. J. R.; Fischer, R. A.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Co@Co₃O₄ Encapsulated in Carbon Nanotube-Grafted Nitrogen-Doped Carbon Polyhedra as an Advanced Bifunctional Oxygen Electrode. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (12), 4087–4091.
- Sun, Z.; Madej, E.; Genç, A.; Muhler, M.; Arbiol, J.; Schuhmann, W.; Ventosa, E. Demonstrating the Steady Performance of Iron Oxide Composites over 2000 Cycles at Fast Charge-Rates for Li-Ion Batteries. *Chem. Commun.* **2016**, 52 (46), 7348–7351.
- Pinyou, P.; Ruff, A.; Pöller, S.; Ma, S.; Ludwig, R.; Schuhmann, W. Design of an Os Complex-Modified Hydrogel with Optimized Redox Potential for Biosensors and Biofuel Cells. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (15), 5319–5326.
- Clausmeyer, J.; Wilde, P.; Löffler, T.; Ventosa, E.; Tschulik, K.; Schuhmann, W. Detection of Individual Nanoparticle Impacts Using Etched Carbon Nanoelectrodes. *Electrochemistry Communications* **2016**, 73, 67–70.
- Estrada-Vargas, A.; Jambrec, D.; Kayran, Y. U.; Kuznetsov, V.; Schuhmann, W. Differentiation between Single- and Double-Stranded DNA through Local Capacitance Measurements. *ChemElectroChem* **2016**, 3 (6), 855–857.
- Jambrec, D.; Haddad, R.; Lauks, A.; Gebala, M.; Schuhmann, W.; Kokoschka, M. DNA Intercalators for Detection of DNA Hybridisation: SCS(MI)-MP2 Calculations and Electrochemical Impedance Spectroscopy. *ChemPlusChem* **2016**, 81 (7), 604–612.
- Masa, J.; Schuhmann, W. Electrocatalysis and Bioelectrocatalysis – Distinction without a Difference. *Nano Energy* **2016**, 29, 466–475.
- Gutkowski, R.; Schuhmann, W. Electrochemically Induced Sol–gel Deposition of ZnO Films on Pt-Nanoparticle Modified FTO Surfaces for Enhanced Photoelectrocatalytic Energy Conversion. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (16), 10758–10763.
- Saw, E. N.; Grasmik, V.; Rurainsky, C.; Epple, M.; Tschulik, K. Electrochemistry at Single Bimetallic Nanoparticles – Using Nano Impacts for Sizing and Compositional Analysis of Individual AgAu Alloy Nanoparticles. *Faraday Discuss.* **2016**, 193, 327–338.
- Dobrzeniecka, A.; Zeradjanin, A. R.; Masa, J.; Blicharska, M.; Wintrich, D.; Kulesza, P. J.; Schuhmann, W. Evaluation of Kinetic Constants on Porous, Non-Noble Catalyst Layers for Oxygen Reduction – A Comparative Study between SECM and Hydrodynamic Methods. *Catalysis Today* **2016**, 262, 74–81.
- Shimizu, K.; Tschulik, K.; Compton, R. G. Exploring the Mineral–water Interface: Reduction and Reaction Kinetics of Single Hematite (α -Fe₂O₃) Nanoparticles. *Chem. Sci.* **2016**, 7 (2), 1408–1414.
- Yang, M.; Batchelor-McAuley, C.; Moreira Gonçalves, L.; Lima, C. F. R. A. C.; Vyskočil, V.; Tschulik, K.; Compton, R. G. Ferrocene Aryl Derivatives for the Redox Tagging of Graphene Nanoplatelets. *Electroanalysis* **2016**, 28 (1), 197–202.
- Maleschlijski, S.; Sendra, G. H.; Aldred, N.; Clare, A. S.; Liedberg, B.; Grunze, M.; Ederth, T.; Rosenhahn, A. Imaging SPR Combined with Stereoscopic 3D Tracking to Study Barnacle Cyprid–surface Interactions. *Surface Science* **2016**, 643, 172–177.
- Gutkowski, R.; Peeters, D.; Schuhmann, W. Improved Photoelectrochemical Performance of Electrodeposited Metal-Doped BiVO₄ on Pt-Nanoparticle Modified FTO Surfaces. *J. Mater. Chem. A* **2016**, 4 (20), 7875–7882.

- Estrada-Vargas, A.; Bandarenka, A.; Kuznetsov, V.; Schuhmann, W. In Situ Characterization of Ultrathin Films by Scanning Electrochemical Impedance Microscopy. *Analytical Chemistry* **2016**, *88* (6), 3354–3362.
- Ishige, Y.; Klink, S.; Schuhmann, W. Intercalation Compounds as Inner Reference Electrodes for Reproducible and Robust Solid-Contact Ion-Selective Electrodes. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (15), 4831–4835.
- Karnbach, F.; Yang, X.; Mutschke, G.; Fröhlich, J.; Eckert, J.; Gebert, A.; Tschulik, K.; Eckert, K.; Uhlemann, M. Interplay of the Open Circuit Potential-Relaxation and the Dissolution Behavior of a Single H₂ Bubble Generated at a Pt Microelectrode. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, *120* (28), 15137–15146.
- Conzuelo, F.; Grützke, S.; Stratmann, L.; Pingarrón, J. M.; Schuhmann, W. Interrogation of Immunoassay Platforms by SERS and SECM after Enzyme-Catalyzed Deposition of Silver Nanoparticles. *Microchimica Acta* **2016**, *183* (1), 281–287.
- Marquitan, M.; Clausmeyer, J.; Actis, P.; Córdoba, A. L.; Korchev, Y.; Mark, M. D.; Herlitze, S.; Schuhmann, W. Intracellular Hydrogen Peroxide Detection with Functionalised Nanoelectrodes. *ChemElectroChem* **2016**, *3* (12), 2125–2129.
- Senkbeil, T.; Mohamed, T.; Simon, R.; Batchelor, D.; Di Fino, A.; Aldred, N.; Clare, A. S.; Rosenhahn, A. In Vivo and in Situ Synchrotron Radiation-Based μ -XRF Reveals Elemental Distributions during the Early Attachment Phase of Barnacle Larvae and Juvenile Barnacles. *Anal Bioanal Chem* **2016**, *408* (5), 1487–1496.
- Valtiner, M.; Erbe, A.; Rosenhahn, A. Ions and Solvation at Biointerfaces. *Biointerphases* **2016**, *11* (1), 018801.
- Kuznetsov, V.; Estrada-Vargas, A.; Maljusch, A.; Berkes, B. B.; Bandarenka, A. S.; Souto, R. M.; Schuhmann, W. Kinetic Passivation Effect of Localized Differential Aeration on Brass. *ChemPlusChem* **2016**, *81* (1), 49–57.
- Tymoczko, J.; Calle-Vallejo, F.; Schuhmann, W.; Bandarenka, A. S. Making the Hydrogen Evolution Reaction in Polymer Electrolyte Membrane Electrolysers Even Faster. *Nature Communications* **2016**, *7*, 10990.
- Joshi, A.; Schuhmann, W.; C. Nagaiah, T. Mesoporous Nitrogen Containing Carbon Materials for the Simultaneous Detection of Ascorbic Acid, Dopamine and Uric Acid. *Sensors and Actuators B: Chemical* **2016**, *230*, 544–555.
- Konkana, B.; Masa, J.; Xia, W.; Muhler, M.; Schuhmann, W. MoSSe@reduced Graphene Oxide Nanocomposite Heterostructures as Efficient and Stable Electrocatalysts for the Hydrogen Evolution Reaction. *Nano Energy* **2016**, *29*, 46–53.
- Clausmeyer, J.; Schuhmann, W. Nanoelectrodes: Applications in Electrocatalysis, Single-Cell Analysis and High-Resolution Electrochemical Imaging. *TrAC Trends in Analytical Chemistry* **2016**, *79*, 46–59.
- Clausmeyer, J.; Masa, J.; Ventosa, E.; Öhl, D.; Schuhmann, W. Nanoelectrodes Reveal the Electrochemistry of Single Nickelhydroxide Nanoparticles. *Chem. Commun.* **2016**, *52* (11), 2408–2411.
- Stein, H. S.; Gutkowski, R.; Siegel, A.; Schuhmann, W.; Ludwig, A. New Materials for the Light-Induced Hydrogen Evolution Reaction from the Cu-Si-Ti-O System. *J. Mater. Chem. A* **2016**, *4* (8), 3148–3152.
- Hiltrop, D.; Masa, J.; Maljusch, A.; Xia, W.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Pd Deposited on Functionalized Carbon Nanotubes for the Electrooxidation of Ethanol in Alkaline Media. *Electrochemistry Communications* **2016**, *63*, 30–33.
- Konkana, B.; Junge Puring, K.; Sinev, I.; Piontek, S.; Khavryuchenko, O.; Dürholt, J. P.; Schmid, R.; Tüysüz, H.; Muhler, M.; Schuhmann, W.; Apfel, U.-P. Pentlandite Rocks as Sustainable and Stable Efficient Electrocatalysts for Hydrogen Generation. *Nature Communications* **2016**, *7*, 12269.

- Elumeeva, K.; Masa, J.; Sierau, J.; Tietz, F.; Muhler, M.; Schuhmann, W. Perovskite-Based Bifunctional Electrocatalysts for Oxygen Evolution and Oxygen Reduction in Alkaline Electrolytes. *Electrochimica Acta* **2016**, *208*, 25–32.
- Nowaczyk, M. M.; Plumeré, N. Photosynthesis: Short Circuit at the Chlorophyll. *Nature Chemical Biology* **2016**, *12* (12), 990–991.
- Jambrec, D.; Conzuelo, F.; Estrada-Vargas, A.; Schuhmann, W. Potential-Pulse-Assisted Formation of Thiol Monolayers within Minutes for Fast and Controlled Electrode Surface Modification. *ChemElectroChem* **2016**, *3* (9), 1484–1489.
- Xie, K.; Xia, W.; Masa, J.; Yang, F.; Weide, P.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Promoting Effect of Nitrogen Doping on Carbon Nanotube-Supported RuO₂ Applied in the Electrocatalytic Oxygen Evolution Reaction. *Journal of Energy Chemistry* **2016**, *25* (2), 282–288.
- Sokol, K. P.; Mersch, D.; Hartmann, V.; Zhang, J. Z.; Nowaczyk, M. M.; Rögner, M.; Ruff, A.; Schuhmann, W.; Plumeré, N.; Reisner, E. Rational Wiring of Photosystem II to Hierarchical Indium Tin Oxide Electrodes Using Redox Polymers. *Energy Environ. Sci.* **2016**, *9* (12), 3698–3709.
- Bauer, S.; Alles, M.; Arpa-Sancet, M. P.; Ralston, E.; Swain, G. W.; Aldred, N.; Clare, A. S.; Finlay, J. A.; Callow, M. E.; Callow, J. A.; Rosenhahn, A. Resistance of Amphiphilic Polysaccharides against Marine Fouling Organisms. *Biomacromolecules* **2016**, *17* (3), 897–904.
- Kayran, Y. U.; Eßmann, V.; Grützke, S.; Schuhmann, W. Selection of Highly SERS-Active Nanostructures from a Size Gradient of Au Nanovoids on a Single Bipolar Electrode. *ChemElectroChem* **2016**, *3* (3), 399–403.
- Vöpel, T.; Ning Saw, E.; Hartmann, V.; Williams, R.; Müller, F.; Schuhmann, W.; Plumeré, N.; Nowaczyk, M.; Ebbinghaus, S.; Rögner, M. Simultaneous Measurements of Photocurrents and H₂O₂ Evolution from Solvent Exposed Photosystem 2 Complexes. *Biointerphases* **2016**, *11* (1), 019001.
- Li, X.; Batchelor-McAuley, C.; Whitby, S. A. I.; Tschulik, K.; Shao, L.; Compton, R. G. Single Nanoparticle Voltammetry: Contact Modulation of the Mediated Current. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (13), 4296–4299.
- von Gundlach, A. R.; Garamus, V. M.; Gorniak, T.; Davies, H. A.; Reischl, M.; Mikut, R.; Hilpert, K.; Rosenhahn, A. Small Angle X-Ray Scattering as a High-Throughput Method to Classify Antimicrobial Modes of Action. *Biochim. Biophys. Acta* **2016**, *1858* (5), 918–925.
- Zhang, Y.; Clausmeyer, J.; Babakinejad, B.; López Córdoba, A.; Ali, T.; Shevchuk, A.; Takahashi, Y.; Novak, P.; Edwards, C.; Lab, M.; Gopal, S.; Chiappini, C.; Anand, U.; Magnani, L.; Coombes, R. C.; Gorelik, J.; Matsue, T.; Schuhmann, W.; Klennerman, D.; Sviderskaya, E. V.; Korchev, Y. Spearhead Nanometric Field-Effect Transistor Sensors for Single-Cell Analysis. *ACS Nano* **2016**, *10* (3), 3214–3221.
- Temerk, Y. M.; Ibrahim, H. S. M.; Schuhmann, W. Square Wave Cathodic Adsorptive Stripping Voltammetric Determination of the Anticancer Drugs Flutamide and Irinotecan in Biological Fluids Using Renewable Pencil Graphite Electrodes. *Electroanalysis* **2016**, *28* (2), 372–379.
- Dittmer, A.; Menze, J.; Mei, B.; Strunk, J.; Luftman, H. S.; Gutkowski, R.; Wachs, I. E.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Surface Structure and Photocatalytic Properties of Bi₂WO₆ Nanoplatelets Modified by Molybdena Islands from Chemical Vapor Deposition. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, *120* (32), 18191–18200.
- Holt, L. R.; Plowman, B. J.; Young, N. P.; Tschulik, K.; Compton, R. G. The Electrochemical Characterization of Single Core-Shell Nanoparticles. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (1), 397–400.

- Clausmeyer, J.; Botz, A.; Öhl, D.; Schuhmann, W. The Oxygen Reduction Reaction at the Three-Phase Boundary: Nanoelectrodes Modified with Ag Nanoclusters. *Faraday Discuss.* **2016**, *193*, 241–250.
- Pinyou, P.; Ruff, A.; Pöller, S.; Barwe, S.; Nebel, M.; Albuquerque, N. G.; Wischerhoff, E.; Laschewsky, A.; Schmaderer, S.; Szeponik, J.; Plumeré, N.; Schuhmann, W. Thermoresponsive Amperometric Glucose Biosensor. *Biointerphases* **2016**, *11* (1), 011001.
- Chen, X.; Huang, X.; Wang, T.; Barwe, S.; Xie, K.; Kayran, Y. U.; Wintrich, D.; Schuhmann, W.; Masa, J. Traditional Earth-Abundant Coal as New Energy Materials to Catalyze the Oxygen Reduction Reaction in Alkaline Solution. *Electrochimica Acta* **2016**, *211*, 568–575.
- Schmitt, S.; Hümmer, J.; Kraus, S.; Welle, A.; Grosjean, S.; Hanke-Roos, M.; Rosenhahn, A.; Bräse, S.; Wöll, C.; Lee-Thedieck, C.; Tsotsalas, M. Tuning the Cell Adhesion on Biofunctionalized Nanoporous Organic Frameworks. *Advanced Functional Materials* **2016**, *26* (46), 8455–8462.
- Ventosa, E.; Löffler, T.; La Mantia, F.; Schuhmann, W. Understanding Memory Effects in Li-Ion Batteries: Evidence of a Kinetic Origin in TiO₂ upon Hydrogen Annealing. *Chem. Commun.* **2016**, *52* (77), 11524–11526.
- Ventosa, E.; Wilde, P.; Zinn, A.-H.; Trautmann, M.; Ludwig, A.; Schuhmann, W. Understanding Surface Reactivity of Si Electrodes in Li-Ion Batteries by in Operando Scanning Electrochemical Microscopy. *Chem. Commun.* **2016**, *52* (41), 6825–6828.
- Pinyou, P.; Ruff, A.; Pöller, S.; Alsaoub, S.; Leimkühler, S.; Wollenberger, U.; Schuhmann, W. Wiring of the Aldehyde Oxidoreductase PaoABC to Electrode Surfaces via Entrapment in Low Potential Phenothiazine-Modified Redox Polymers. *Bioelectrochemistry* **2016**, *109*, 24–30.

Inorganic Chemistry I – Anorganische Chemie I

- Strack, M.; Bedini, A.; Yip, K. T.; Lombardi, S.; Siegmund, D.; Stoll, R.; Spampinato, S. M.; Metzler-Nolte, N. A Blocking Group Scan Using a Spherical Organometallic Complex Identifies an Unprecedented Binding Mode with Potent Activity In Vitro and In Vivo for the Opioid Peptide Dermorphin. *Chemistry* **2016**, *22* (41), 14605–14610.
- Esselborn, J.; Muraki, N.; Klein, K.; Engelbrecht, V.; Metzler-Nolte, N.; Apfel, U.-P.; Hofmann, E.; Kurisu, G.; Happe, T. A Structural View of Synthetic Cofactor Integration into [FeFe]-Hydrogenases. *Chem. Sci.* **2016**, *7* (2), 959–968.
- Bodner, E. J.; Kandiyote, N. S.; Lutskiy, M.-Y.; Albada, H. B.; Metzler-Nolte, N.; Uhl, W.; Kasher, R.; Arnusch, C. J. Attachment of Antimicrobial Peptides to Reverse Osmosis Membranes by Cu-Catalyzed 1,3-Dipolar Alkyne–azide Cycloaddition. *RSC Adv.* **2016**, *6* (94), 91815–91823.
- Möller, F.; Merz, K.; Herrmann, C.; Apfel, U.-P. Bimetallic Nickel Complexes for Selective CO₂ Carbon Capture and Sequestration. *Dalton Trans.* **2016**, *45* (3), 904–907.
- Gretarsdóttir, J. M.; Bobersky, S.; Metzler-Nolte, N.; Suman, S. G. Cytotoxicity Studies of Water Soluble Coordination Compounds with a [Mo₂O₂S₂](2+) Core. *J. Inorg. Biochem.* **2016**, *160*, 166–171.
- Slootweg, J. C.; Albada, H. B.; Siegmund, D.; Metzler-Nolte, N. Efficient Reagent-Saving Method for the N-Terminal Labeling of Bioactive Peptides with Organometallic Carboxylic Acids by Solid-Phase Synthesis. *Organometallics* **2016**, *35* (18), 3192–3196.

- Megarity, C. F.; Esselborn, J.; Hexter, S. V.; Wittkamp, F.; Apfel, U.-P.; Happe, T.; Armstrong, F. A. Electrochemical Investigations of the Mechanism of Assembly of the Active-Site H-Cluster of [FeFe]-Hydrogenases. *Journal of the American Chemical Society* **2016**, *138* (46), 15227–15233.
- Noth, J.; Esselborn, J.; Güldenhaupt, J.; Brünje, A.; Sawyer, A.; Apfel, U.-P.; Gerwert, K.; Hofmann, E.; Winkler, M.; Happe, T. [FeFe]-Hydrogenase with Chalcogenide Substitutions at the H-Cluster Maintains Full H₂ Evolution Activity. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (29), 8396–8400.
- Kogelheide, F.; Kartaschew, K.; Strack, M.; Baldus, S.; Metzler-Nolte, N.; Havenith, M.; Awakowicz, P.; Stapelmann, K.; Lackmann, J.-W. FTIR Spectroscopy of Cysteine as a Ready-to-Use Method for the Investigation of Plasma-Induced Chemical Modifications of Macromolecules. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2016**, *49* (8), 084004.
- Wenzel, M.; Schriek, P.; Prochnow, P.; Albada, H. B.; Metzler-Nolte, N.; Bandow, J. E. Influence of Lipidation on the Mode of Action of a Small RW-Rich Antimicrobial Peptide. *Biochim. Biophys. Acta* **2016**, *1858* (5), 1004–1011.
- Hoffknecht, B. C.; Prochnow, P.; Bandow, J. E.; Metzler-Nolte, N. Influence of Metallocene Substitution on the Antibacterial Activity of Multivalent Peptide Conjugates. *J. Inorg. Biochem.* **2016**, *160*, 246–249.
- Gothe, Y.; Marzo, T.; Messori, L.; Metzler-Nolte, N. Iridium(I) Compounds as Prospective Anticancer Agents: Solution Chemistry, Antiproliferative Profiles and Protein Interactions for a Series of Iridium(I) N-Heterocyclic Carbene Complexes. *Chemistry* **2016**, *22* (35), 12487–12494.
- Walter, M. D.; Apfel, U.-P.; Siewert, I. Koordinationschemie Und Bioanorganik. *Nachrichten aus der Chemie* **2016**, *64* (3), 232–245.
- Albada, B.; Metzler-Nolte, N. Organometallic–Peptide Bioconjugates: Synthetic Strategies and Medicinal Applications. *Chemical Reviews* **2016**, *116* (19), 11797–11839.
- Konkena, B.; junge Puring, K.; Sinev, I.; Piontek, S.; Khavryuchenko, O.; Dürholt, J. P.; Schmid, R.; Tüysüz, H.; Muhler, M.; Schuhmann, W.; Apfel, U.-P. Pentlandite Rocks as Sustainable and Stable Efficient Electrocatalysts for Hydrogen Generation. *Nature Communications* **2016**, *7*, 12269.
- Wittkamp, F.; Nagel, C.; Lauterjung, P.; Mallick, B.; Schatzschneider, U.; Apfel, U.-P. Phosphine-Ligated Dinitrosyl Iron Complexes for Redox-Controlled NO Release. *Dalton Trans* **2016**, *45* (25), 10271–10279.
- Tsiamantas, C.; de Hatten, X.; Douat, C.; Kauffmann, B.; Maurizot, V.; Ihara, H.; Takafuji, M.; Metzler-Nolte, N.; Huc, I. Selective Dynamic Assembly of Disulfide Macrocyclic Helical Foldamers with Remote Communication of Handedness. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (24), 6848–6852.
- Senger, M.; Mebs, S.; Duan, J.; Wittkamp, F.; Apfel, U.-P.; Heberle, J.; Haumann, M.; Stripp, S. T. Stepwise Isotope Editing of [FeFe]-Hydrogenases Exposes Cofactor Dynamics. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2016**, *113* (30), 8454–8459.
- de Gier, M. G.; Bauke Albada, H.; Josten, M.; Willems, R.; Leavis, H.; van Mansveld, R.; Paganelli, F. L.; Dekker, B.; Lammers, J.-W. J.; Sahl, H.-G.; Metzler-Nolte, N. Synergistic Activity of a Short Lipidated Antimicrobial Peptide (lipoAMP) and Colistin or Tobramycin against *Pseudomonas Aeruginosa* from Cystic Fibrosis Patients. *Med. Chem. Commun.* **2016**, *7* (1), 148–156.
- Petuker, A.; El-Tokhey, M.; Reback, M. L.; Mallick, B.; Apfel, U.-P. Towards Iron-Catalyzed Sonogashira Cross-Coupling Reactions. *ChemistrySelect* **2016**, *1* (11), 2717–2721.

- Wenzel, M.; Prochnow, P.; Mowbray, C.; Vuong, C.; Höxtermann, S.; Stepanek, J. J.; Albada, H. B.; Hall, J.; Metzler-Nolte, N.; Bandow, J. E. Towards Profiles of Resistance Development and Toxicity for the Small Cationic Hexapeptide RWRWRW-NH₂. *Frontiers in Cell and Developmental Biology* **2016**, 4.

Inorganic Chemistry II – Anorganische Chemie II

- Molitor, S.; Gessner, V. H. Alkali Metal Carbenoids: A Case of Higher Stability of the Heavier Congeners. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (27), 7712–7716.
- Gebhard, M.; Mitschker, F.; Wiesing, M.; Giner, I.; Torun, B.; de los Arcos, T.; Awakowicz, P.; Grundmeier, G.; Devi, A. An Efficient PE-ALD Process for TiO₂ Thin Films Employing a New Ti-Precursor. *J. Mater. Chem. C* **2016**, 4 (5), 1057–1065.
- Dürholt, J. P.; Galvelis, R.; Schmid, R. Coarse Graining of Force Fields for Metal–organic Frameworks. *Dalton Trans.* **2016**, 45 (10), 4370–4379.
- Weismann, J.; Scharf, L. T.; Gessner, V. H. Cooperative P–H Bond Activation with Ruthenium and Iridium Carbene Complexes. *Organometallics* **2016**, 35 (15), 2507–2515.
- Moeljadi, A. M. P.; Schmid, R.; Hirao, H. Dioxygen Binding to Fe-MOF-74: Microscopic Insights from Periodic QM/MM Calculations. *Canadian Journal of Chemistry* **2016**, 94 (12), 1144–1150.
- Amirjalayer, S.; Schmid, R. Influence of Pore Dimension on the Host–Guest Interaction in Metal–Organic Frameworks. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, 120 (48), 27319–27327.
- Weismann, J.; Waterman, R.; Gessner, V. H. Metal-Ligand Cooperativity in a Methandiide-Derived Iridium Carbene Complex. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (11), 3846–3855.
- Alaghemandi, M.; Schmid, R. Model Study of Thermoresponsive Behavior of Metal–Organic Frameworks Modulated by Linker Functionalization. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, 120 (12), 6835–6841.
- Molitor, S.; Schwarz, C.; Gessner, V. H. Mono- and Bis-Cyclometalated Palladium Complexes: Synthesis, Characterization, and Catalytic Activity. *Organometallics* **2016**, 35 (2), 159–167.
- Konkena, B.; junge Puring, K.; Sinev, I.; Piontek, S.; Khavryuchenko, O.; Dürholt, J. P.; Schmid, R.; Tüysüz, H.; Muhler, M.; Schuhmann, W.; Apfel, U.-P. Pentlandite Rocks as Sustainable and Stable Efficient Electrocatalysts for Hydrogen Generation. *Nature Communications* **2016**, 7, 12269.
- Feichtner, K.-S.; Englert, S.; Gessner, V. H. Preparation and Isolation of a Chiral Methandiide and Its Application as Cooperative Ligand in Bond Activation. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (2), 506–510.
- Gessner, V. H. Stability and Reactivity Control of Carbenoids: Recent Advances and Perspectives. *Chem. Commun.* **2016**, 52 (81), 12011–12023.
- Feichtner, K.-S.; Gessner, V. Synthesis and Characterization of a Sulfonyl- and Iminophosphoryl-Functionalized Methanide and Methandiide. *Inorganics* **2016**, 4 (4), 40.
- Molitor, S.; Mahler, C.; Gessner, V. H. Synthesis and Solid-State Structures of gold(I) Complexes of Diphosphines. *New J. Chem.* **2016**, 40 (7), 6467–6474.
- O’ Donoghue, R.; Peeters, D.; Rogalla, D.; Becker, H.-W.; Rechmann, J.; Henke, S.; Winter, M.; Devi, A. Systematic Molecular Engineering of Zn-Ketoiminates for Application as Precursors in Atomic Layer Depositions of Zinc Oxide. *Dalton Trans.* **2016**, 45 (47), 19012–19023.

- Dürholt, J. P.; Keupp, J.; Schmid, and R. The Impact of Mesopores on the Mechanical Stability of HKUST-1: A Multiscale Investigation. *European Journal of Inorganic Chemistry* **2016**, 2016 (27), 4517–4523.

Biochemistry I – Biochimie I

- Castillo-Gómez, E.; Oliveira, B.; Tapken, D.; Bertrand, S.; Klein-Schmidt, C.; Pan, H.; Zafeiriou, P.; Steiner, J.; Jurek, B.; Trippe, R.; Prüss, H.; Zimmermann, W.-H.; Bertrand, D.; Ehrenreich, H.; Hollmann, M. All Naturally Occurring Autoantibodies against the NMDA Receptor Subunit NR1 Have Pathogenic Potential Irrespective of Epitope and Immunoglobulin Class. *Molecular Psychiatry* **2016**.
- Larsen, A. P.; Francotte, P.; Frydenvang, K.; Tapken, D.; Goffin, E.; Fraikin, P.; Caignard, D.-H.; Lestage, P.; Danober, L.; Pirotte, B.; Kastrup, J. S. Synthesis and Pharmacology of Mono-, Di-, and Trialkyl-Substituted 7-Chloro-3,4-Dihydro-2 H - 1,2,4-Benzothiadiazine 1,1-Dioxides Combined with X-Ray Structure Analysis to Understand the Unexpected Structure–Activity Relationship at AMPA Receptors. *ACS Chemical Neuroscience* **2016**, 7 (3), 378–390.
- Bliznyuk, A.; Gradwohl, G.; Hollmann, M.; Grossman, Y. The Enigma of the Dichotomic Pressure Response of GluN1-4a/B Splice Variants of NMDA Receptor: Experimental and Statistical Analyses. *Frontiers in Molecular Neuroscience* **2016**, 9.
- M. Hollmann; Wenn das Immunsystem Hirnzellen bekämpft. *ChemieXtra* 10/**2016**, pp. 12-13. (issuu.com/sigwerbgmbh/docs/chemiextra_10-2016/14)

Biochemistry II – Biochimie II

- Strack, M.; Bedini, A.; Yip, K. T.; Lombardi, S.; Siegmund, D.; Stoll, R.; Spampinato, S. M.; Metzler-Nolte, N. A Blocking Group Scan Using a Spherical Organometallic Complex Identifies an Unprecedented Binding Mode with Potent Activity In Vitro and In Vivo for the Opioid Peptide Dermorphin. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (41), 14605–14610.
- Jensen, M. S.; Costa, S. R.; Theorin, L.; Christensen, J. P.; Pomorski, T. G.; López-Marqués, R. L. Application of Image Cytometry to Characterize Heterologous Lipid Flippases in Yeast: Analyzing Lipid Flippase Expression and Activity. *Cytometry Part A* **2016**, 89 (7), 673–680.
- Al-Harthy, T.; Zoghaib, W.; Pflüger, M.; Schöpel, M.; Önder, K.; Reitsammer, M.; Hundsberger, H.; Stoll, R.; Abdel-Jalil, R. Design, Synthesis, and Cytotoxicity of 5-Fluoro-2-Methyl-6-(4-Aryl-Piperazin-1-Yl) Benzoxazoles. *Molecules* **2016**, 21 (10), 1290.
- Veshaguri, S.; Christensen, S. M.; Kemmer, G. C.; Ghale, G.; Moller, M. P.; Lohr, C.; Christensen, A. L.; Justesen, B. H.; Jorgensen, I. L.; Schiller, J.; Hatzakis, N. S.; Grabe, M.; Pomorski, T. G.; Stamou, D. Direct Observation of Proton Pumping by a Eukaryotic P-Type ATPase. *Science* **2016**, 351 (6280), 1469–1473.
- Serdar, M.; Herz, J.; Kempe, K.; Lumpe, K.; Reinboth, B. S.; Sizonenko, S. V.; Hou, X.; Herrmann, R.; Hadamitzky, M.; Heumann, R.; Hansen, W.; Sifringer, M.; van de Looij, Y.; Felderhoff-Müser, U.; Bendix, I. Fingolimod Protects against Neonatal White Matter Damage and Long-Term Cognitive Deficits Caused by Hyperoxia. *Brain, Behavior, and Immunity* **2016**, 52, 106–119.
- Heumann, R. Highlight: Perspectives of Molecular Neuroscience in Health and Disease. *Biological Chemistry* **2016**, 397 (3).

- Islam, M. S.; Nolte, H.; Jacob, W.; Ziegler, A. B.; Pütz, S.; Grosjean, Y.; Szczepanowska, K.; Trifunovic, A.; Braun, T.; Heumann, H.; Heumann, R.; Hovemann, B.; Moore, D. J.; Krüger, M. Human R1441C LRRK2 Regulates the Synaptic Vesicle Proteome and Phosphoproteome in a *Drosophila* Model of Parkinson's Disease. *Human Molecular Genetics* **2016**, ddw352.
- Athanasopoulos, P. S.; Jacob, W.; Neumann, S.; Kutsch, M.; Wolters, D.; Tan, E. K.; Bichler, Z.; Herrmann, C.; Heumann, R. Identification of Protein Phosphatase 2A as an Interacting Protein of Leucine-Rich Repeat Kinase 2. *Biological Chemistry* **2016**, 397 (6).
- Pomorski, T. G.; Menon, A. K. Lipid Somersaults: Uncovering the Mechanisms of Protein-Mediated Lipid Flipping. *Progress in Lipid Research* **2016**, 64, 69–84.
- Serchov, T.; Jilg, A.; Wolf, C. T.; Radtke, I.; Stehle, J. H.; Heumann, R. Ras Activity Oscillates in the Mouse Suprachiasmatic Nucleus and Modulates Circadian Clock Dynamics. *Molecular Neurobiology* **2016**, 53 (3), 1843–1855.
- Costa, S. R.; Marek, M.; Axelsen, K. B.; Theorin, L.; Pomorski, T. G.; Lopez-Marques, R. L. Role of Post-Translational Modifications at the Subunit Ectodomain in Complex Association with a Promiscuous Plant P4-ATPase. *Biochemical Journal* **2016**, 473 (11), 1605–1615.
- Serchov, T.; Heumann, R.; van Calker, D.; Biber, K. Signaling Pathways Regulating Homer1a Expression: Implications for Antidepressant Therapy. *Biological Chemistry* **2016**, 397 (3).
- Yip, K. T.; Zhong, X. Y.; Seibel, N.; Pütz, S.; Autzen, J.; Gasper, R.; Hofmann, E.; Scherkenbeck, J.; Stoll, R. Small Molecules Antagonise the MIA-Fibronectin Interaction in Malignant Melanoma. *Scientific Reports* **2016**, 6 (1).
- Schöpel, M.; Herrmann, C.; Scherkenbeck, J.; Stoll, R. The Bisphenol A Analogue Bisphenol S Binds to K-Ras4B - Implications for “BPA-Free” Plastics. *FEBS Letters* **2016**, 590 (3), 369–375.
- Veit, S.; Nagadoi, A.; Rögner, M.; Rexroth, S.; Stoll, R.; Ikegami, T. The Cyanobacterial Cytochrome B 6 F Subunit PetP Adopts an SH3 Fold in Solution. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics* **2016**, 1857 (6), 705–714.

EPR Spectroscopy – EPR-Spektroskopie

- Seeger, M. A.; Bordignon, E.; Hohl, M. ABC Exporters from a Structural Perspective. In *ABC Transporters - 40 Years on*; George, A. M., Ed.; Springer International Publishing: Cham, 2016; pp 65–84.
- Wuttge, S.; Licht, A.; Timachi, M. H.; Bordignon, E.; Schneider, E. Mode of Interaction of the Signal-Transducing Protein EIIA^{Glc} with the Maltose ABC Transporter in the Process of Inducer Exclusion. *Biochemistry* **2016**, 55 (38), 5442–5452.
- Fischer, A. W.; Bordignon, E.; Bleicken, S.; García-Sáez, A. J.; Jeschke, G.; Meiler, J. Pushing the Size Limit of de Novo Structure Ensemble Prediction Guided by Sparse SDSL-EPR Restraints to 200 Residues: The Monomeric and Homodimeric Forms of BAX. *Journal of Structural Biology* **2016**, 195 (1), 62–71.
- Celia, H.; Noinaj, N.; Zakharov, S. D.; Bordignon, E.; Botos, I.; Santamaria, M.; Barnard, T. J.; Cramer, W. A.; Lloubes, R.; Buchanan, S. K. Structural Insight into the Role of the Ton Complex in Energy Transduction. *Nature* **2016**, 538 (7623), 60–65.

- Biafora, A.; Krause, T.; Hackenberger, D.; Belitz, F.; Gooßen, L. J. *Ortho* -C-H Arylation of Benzoic Acids with Aryl Bromides and Chlorides Catalyzed by Ruthenium. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (47), 14752–14755.
- Straczek, L.; Maeke, T.; Funke, D. A.; Sharma, A.; McCaskill, J. S.; Oehm, J. A CMOS 16k Microelectrode Array as Docking Platform for Autonomous Microsystems; IEEE, 2016; pp 1–6.
- Krause, T.; Baader, S.; Erb, B.; Gooßen, L. J. Atom-Economic Catalytic Amide Synthesis from Amines and Carboxylic Acids Activated in Situ with Acetylenes. *Nature Communications* **2016**, 7, 11732.
- Ismail-Ali, A.; Fansa, E. K.; Pryk, N.; Yahiaoui, S.; Kushnir, S.; Pflieger, M.; Wittinghofer, A.; Schulz, F. Biosynthesis-Driven Structure–activity Relationship Study of Premonensin-Derivatives. *Org. Biomol. Chem.* **2016**, 14 (32), 7671–7675.
- Tang, J.; Hackenberger, D.; Gooßen, L. J. Branched Arylalkenes from Cinnamates: Selectivity Inversion in Heck Reactions by Carboxylates as Deciduous Directing Groups. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (37), 11296–11299.
- Pichette Drapeau, M.; Gooßen, L. J. Carboxylic Acids as Directing Groups for C-H Bond Functionalization. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (52), 18654–18677.
- Matheis, C.; Bayarmagnai, B.; Jouvin, K.; Gooßen, L. J. Convenient Synthesis of Pentafluoroethyl Thioethers via Catalytic Sandmeyer Reaction with a Stable Fluoroalkylthiolation Reagent. *Org. Chem. Front.* **2016**, 3 (8), 949–952.
- Bulfield, D.; Huber, S. M. Halogen Bonding in Organic Synthesis and Organocatalysis. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (41), 14434–14450.
- Erb, B.; Risto, E.; Wendling, T.; Gooßen, L. J. Reductive Etherification of Fatty Acids or Esters with Alcohols Using Molecular Hydrogen. *ChemSusChem* **2016**, 9 (12), 1442–1448.
- Huang, L.; Biafora, A.; Zhang, G.; Bragoni, V.; Gooßen, L. J. Regioselective C–H Hydroarylation of Internal Alkynes with Arenecarboxylates: Carboxylates as Deciduous Directing Groups. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (24), 6933–6937.
- Matheis, C.; Wagner, V.; Gooßen, L. J. Sandmeyer-Type Trifluoromethylthiolation and Trifluoromethylselenolation of (Hetero)Aromatic Amines Catalyzed by Copper. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (1), 79–82.
- Grünberg, M. F.; Jia, F.; Rivas-Nass, A.; Gooßen, L. J. Selective Monoarylation of Primary Anilines Catalyzed by Pd(dppf) and Its Application in OLED Component Synthesis. *Advanced Synthesis & Catalysis* **2016**, 358 (10), 1589–1594.
- Erb, B.; Dierker, M.; Ohlmann, D. M.; Gooßen, L. J. Selective Synthesis of Propenyl-Branched Diunsaturated Fatty Esters via Catalytic Codimerization of Ethyl Linoleate and Propylene: Synthesis of Propenyl-Branched Diunsaturated Fatty Esters. *European Journal of Lipid Science and Technology* **2016**, 118 (1), 111–116.
- Matheis, C.; Krause, T.; Bragoni, V.; Gooßen, L. J. Trifluoromethylthiolation and Trifluoromethylselenolation of α -Diazo Esters Catalyzed by Copper. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (35), 12270–12273.
- Funke, D. A.; Mayr, P.; Maeke, T.; McCaskill, J. S.; Sharma, A.; Straczek, L.; Oehm, J. Ultra Low-Power, -Area and -Frequency CMOS Thyristor Based Oscillator for Autonomous Microsystems. *Analog Integrated Circuits and Signal Processing* **2016**, 89 (2), 347–356.

Organic Chemistry II – Organische Chemie II

- Henkel, S.; Pollok, C. H.; Schleif, T.; Sander, W. Azulenylcarbenes: Rearrangements on the C₁₁H₈ Potential Energy Surface. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (35), 12479–12486.
- Knorr, J.; Sokkar, P.; Schott, S.; Costa, P.; Thiel, W.; Sander, W.; Sanchez-Garcia, E.; Nuernberger, P. Competitive Solvent-Molecule Interactions Govern Primary Processes of Diphenylcarbene in Solvent Mixtures. *Nature Communications* **2016**, 7, 12968.
- Pollok, C. H.; Merten, C. Conformational Distortion of α -Phenylethyl Amine in Cryogenic Matrices – a Matrix Isolation VCD Study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (19), 13496–13502.
- Petuker, A.; Merz, K.; Merten, C.; Apfel, U.-P. Controlled Flexible Coordination in Tripodal Iron(II) Phosphane Complexes: Effects on Reactivity. *Inorganic Chemistry* **2016**, 55 (3), 1183–1191.
- Tsegaw, Y. A.; Sander, W.; Kaiser, R. I. Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopic Study on Nonequilibrium Reaction Pathways in the Photolysis of Solid Nitromethane (CH₃NO₂) and D₃-Nitromethane (CD₃NO₂). *The Journal of Physical Chemistry A* **2016**, 120 (9), 1577–1587.
- Osowski, T.; Golbek, J.; Merz, K.; Merten, C. Intermolecular Interactions of a Chiral Amine Borane Adduct Revealed by VCD Spectroscopy. *The Journal of Physical Chemistry A* **2016**, 120 (24), 4108–4115.
- Costa, P.; Lohmiller, T.; Trosien, I.; Savitsky, A.; Lubitz, W.; Fernandez-Oliva, M.; Sanchez-Garcia, E.; Sander, W. Light and Temperature Control of the Spin State of Bis(*P*-Methoxyphenyl)carbene: A Magnetically Bistable Carbene. *Journal of the American Chemical Society* **2016**, 138 (5), 1622–1629.
- Förstel, M.; Tsegaw, Y. A.; Maksyutenko, P.; Mebel, A. M.; Sander, W.; Kaiser, R. I. On the Formation of N₃H₃ Isomers in Irradiated Ammonia Bearing Ices: Triazene (H₂NNNH) or Triimide (HNHNH). *ChemPhysChem* **2016**, 17 (17), 2726–2735.
- Sander, W. Physical Organic Chemistry - A Personal Perspective. *Israel Journal of Chemistry* **2016**, 56 (1), 62–65.
- Richter, G.; Mendez-Vega, E.; Sander, W. Singlet Halophenylcarbenes as Strong Hydrogen-Bond Acceptors. *The Journal of Physical Chemistry A* **2016**, 120 (20), 3524–3532.
- Bünnemann, K.; Merten, C. Solvation of N,C-Protected Valine: Interactions with DMSO and a Chiral Solvating Agent. *The Journal of Physical Chemistry B* **2016**, 120 (35), 9434–9442.
- Henkel, S.; Costa, P.; Klute, L.; Sokkar, P.; Fernandez-Oliva, M.; Thiel, W.; Sanchez-Garcia, E.; Sander, W. Switching the Spin State of Diphenylcarbene via Halogen Bonding. *Journal of the American Chemical Society* **2016**, 138 (5), 1689–1697.
- Berkhan, G.; Merten, C.; Holec, C.; Hahn, F. The Interplay between a Multifunctional Dehydratase Domain and a C-Methyltransferase Effects Olefin Shift in Ambruticin Biosynthesis. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (43), 13589–13592.
- Kreienborg, N. M.; Pollok, C. H.; Merten, C. Towards an Observation of Active Conformations in Asymmetric Catalysis: Interaction-Induced Conformational Preferences of a Chiral Thiourea Model Compound. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (35), 12455–12463.

Physical Chemistry I – Physikalische Chemie I

- Möller, F.; Merz, K.; Herrmann, C.; Apfel, U.-P. Bimetallic Nickel Complexes for Selective CO₂ Carbon Capture and Sequestration. *Dalton Trans.* **2016**, 45 (3), 904–907.

- Kutsch, M.; Hortmann, P.; Herrmann, C.; Weibels, S.; Weingärtner, H. Dissecting Ion-Specific from Electrostatic Salt Effects on Amyloid Fibrillation: A Case Study of Insulin. *Biointerphases* **2016**, 11 (1), 019008.
- Zaum, C.; Morgenstern, K. Experimental Evidence for a Three-Body Interaction between Diffusing CO Molecules. *Nano Letters* **2016**, 16 (5), 3001–3004.
- Athanasopoulos, P. S.; Jacob, W.; Neumann, S.; Kutsch, M.; Wolters, D.; Tan, E. K.; Bichler, Z.; Herrmann, C.; Heumann, R. Identification of Protein Phosphatase 2A as an Interacting Protein of Leucine-Rich Repeat Kinase 2. *Biological Chemistry* **2016**, 397 (6).
- Bockstedte, M.; Michl, A.; Kolb, M.; Mehlhorn, M.; Morgenstern, K. Incomplete Bilayer Termination of the Ice (0001) Surface. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, 120 (2), 1097–1109.
- Britzen-Laurent, N.; Herrmann, C.; Naschberger, E.; Croner, R. S.; Stürzl, M. Pathophysiological Role of Guanylate-Binding Proteins in Gastrointestinal Diseases. *World Journal of Gastroenterology* **2016**, 22 (28), 6434.
- Mehlhorn, M.; Morgenstern, K. Physisorption versus Chemisorption of Oxygen Molecules on Ag(100). *The Journal of Chemical Physics* **2016**, 144 (13), 134706.
- Zaum, C.; Bertram, C.; Meyer auf der Heide, K. M.; Mehlhorn, M.; Morgenstern, K. Temperature Calibration for Diffusion Experiments to Sub-Kelvin Precision. *Review of Scientific Instruments* **2016**, 87 (5), 053902.
- Schöpel, M.; Herrmann, C.; Scherkenbeck, J.; Stoll, R. The Bisphenol A Analogue Bisphenol S Binds to K-Ras4B - Implications for “BPA-Free” Plastics. *FEBS Letters* **2016**, 590 (3), 369–375.
- Heidorn, S.-C.; Bertram, C.; Morgenstern, K. The Fractal Dimension of Ice on the Nanoscale. *Chemical Physics Letters* **2016**, 665, 1–5.
- Senske, M.; Constantinescu-Aruxandei, D.; Havenith, M.; Herrmann, C.; Weingärtner, H.; Ebbinghaus, S. The Temperature Dependence of the Hofmeister Series: Thermodynamic Fingerprints of Cosolute–protein Interactions. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (43), 29698–29708.

Physical Chemistry II – Physikalische Chemie II

- Lackmann, J.-W.; Fiebrandt, M.; Raguse, M.; Kartaschew, K.; Havenith, M.; Bandow, J. E.; Moeller, R.; Awakowicz, P.; Stapelmann, K. A Combined Low-Pressure Hydrogen Peroxide Evaporation plus Hydrogen Plasma Treatment Method for Sterilization – Part 2: An Intercomparison Study of Different Biological Systems. *Plasma Processes and Polymers* **2016**, 201600199.
- Knake, L.; Vondracek, H.; Havenith, M. A Novel Set-up to Investigate the Low-Frequency Spectra of Aqueous Solutions at High Hydrostatic Pressure. *Review of Scientific Instruments* **2016**, 87 (10), 104101.
- *Biocalorimetry: Foundations and Contemporary Approaches*; Bastos, M., Ed.; CRC Press, 2016.
- Fobbe, T.; Markmann, S.; Fobbe, F.; Hekmat, N.; Nong, H.; Pal, S.; Balzerwoski, P.; Savolainen, J.; Havenith, M.; Wieck, A. D.; Jukam, N. Broadband Terahertz Dispersion Control in Hybrid Waveguides. *Optics Express* **2016**, 24 (19), 22319.
- Knorr, J.; Sokkar, P.; Schott, S.; Costa, P.; Thiel, W.; Sander, W.; Sanchez-Garcia, E.; Nuernberger, P. Competitive Solvent-Molecule Interactions Govern Primary Processes of Diphenylcarbene in Solvent Mixtures. *Nature Communications* **2016**, 7, 12968.
- Samanta, N.; Luong, T. Q.; Das Mahanta, D.; Mitra, R. K.; Havenith, M. Effect of Short Chain Poly(ethylene Glycol)s on the Hydration Structure and Dynamics around Human Serum Albumin. *Langmuir* **2016**, 32 (3), 831–837.

- Verma, P. K.; Steinbacher, A.; Schmiedel, A.; Nuernberger, P.; Brixner, T. Excited-State Intramolecular Proton Transfer of 2-Acetylindan-1,3-Dione Studied by Ultrafast Absorption and Fluorescence Spectroscopy. *Structural Dynamics* **2016**, 3 (2), 023606.
- Balzerowski, P.; Brundermann, E.; Havenith, M. Fabry-Pérot Cavities for the Terahertz Spectral Range Based on High-Reflectivity Multilayer Mirrors. *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology* **2016**, 6 (4), 563–567.
- Gao, M.; Gnutt, D.; Orban, A.; Appel, B.; Righetti, F.; Winter, R.; Narberhaus, F.; Müller, S.; Ebbinghaus, S. Faltung Einer RNA-Haarnadel in Der Dicht Gedrängten Zelle. *Angewandte Chemie* **2016**, 128 (9), 3279–3283.
- Kogelheide, F.; Kartaschew, K.; Strack, M.; Baldus, S.; Metzler-Nolte, N.; Havenith, M.; Awakowicz, P.; Stapelmann, K.; Lackmann, J.-W. FTIR Spectroscopy of Cysteine as a Ready-to-Use Method for the Investigation of Plasma-Induced Chemical Modifications of Macromolecules. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2016**, 49 (8), 084004.
- Kaufmann, M.; Leicht, D.; Schwan, R.; Mani, D.; Schwaab, G.; Havenith, M. Helium Droplet Infrared Spectroscopy of Glycine and Glycine-Water Aggregates. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (40), 28082–28090.
- Luong, T. Q.; Xu, Y.; Bründermann, E.; Leitner, D. M.; Havenith, M. Hydrophobic Collapse Induces Changes in the Collective Protein and Hydration Low Frequency Modes. *Chemical Physics Letters* **2016**, 651, 1–7.
- Bäumer, A.; Duman, J. G.; Havenith, M. Ice Nucleation of an Insect Lipoprotein Ice Nucleator (LPIN) Correlates with Retardation of the Hydrogen Bond Dynamics at the Myo-Inositol Ring. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (28), 19318–19323.
- Schott, S.; Röss, L.; Hrušák, J.; Nuernberger, P.; Brixner, T. Identification of Photofragmentation Patterns in Trihalide Anions by Global Analysis of Vibrational Wavepacket Dynamics in Broadband Transient Absorption Data. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (48), 33287–33302.
- Leicht, D.; Kaufmann, M.; Schwaab, G.; Havenith, M. Infrared Spectroscopy of the Helium Solvated Cyclopentadienyl Radical in the CH Stretch Region. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, 145 (7), 074304.
- Kaufmann, M.; Leicht, D.; Havenith, M.; Broderick, B. M.; Douberly, G. E. Infrared Spectroscopy of the Tropylium Radical in Helium Droplets. *The Journal of Physical Chemistry A* **2016**, 120 (34), 6768–6773.
- Schwan, R.; Kaufmann, M.; Leicht, D.; Schwaab, G.; Havenith, M. Infrared Spectroscopy of the ν_2 Band of the Water Monomer and Small Water Clusters (H_2O)_{n=2,3,4} in Helium Droplets. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (34), 24063–24069.
- Engelhardt, M.; Pothiraja, R.; Kartaschew, K.; Bibinov, N.; Havenith, M.; Awakowicz, P. Interaction of an Argon Plasma Jet with a Silicon Wafer. *Journal of Physics D: Applied Physics* **2016**, 49 (14), 145201.
- Xu, Y.; Bäumer, A.; Meister, K.; Bischak, C. G.; DeVries, A. L.; Leitner, D. M.; Havenith, M. Protein-Water Dynamics in Antifreeze Protein III Activity. *Chemical Physics Letters* **2016**, 647, 1–6.
- Gao, M.; Gnutt, D.; Orban, A.; Appel, B.; Righetti, F.; Winter, R.; Narberhaus, F.; Müller, S.; Ebbinghaus, S. RNA Hairpin Folding in the Crowded Cell. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (9), 3224–3228.
- Vöpel, T.; Ning Saw, E.; Hartmann, V.; Williams, R.; Müller, F.; Schuhmann, W.; Plumeré, N.; Nowaczyk, M.; Ebbinghaus, S.; Rögner, M. Simultaneous Measurements of Photocurrents and H_2O_2 Evolution from Solvent Exposed Photosystem 2 Complexes. *Biointerphases* **2016**, 11 (1), 019001.
- Gnutt, D.; Ebbinghaus, S. The Macromolecular Crowding Effect – from in Vitro into the Cell. *Biological Chemistry* **2016**, 397 (1).

- Senske, M.; Constantinescu-Aruxandei, D.; Havenith, M.; Herrmann, C.; Weingärtner, H.; Ebbinghaus, S. The Temperature Dependence of the Hofmeister Series: Thermodynamic Fingerprints of Cosolute-Protein Interactions. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18* (43), 29698–29708.
- Leicht, D.; Kaufmann, M.; Schwan, R.; Schäfer, J.; Schwaab, G.; Havenith, M. Understanding the Microsolvation of Radicals: Infrared Spectroscopy of Benzyl Radical Water Clusters. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *145* (20), 204305.
- Gnutt, D.; Ebbinghaus, S.; Heyden, M. Vom Reagenzglas in Die Zelle. *Nachrichten aus der Chemie* **2016**, *64* (3), 310–313.
- Bellissent-Funel, M.-C.; Hassanali, A.; Havenith, M.; Henchman, R.; Pohl, P.; Sterpone, F.; van der Spoel, D.; Xu, Y.; Garcia, A. E. Water Determines the Structure and Dynamics of Proteins. *Chemical Reviews* **2016**, *116* (13), 7673–7697.

Industrial Chemistry – Technische Chemie

- Masa, J.; Weide, P.; Peeters, D.; Sinev, I.; Xia, W.; Sun, Z.; Somsen, C.; Muhler, M.; Schuhmann, W. Amorphous Cobalt Boride (Co₂B) as a Highly Efficient Nonprecious Catalyst for Electrochemical Water Splitting: Oxygen and Hydrogen Evolution. *Advanced Energy Materials* **2016**, *6* (6), 1502313.
- Elumeeva, K.; Masa, J.; Tietz, F.; Yang, F.; Xia, W.; Muhler, M.; Schuhmann, W. A Simple Approach towards High-Performance Perovskite-Based Bifunctional Oxygen Electrocatalysts. *ChemElectroChem* **2016**, *3* (1), 138–143.
- Petrova, O.; Kulp, C.; Pohl, M.-M.; ter Veen, R.; Veith, L.; Grehl, T.; van den Berg, M. W. E.; Brongersma, H.; Bron, M.; Grünert, W. Chemical Leaching of Pt-Cu/C Catalysts for Electrochemical Oxygen Reduction: Activity, Particle Structure, and Relation to Electrochemical Leaching. *ChemElectroChem* **2016**, *3* (11), 1768–1780.
- Aijaz, A.; Masa, J.; Rösler, C.; Xia, W.; Weide, P.; Botz, A. J. R.; Fischer, R. A.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Co@Co₃O₄ Encapsulated in Carbon Nanotube-Grafted Nitrogen-Doped Carbon Polyhedra as an Advanced Bifunctional Oxygen Electrode. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (12), 4087–4091.
- Anton, J.; Nebel, J.; Göbel, C.; Gabrysch, T.; Song, H.; Froese, C.; Ruland, H.; Muhler, M.; Kaluza, S. CO Hydrogenation to Higher Alcohols over Cu–Co-Based Catalysts Derived from Hydrotalcite-Type Precursors. *Topics in Catalysis* **2016**, *59* (15–16), 1361–1370.
- Weide, P.; Schulz, K.; Kaluza, S.; Rohe, M.; Beranek, R.; Muhler, M. Controlling the Photocorrosion of Zinc Sulfide Nanoparticles in Water by Doping with Chloride and Cobalt Ions. *Langmuir* **2016**, *32* (48), 12641–12649.
- Yorov, K. E.; Sidorov, A. V.; Polyakov, A. Y.; Sukhorukova, I. V.; Shtansky, D. V.; Grünert, W.; Grigorieva, A. V. Correction: Inkjet Printing of Silver Rainbow Colloids for SERS Chips with Polychromatic Sensitivity. *RSC Adv.* **2016**, *6* (46), 39541–39541.
- Soldat, J.; Busser, G. W.; Muhler, M.; Wark, M. Cr₂O₃ Nanoparticles on Ba₅Ta₄O₁₅ as a Noble-Metal-Free Oxygen Evolution Co-Catalyst for Photocatalytic Overall Water Splitting. *ChemCatChem* **2016**, *8* (1), 153–156.
- Sun, Z.; Madej, E.; Genç, A.; Muhler, M.; Arbiol, J.; Schuhmann, W.; Ventosa, E. Demonstrating the Steady Performance of Iron Oxide Composites over 2000 Cycles at Fast Charge-Rates for Li-Ion Batteries. *Chem. Commun.* **2016**, *52* (46), 7348–7351.
- Khazaei, M.; Xia, W.; Lackner, G.; Mendes, R. G.; Rummeli, M.; Muhler, M.; Lupascu, D. C. Dispersibility of Vapor Phase Oxygen and Nitrogen Functionalized Multi-Walled Carbon Nanotubes in Various Organic Solvents. *Scientific Reports* **2016**, *6* (1).
- Heuer, S.; Senneca, O.; Wütscher, A.; Düdler, H.; Schiemann, M.; Muhler, M.; Scherer, V. Effects of Oxy-Fuel Conditions on the Products of Pyrolysis in a Drop Tube Reactor. *Fuel Processing Technology* **2016**, *150*, 41–49.

- Luska, K. L.; Bordet, A.; Tricard, S.; Sinev, I.; Grünert, W.; Chaudret, B.; Leitner, W. Enhancing the Catalytic Properties of Ruthenium Nanoparticle-SILP Catalysts by Dilution with Iron. *ACS Catalysis* **2016**, 6 (6), 3719–3726.
- Chen, P.; Jabłońska, M.; Weide, P.; Caumanns, T.; Weirich, T.; Muhler, M.; Moos, R.; Palkovits, R.; Simon, U. Formation and Effect of NH_4^+ Intermediates in NH_3 -SCR over Fe-ZSM-5 Zeolite Catalysts. *ACS Catalysis* **2016**, 6 (11), 7696–7700.
- Mette, K.; Kühl, S.; Tarasov, A.; Willinger, M. G.; Kröhnert, J.; Wrabetz, S.; Trunschke, A.; Scherzer, M.; Girgsdies, F.; Düdler, H.; Kähler, K.; Ortega, K. F.; Muhler, M.; Schlögl, R.; Behrens, M.; Lunkenbein, T. High-Temperature Stable Ni Nanoparticles for the Dry Reforming of Methane. *ACS Catalysis* **2016**, 6 (10), 7238–7248.
- Rösler, C.; Aijaz, A.; Turner, S.; Filippousi, M.; Shahabi, A.; Xia, W.; Van Tendeloo, G.; Muhler, M.; Fischer, R. A. Hollow Zn/Co Zeolitic Imidazolate Framework (ZIF) and Yolk-Shell Metal@Zn/Co ZIF Nanostructures. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (10), 3304–3311.
- Salazar, M.; Hoffmann, S.; Tkachenko, O. P.; Becker, R.; Grünert, W. Hybrid Catalysts for the Selective Catalytic Reduction of NO by NH_3 : The Influence of Component Separation on the Performance of Hybrid Systems. *Applied Catalysis B: Environmental* **2016**, 182, 213–219.
- Salazar, M.; Hoffmann, S.; Singer, V.; Becker, R.; Grünert, W. Hybrid Catalysts for the Selective Catalytic Reduction (SCR) of NO by NH_3 . On the Role of Fast SCR in the Reaction Network. *Applied Catalysis B: Environmental* **2016**, 199, 433–438.
- Saruhan, B.; Mondragón Rodríguez, G. C.; Haidry, A. A.; Yüce, A.; Heikens, S.; Grünert, W. Integrated Performance Monitoring of Three-Way Catalytic Converters by Self-Regenerative and Adaptive High-Temperature Catalyst and Sensors: Performance Monitoring of Catalytic Converter. *Advanced Engineering Materials* **2016**, 18 (5), 728–738.
- Yang, F.; Sliozberg, K.; Antoni, H.; Xia, W.; Muhler, M. $\text{Mo}_x\text{C}/\text{CNT}$ Composites as Active Electrocatalysts for the Hydrogen Evolution Reaction under Alkaline Conditions. *Electroanalysis* **2016**, 28 (10), 2293–2296.
- Konkena, B.; Masa, J.; Xia, W.; Muhler, M.; Schuhmann, W. $\text{MoSSe}@$ reduced Graphene Oxide Nanocomposite Heterostructures as Efficient and Stable Electrocatalysts for the Hydrogen Evolution Reaction. *Nano Energy* **2016**, 29, 46–53.
- Chew, L. M.; Xia, W.; Düdler, H.; Weide, P.; Ruland, H.; Muhler, M. On the Role of the Stability of Functional Groups in Multi-Walled Carbon Nanotubes Applied as Support in Iron-Based High-Temperature Fischer–Tropsch Synthesis. *Catalysis Today* **2016**, 270, 85–92.
- Düdler, H.; Wütscher, A.; Vorobiev, N.; Schiemann, M.; Scherer, V.; Muhler, M. Oxidation Characteristics of a Cellulose-Derived Hydrochar in Thermogravimetric and Laminar Flow Burner Experiments. *Fuel Processing Technology* **2016**, 148, 85–90.
- Dong, W.; Chen, P.; Xia, W.; Weide, P.; Ruland, H.; Kostka, A.; Köhler, K.; Muhler, M. Palladium Nanoparticles Supported on Nitrogen-Doped Carbon Nanotubes as a Release-and-Catch Catalytic System in Aerobic Liquid-Phase Ethanol Oxidation. *ChemCatChem* **2016**, 8 (7), 1269–1273.
- Hiltrop, D.; Masa, J.; Maljusch, A.; Xia, W.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Pd Deposited on Functionalized Carbon Nanotubes for the Electrooxidation of Ethanol in Alkaline Media. *Electrochemistry Communications* **2016**, 63, 30–33.
- Konkena, B.; junge Puring, K.; Sinev, I.; Piontek, S.; Khavryuchenko, O.; Dürholt, J. P.; Schmid, R.; Tüysüz, H.; Muhler, M.; Schuhmann, W.; Apfel, U.-P. Pentlandite Rocks as Sustainable and Stable Efficient Electrocatalysts for Hydrogen Generation. *Nature Communications* **2016**, 7, 12269.

- Elumeeva, K.; Masa, J.; Sierau, J.; Tietz, F.; Muhler, M.; Schuhmann, W. Perovskite-Based Bifunctional Electrocatalysts for Oxygen Evolution and Oxygen Reduction in Alkaline Electrolytes. *Electrochimica Acta* **2016**, *208*, 25–32.
- Kangvansura, P.; Chew, L. M.; Saengsui, W.; Santawaja, P.; Poo-arporn, Y.; Muhler, M.; Schulz, H.; Worayingyong, A. Product Distribution of CO₂ Hydrogenation by K- and Mn-Promoted Fe Catalysts Supported on N -Functionalized Carbon Nanotubes. *Catalysis Today* **2016**, *275*, 59–65.
- Xie, K.; Xia, W.; Masa, J.; Yang, F.; Weide, P.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Promoting Effect of Nitrogen Doping on Carbon Nanotube-Supported RuO₂ Applied in the Electrocatalytic Oxygen Evolution Reaction. *Journal of Energy Chemistry* **2016**, *25* (2), 282–288.
- Alexiadis, V. I.; Chaar, M.; van Veen, A.; Muhler, M.; Thybaut, J. W.; Marin, G. B. Quantitative Screening of an Extended Oxidative Coupling of Methane Catalyst Library. *Applied Catalysis B: Environmental* **2016**, *199*, 252–259.
- Zhang, W.; Kauer, M.; Halbherr, O.; Epp, K.; Guo, P.; Gonzalez, M. I.; Xiao, D. J.; Wiktor, C.; Liabrés i Xamena, F. X.; Wöll, C.; Wang, Y.; Muhler, M.; Fischer, R. A. Ruthenium Metal-Organic Frameworks with Different Defect Types: Influence on Porosity, Sorption, and Catalytic Properties. *Chemistry - A European Journal* **2016**, *22* (40), 14297–14307.
- Zhang, W.; Chen, Z.; Al-Naji, M.; Guo, P.; Cwik, S.; Halbherr, O.; Wang, Y.; Muhler, M.; Wilde, N.; Gläser, R.; Fischer, R. A. Simultaneous Introduction of Various Palladium Active Sites into MOF via One-Pot Synthesis: Pd@[Cu_{3-x}Pd_x(BTC)₂] N. *Dalton Trans.* **2016**, *45* (38), 14883–14887.
- Dittmer, A.; Menze, J.; Mei, B.; Strunk, J.; Luftman, H. S.; Gutkowski, R.; Wachs, I. E.; Schuhmann, W.; Muhler, M. Surface Structure and Photocatalytic Properties of Bi₂WO₆ Nanoplatelets Modified by Molybdena Islands from Chemical Vapor Deposition. *The Journal of Physical Chemistry C* **2016**, *120* (32), 18191–18200.
- Düdler, H.; Wütscher, A.; Stoll, R.; Muhler, M. Synthesis and Characterization of Lignite-like Fuels Obtained by Hydrothermal Carbonization of Cellulose. *Fuel* **2016**, *171*, 54–58.
- Lebedev, V. A.; Kozlov, D. A.; Kolesnik, I. V.; Poluboyarinov, A. S.; Becerikli, A. E.; Grünert, W.; Garshev, A. V. The Amorphous Phase in Titania and Its Influence on Photocatalytic Properties. *Applied Catalysis B: Environmental* **2016**, *195*, 39–47.
- Chen, P.; Rauch, D.; Weide, P.; Schönebaum, S.; Simons, T.; Muhler, M.; Moos, R.; Simon, U. The Effect of Cu and Fe Cations on NH₃ -Supported Proton Transport in DeNO_x -SCR Zeolite Catalysts. *Catal. Sci. Technol.* **2016**, *6* (10), 3362–3366.
- Anton, J.; Nebel, J.; Song, H.; Froese, C.; Weide, P.; Ruland, H.; Muhler, M.; Kaluza, S. The Effect of Sodium on the Structure–activity Relationships of Cobalt-Modified Cu/ZnO/Al₂O₃ Catalysts Applied in the Hydrogenation of Carbon Monoxide to Higher Alcohols. *Journal of Catalysis* **2016**, *335*, 175–186.
- Schittkowski, J.; Buesen, D.; Toelle, K.; Muhler, M. The Temperature-Programmed Desorption of H₂ from Cu/ZrO₂. *Catalysis Letters* **2016**, *146* (5), 1011–1017.

Theoretical Chemistry – Theoretische Chemie

- Uhl, F.; Marx, D.; Ceriotti, M. Accelerated Path Integral Methods for Atomistic Simulations at Ultra-Low Temperatures. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *145* (5), 054101.

- Roemelt, M.; Guo, S.; Chan, G. K.-L. A Projected Approximation to Strongly Contracted N-Electron Valence Perturbation Theory for DMRG Wavefunctions. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *144* (20), 204113.
- Sosso, G. C.; Behler, J.; Bernasconi, M. Atomic Mobility in the Overheated Amorphous GeTe Compound for Phase Change Memories: Atomic Mobility in Overheated Amorphous GeTe. *physica status solidi (a)* **2016**, *213* (2), 329–334.
- Gastegger, M.; Kauffmann, C.; Behler, J.; Marquetand, P. Comparing the Accuracy of High-Dimensional Neural Network Potentials and the Systematic Molecular Fragmentation Method: A Benchmark Study for All-Trans Alkanes. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *144* (19), 194110.
- Hellström, M.; Behler, J. Concentration-Dependent Proton Transfer Mechanisms in Aqueous NaOH Solutions: From Acceptor-Driven to Donor-Driven and Back. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2016**, *7* (17), 3302–3306.
- Śmiechowski, M.; Schran, C.; Forbert, H.; Marx, D. Correlated Particle Motion and THz Spectral Response of Supercritical Water. *Physical Review Letters* **2016**, *116* (2).
- Hölzl, C.; Kibies, P.; Imoto, S.; Frach, R.; Suladze, S.; Winter, R.; Marx, D.; Horinek, D.; Kast, S. M. Design Principles for High-pressure Force Fields: Aqueous TMAO Solutions from Ambient to Kilobar Pressures. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *144* (14), 144104.
- Weilbeer, C.; Selent, D.; Dybala, K. M.; Franke, R.; Spannenberg, A.; Börner, A. Evaluation of Organoselenium Based Compounds as Co-Catalysts in Rhodium-Catalyzed Hydroformylation. *ChemistrySelect* **2016**, *1* (17), 5421–5429.
- Wang, Y. M.; Hättig, C.; Reine, S.; Valeev, E.; Kjærgaard, T.; Kristensen, K. Explicitly Correlated Second-Order Møller-Plesset Perturbation Theory in a Divide-Expand-Consolidate (DEC) Context. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *144* (20), 204112.
- Suomivuori, C.-M.; Winter, N. O. C.; Hättig, C.; Sundholm, D.; Kaila, V. R. I. Exploring the Light-Capturing Properties of Photosynthetic Chlorophyll Clusters Using Large-Scale Correlated Calculations. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2016**, *12* (6), 2644–2651.
- Quell, T.; Beiser, N.; Dybala, K. M.; Franke, R.; Waldvogel, S. R. Facile and Selective Cross-Coupling of Phenols Using Selenium Dioxide: Facile and Selective Cross-Coupling of Phenols Using Selenium Dioxide. *European Journal of Organic Chemistry* **2016**, *2016* (25), 4307–4310.
- Behr, A.; Kämper, A.; Kuhlmann, R.; Vorholt, A. J.; Franke, R. First Efficient Catalyst Recycling for the Iridium-Catalysed Hydroformylation of 1-Octene. *Catal. Sci. Technol.* **2016**, *6* (1), 208–214.
- Kämper, A.; Warrelmann, S. J.; Reiswich, K.; Kuhlmann, R.; Franke, R.; Behr, A. First Iridium-Catalyzed Hydroformylation in a Continuously Operated Miniplant. *Chemical Engineering Science* **2016**, *144*, 364–371.
- Dopieralski, P.; Ribas-Arino, J.; Anjukandi, P.; Krupicka, M.; Marx, D. Force-Induced Reversal of β -Eliminations: Stressed Disulfide Bonds in Alkaline Solution. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, *55* (4), 1304–1308.
- Liu, J.; Kubis, C.; Franke, R.; Jackstell, R.; Beller, M. From Internal Olefins to Linear Amines: Ruthenium-Catalyzed Domino Water–Gas Shift/Hydroaminomethylation Sequence. *ACS Catalysis* **2016**, *6* (2), 907–912.
- Kapil, V.; Behler, J.; Ceriotti, M. High Order Path Integrals Made Easy. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, *145* (23), 234103.
- Morawietz, T.; Singraber, A.; Dellago, C.; Behler, J. How van Der Waals Interactions Determine the Unique Properties of Water. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **2016**, *113* (30), 8368–8373.

- *Hydroformylation: Fundamentals, Processes, and Applications in Organic Synthesis*; Börner, A., Franke, R., Eds.; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA: Weinheim, Germany, 2016.
- Zhang, B.; Jiao, H.; Michalik, D.; Kloß, S.; Deter, L. M.; Selent, D.; Spannenberg, A.; Franke, R.; Börner, A. Hydrolysis Stability of Bidentate Phosphites Utilized as Modifying Ligands in the Rh-Catalyzed *N*-Regioselective Hydroformylation of Olefins. *ACS Catalysis* **2016**, 6 (11), 7554–7565.
- Reinsdorf, A.; Korth, W.; Jess, A.; Terock, M.; Klasovsky, F.; Franke, R. Insights into Deactivation and Regeneration of an Industrial Cu/Ni/Cr-Al₂O₃ Catalyst During Aldehyde Hydrogenation. *ChemCatChem* **2016**, 8 (23), 3592–3599.
- Kubis, C.; Profir, I.; Fleischer, I.; Baumann, W.; Selent, D.; Fischer, C.; Spannenberg, A.; Ludwig, R.; Hess, D.; Franke, R.; Börner, A. In Situ FTIR and NMR Spectroscopic Investigations on Ruthenium-Based Catalysts for Alkene Hydroformylation. *Chemistry - A European Journal* **2016**, 22 (8), 2746–2757.
- Lu, D.; Qi, J.; Yang, M.; Behler, J.; Song, H.; Li, J. Mode Specific Dynamics in the H₂ + SH → H + H₂S Reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (42), 29113–29121.
- Natarajan, S. K.; Behler, J. Neural Network Molecular Dynamics Simulations of Solid–liquid Interfaces: Water at Low-Index Copper Surfaces. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (41), 28704–28725.
- Cheng, B.; Behler, J.; Ceriotti, M. Nuclear Quantum Effects in Water at the Triple Point: Using Theory as a Link Between Experiments. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2016**, 7 (12), 2210–2215.
- Schröder, H.; Sawall, M.; Kubis, C.; Selent, D.; Hess, D.; Franke, R.; Börner, A.; Neymeyr, K. On the Ambiguity of the Reaction Rate Constants in Multivariate Curve Resolution for Reversible First-Order Reaction Systems. *Analytica Chimica Acta* **2016**, 927, 21–34.
- Muñoz-Santiburcio, D.; Marx, D. On the Complex Structural Diffusion of Proton Holes in Nanoconfined Alkaline Solutions within Slit Pores. *Nature Communications* **2016**, 7, 12625.
- Frieze, D. H.; Hättig, C.; Rizzo, A. Origin-Independent Two-Photon Circular Dichroism Calculations in Coupled Cluster Theory. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18 (19), 13683–13692.
- Behler, J. Perspective: Machine Learning Potentials for Atomistic Simulations. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, 145 (17), 170901.
- Schmitz, G.; Hättig, C. Perturbative Triples Correction for Local Pair Natural Orbital Based Explicitly Correlated CCSD(F12*) Using Laplace Transformation Techniques. *The Journal of Chemical Physics* **2016**, 145 (23), 234107.
- Franke, R.; Haßelberg, J.; Stenger, F. ROMEO - A Major Step toward More Sustainable Processes. *Chemie Ingenieur Technik* **2016**, 88 (9), 1212–1212.
- Kämper, A.; Kucmierczyk, P.; Seidensticker, T.; Vorholt, A. J.; Franke, R.; Behr, A. Ruthenium-Catalyzed Hydroformylation: From Laboratory to Continuous Miniplant Scale. *Catal. Sci. Technol.* **2016**, 6 (22), 8072–8079.
- Liu, J.; Li, H.; Spannenberg, A.; Franke, R.; Jackstell, R.; Beller, M. Selective Palladium-Catalyzed Aminocarbonylation of Olefins to Branched Amides. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (43), 13544–13548.
- Wiebe, A.; Schollmeyer, D.; Dybala, K. M.; Franke, R.; Waldvogel, S. R. Selective Synthesis of Partially Protected Nonsymmetric Biphenols by Reagent- and Metal-Free Anodic Cross-Coupling Reaction. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (39), 11801–11805.
- Quell, T.; Mirion, M.; Schollmeyer, D.; Dybala, K. M.; Franke, R.; Waldvogel, S. R. Solvent-Dependent Facile Synthesis of Diaryl Selenides and Biphenols Employing Selenium Dioxide. *ChemistryOpen* **2016**, 5 (2), 115–119.

- Helmich-Paris, B.; Hättig, C.; van Wüllen, C. Spin-Free CC2 Implementation of Induced Transitions between Singlet Ground and Triplet Excited States. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2016**, 12 (4), 1892–1904.
- Lips, S.; Wiebe, A.; Elsler, B.; Schollmeyer, D.; Dyballa, K. M.; Franke, R.; Waldvogel, S. R. Synthesis of *Meta*-Terphenyl-2,2''-Diols by Anodic C–C Cross-Coupling Reactions. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (36), 10872–10876.
- Imoto, S.; Kibies, P.; Rosin, C.; Winter, R.; Kast, S. M.; Marx, D. Toward Extreme Biophysics: Deciphering the Infrared Response of Biomolecular Solutions at High Pressures. *Angewandte Chemie International Edition* **2016**, 55 (33), 9534–9538.
- Pérez de Tudela, R.; Marx, D. Water-Induced Zwitterionization of Glycine: Stabilization Mechanism and Spectral Signatures. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2016**, 7 (24), 5137–5142.

Didactics of Chemistry – Didaktik der Chemie

- Steff, H.; Schröder, T. P.; Buse, S.; Bär, L.; Vogel, F.; Heller, M.; Sommer, K. Analytik rund ums Holi-Pulver: Indisches Ritual und zeitgemäße Ausbildung. *Chemie in unserer Zeit* **2016**, 50 (1), 18–25.

Awarded PhD in 2016

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
Kohl	Bastian	Prof. Dr. R. Stoll	20.12.2016	NMR studies on the Potassium Channel Inhibitor Alpha-KTx 3.8 (Bs6), the Transcription Factor NFKB1 (p50) and the Intrinsically Disordered Protein HMGA1a
Kauer	Max	Prof. Dr. R.A. Fischer	16.12.2016	UHV-FTIRS and HR-XPS Studies on Defect-Engineered Metal-Organic Frameworks: Characterization and Reactivity
Wollny	Laura	Prof. Dr. M. Havenith-Newen	16.12.2016	Spectroscopic and computational study of model peptides in gas phase and solution
Yang	Fengkai	Prof. Dr. M. Muhler	16.12.2016	Metal Carbon Composites Applied for Electrochemical Water Splitting and Nitrobenzene Hydrogenation
Padovani	Alessia	Prof. Dr. F. Schüth	16.12.2016	Glucose Oxidation into Gluconic Acid: From Batch to Trickle Bed Reactor
Fernández Solís	Christian David	Prof. Dr. A. Erbe	16.12.2016	Application of biopolymer-organosiloxane hybrid films as protective barrier on metallic surfaces
Klein	Kathrin	Prof. Dr. N. Metzler-Nolte	13.12.2016	Synthesis and In-depth Biological Investigation of Ruthenium and Osmium Compounds with Resistance Breaking Anti-cancer Activity
Trotus	Ion-Teodor	Prof. Dr. F. Schüth	09.12.2016	Catalytic Conversion of Acetylene to Butadiene and Butenes
Calvaruso	Gaetano	Prof. Dr. R. Rinaldi	09.12.2016	On the Chemical Conversion of Lignin and Lignin Streams <i>via</i> Reductive Routes
Kennema	Marco Oskar	Prof. Dr. R. Rinaldi	09.12.2016	Hydrogen Transfer Reactions Catalyzed by Raney® - Nickel: Stability, Surface Analysis and Mechanistic Properties
Aniol	Alexandra Katharina	Prof. Dr. emer. M. Feigel	09.12.2016	Unsymmetrical Cavitands
Lu	Thi Hong Thanh	Prof. Dr. M. Hollmann	02.12.2016	Investigations on agonist specificity and heteromeric assembly of <i>Arabidopsis thaliana</i> glutamate-like receptor (AtGLR) subunits

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
Deng	Xiaohui	Dr. habil. H. Tüysüz	02.12.2016	Design and Engineering of Templated Cobalt Oxide Based Materials for Water Oxidation
Jambrec	Daliborka	Prof. Dr. W. Schuhmann	02.12.2016	Understanding Potential-Assisted Surface Modification - From Self-Assembled Monolayers to DNA Chips
Sevim	Ilhan	Prof. Dr. G. von Kiedrowski	01.12.2016	Self-Replication and Molecular Recognition in Diels-Alder Reactions Employing Cyclopentadiene and Maleimide Derivatives
Prieß	Marten	Prof. Dr. Schäfer	25.11.2016	Molekuldynamische Simulationen zur Aufklärung der Funktionsmechanismen von Membranproteinen
Vachharajani	Shivang	JP Dr. S. Ebbinghaus	25.11.2016	Huntingtin Exon 1 Conformations and Aggregation in the Absence and Presence of Macromolecular Crowders and Small Molecules
Sharma	Abhishek	JP Dr. S. Ebbinghaus	25.11.2016	Characterization of Temperature induced associative behavior of Huntingtin Exon-1 in Living Cells
Subedi	Prabal	Prof. Dr. K. Marcus	18.11.2016	THEMA Use of molecularly imprinted polymers for enrichment of phosphopeptides and alpha-Synuclein, and the mass spectrometric analyses of alpha-Synuclein in <i>post-mortem</i> human brains
Yu	Fangyan	Prof. Dr. K. Erdmann	11.11.2016	The role of SDCCAG3 in ciliogenesis
Ruby	Marc-Philipp	Prof. Dr. F. Schüth	02.11.2016	THEMA Säurefreie und metallfreie organische Polymere als Katalysatoren für die Umwandlung von Biomasse
Peeters	Daniel	Prof. Dr. A. Devi	28.10.2016	Chemical Vapor Phase Synthesis of Binary and Ternary Metal Oxides for Photocatalytic and Sensing Applications
Müller	Frank	Dr. N. Plumeré	14.10.2016	Erweiterte Stabilitätseffekte und redox-aktive Dendrimere für eine orientierte Immobilisierung von Redoxenzymen auf Elektroden
Pryk	Niclas	Prof. Dr. F. Schulz	14.10.2016	Reduzierte Polyketide - Semisynthetische Makrolid-Derivatisierungen und synthetische

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
				Beiträge zur mechanischen Biosynthese
Lüken	Alexander	Prof. Dr. M. Muhler	12.10.2016	Towards mechanistic studies of heterogeneously catalyzed reactions in the liquid phase: Solvent effects & reference systems
Schöpel	Miriam	Prof. Dr. R. Stoll	07.10.2016	Comprehensive multidimensional NMR studies on the interaction between Ras-like GTPases and Bisphenol
Dushina	Anastasia	Prof. Dr. F. La Mantia	05.10.2016	Electrochemical Study of the Electrolytes / Active Material Interaction in Aqueous Metal-Ion Batteries
Grote	Jan-Philipp	Dr. K. J. J. Mayrhofer	05.10.2016	Design of an Advanced Analytical Instrument for Fast Activity and Selectivity Investigations - Identifying Catalysts for the Efficient Electrochemical CO ₂ Reduction via Material Screening
Li	Huanguang	Dr. N. Plumeré	05.10.2016	Redox Protein Immobilization on Electrodes - from Au-C Covalent Attachment to Redox Hydrogel Matrix Entrapment
Yanik	Fatih	Prof. Dr. W. Grünert	28.09.2016	Core-Shell nanoalloys as electrocatalysts for oxygen reduction reaction in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells
Galozzi	Sara	Prof. Dr. Katrin Marcus	26.09.2016	Development of Mass Spectrometry-based Identification and Quantification Methods for Protein Biomarkers in Alzheimer's and Parkinson's Diseases
Vu	Quang Huy	Prof. Dr. K. Morgenstern	22.09.2016	Nano structure kinetics far from equilibrium on noble metal surfaces: Growth of Co on Cu(111) and vacancy island shape fluctuations on Ag(100)
García Niño	Grecia Carolina	Prof. Dr. W. Schuhmann	19.09.2016	Metal anodes for next generation secondary batteries. The case of Zn and Li
Rösler	Christoph	Prof. Dr. R. A. Fischer	19.09.2016	Encapsulation of Mono- and Bimetallic Nanoparticles into Metal-Organic Frameworks - Modulation of Activity and Selectivity for Liquid-Phase Reactions

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
Zhang	Wenhua	Prof. Dr. R. A. Fischer	19.09.2016	Controlled Modification of Metal-Organic Frameworks at Metal Sites: Local Environment Study and Properties
Zhao	Fangyuan	Prof. Dr. W. Schuhmann	19.09.2016	Photosystem 1/redox polymer-based bioelectrodes as the basis for efficient biophotovoltaic devices
Krech	Daniel	Prof. Dr. F. Schüth	26.08.2016	Die komplexen Aluminiumhydride des Cäsiums und Rubidiums: (Mechano-) Chemische Synthese und Strukturuntersuchungen
Ihrig	Verena	PD Dr. W. M. J. Obermann	22.07.2016	Identifizierung von Inhibitoren des Hsp90-Aha1 Chaperonkomplexes zur Korrektur des Faltungsdefektes von CFTR Δ F508 bei Mukoviszidose
Rothenberg	Ina	Prof. Dr. G. Seebohm	15.07.2016	Molekulare, pharmakologische und evolutionäre Aspekte bei K ⁺ -V-Kanal-vermittelten Arrhythmien
Hundt	Franziska Christine	Dr. Dirk Wolters	08.07.2016	Mass Spectrometry-Based Label-Free Quantitation of the Rab GTPase Family from Cultured Human Cells
Kartaschew	Konstantin	Prof. Dr. M. Havenith-Newen	08.07.2016	Schwingungsmikrospektroskopische Untersuchung der Wirkung einer dielektrischen Barriereentladung auf Biomoleküle der Haut und Bakterien
Klosowski	Rafael Michael	Dr. Dirk Wolters	08.07.2016	Examination of Angiotensin II Mediated Signaling Pathways in Podocytes via Mass Spectrometry
Knake	Lukas Bernhard Maxim	Prof. Dr. M. Havenith-Newen	08.07.2016	Terahertz-Spektroskopie wässriger Lösungen unter Standard- und Hochdruckbedingungen
Strack	Martin	Prof. Dr. N. Metzler-Nolte	08.07.2016	About the Preparation of Peptide Conjugates - Synthesis, Conjugation Chemistry and Biological Applications of Alkyne Modified Peptides
Schneemann	Andreas	Prof. Dr. R. A. Fischer	05.07.2016	Linker Functionalization as a Tool for Imparting Functionality into Metal-organic Frameworks
Gutkowski	Ramona	Prof. Dr. W. Schuhmann	01.07.2016	Photoelectrocatalytic energy conversion using metal oxide composite photoanodes
Pinyou	Piyanut	Prof. Dr. W. Schuhmann	01.07.2016	Optimization of Bioelectrochemical Interfaces for Biosensors and Biofuel Cells
Reidick	Christina	Jun.-Prof. Dr. H. Platta	01.07.2016	Charakterisierung von Phosphatidylinositol 3-phosphat

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
				abhängigen intrazellulären Transportprozessen in <i>Saccharomyces cerevisiae</i>
Koopmans	Kyra R. M.	Prof. Dr. F. Schulz	30.06.2016	Extension of Nascent Polyketides - An Enzymological Perspective
Klasen	Tim	Prof. Dr. F. Schüth	27.06.2016	Poröse Polymere als Katalysator und Katalysator-Trägermaterial
Eisenhauer	Kirstin Diana	Prof. Dr. Klaus Gerwert	24.06.2016	MD-Simulationen zur Aufklärung des molekularen Reaktionsmechanismus in Channelrhodopsin-2
Gothe	Yvonne	Prof. Dr. N. Metzler-Nolte	24.06.2016	Iridium Compounds as Prospective Anti-Cancer Agents: Biological Investigations on Novel Iridium(I)-NHC Complexes
Niedieker	Daniel	Prof. Dr. Klaus Gerwert	24.06.2016	Cell and disease classification by spontaneous Raman and CARS-microscopy
Terhag	Jan	Prof. Dr. M. Hollmann	24.06.2016	Auxiliary Subunits of Voltage-Gated Calcium Channels as Modulators of Ionotropic Glutamate Receptors
Decaneto	Elena	Prof. Dr. M. Havenith-Newen	29.04.2016	Structural and Spectroscopic Characterization of the Catalytic Domain of Human Membrane Type 1 Matrix Metalloproteinase: Catalytic Mechanism, Stability and Inhibition
Hamm	Ines Lena	Prof. Dr. M. Wark	29.04.2016	Synthese und Charakterisierung von Ti- und Fe-basierten Oxid-Photokatalysatoren mittels Niedertemperatursynthesemethode in ionischen Flüssigkeiten
Lawzer	Arunlibertsen	Prof. Dr. W. Sander	29.04.2016	Matrix isolation study of frustrated Lewis pairs and metal carbynes
Böhm	Fabian	Prof. Dr. M. Havenith-Newen	22.04.2016	Terahertz Spectroscopy of Hydrophilic and Hydrophobic Solutes in Aqueous Solution - Effects of Salts and Alcohols on Water and <i>Vice Versa</i>
Buchholz	Marie Christine Hele	Prof. Dr. St. Hahn	22.04.2016	Vergleichende anti-neoplastische Charakterisierung der Substanz 2250 mit ihrer Muttersubstanz Taurolidin - <i>in vitro</i> und <i>in vivo</i>
Heikens geb. Berndt	Benjamin	Prof. Dr. I. Dietzel-Meyer	22.04.2016	Charakterisierung von Hybriden aus Brustkrebszellen und Zellen mit Stammzeleigenschaften
Junge	Christoph Günter	Prof. Dr. med. A. Tannapfel	15.04.2016	Transkriptom- und Interaktomanalyse von <i>miR-148a</i> mittels mRNA-Microarray nach

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
				Biotin-miRNA-Pull-Down im duktalem Adenokarzinom des Pankreas
Schmitz	Gunnar Alexander	Prof. Dr. C. Hättig	15.04.2016	Explizit korrelierte lokale Korrelationsmethoden unter Verwendung von paarspezifischen natürlichen Orbitalen
Braun	Nadine	Prof. Dr. M. Muhler	08.04.2016	Oxidative processes for the direct conversion of coal under mild conditions
Grewe	Tobias	Dr. Harun Tüysüz	08.04.2016	Nano-Engineered Tantalum-Based Materials for Photocatalytic Water Splitting
Tölle	Katharina	Prof. Dr. M. Muhler	08.04.2016	Synthesis and characterisation of Cu/ZrO ₂ catalysts for the hydrogenation of ethyl acetate
Contin	Andrea	Prof. Dr. W. Schuhmann	07.04.2016	pH Responsive Polymers for Electrochemical Signal Generation and Amplification. Detection of Redox Inactive Redox Processes.
Costa	Paolo	Prof. Dr. W. Sander	07.04.2016	Solvation of Arylcarbenes: A Matrix Isolation Study
Grützke	Stefanie	Prof. Dr. W. Schuhmann	07.04.2016	Kopplung von elektrochemischen Methoden mit oberflächenverstärkter Ramanstreuung
Richter geb. Nzita	Geneviève	Prof. Dr. W. Sander	07.04.2016	Matrixisolutionsstudien von Arylhalogencarbenen und 1,3-Di- <i>tert</i> -butylimidazol-2-yliden
Clausmeyer	Jan	Prof. Dr. W. Schuhmann	01.04.2016	Micro- and Nanoelectrochemistry for Surface Patterning, Biosensing and Electrocatalysis
Schwering	Nina Katrin	Prof. Dr. I. Dietzel-Meyer	01.04.2016	Der Einfluss der Osmolarität des Kulturmediums sowie unterschiedlicher Kationenkanalblocker auf die Migration von Oligodendrozytenvorläuferzellen
Ferrini	Paola	Dr. R. Rinaldi	04.03.2016	Catalytic Upstream Biorefining of Lignocelluloses to Lignin Oils and Hydrolysable Hemicelluloses
Kramer	Daniel	Prof. Dr. G. von Kiedrowski	01.03.2016	Organoautocatalysis in Diels-Alder and Mannich-Reactions
Panagiotidis	Christos	Prof. Dr. G. von Kiedrowski	29.02.2016	Sequence-Addressed Assemblies of Trisiliconucleotides into Nanoscale Motifs and Structural Studies

NAME	VORNAME	PRUEFER1	PROMDATE	THEMA
Ali	Ahmed Faisal Ahmed I	Prof. Dr. F. Schulz	19.02.2016	Fermentation and Biological Profiling of non-natural Polyketides
Weide	Philipp	Prof. Dr. M. Muhler	19.02.2016	Semiconducting Metal Oxides and Sulfides for Photocatalytic Hydrogen Evolution and Water Splitting
Wollenhaupt	Miriam	Prof. Dr. D. Marx	19.02.2016	Mechanochemie molekularer Systeme - Der Einfluss mechanischer Kräfte auf perizyklische Ringöffnungsreaktionen
Dittmer	Arne	Prof. Dr. M. Muhler	12.02.2016	Synthesis and Characterization of Bismuth Tungstate-supported Molybdena Catalysts for the Selective Oxidation of Propene and 1-Butene
Emmerich	Thomas	Prof. Dr. M. Muhler	12.02.2016	Ceria- and zirconia-based materials for the catalytic oxidation of CO and soot
Sauer	Anja	Prof. Dr. K. Sommer	12.02.2016	Materialwissenschaft im Schulbuch - Eine Analyse materialwissenschaftlicher Inhalte in Chemie-Schulbüchern mit einem Methodenvergleich für die Frequenz- und Raumanalyse
Kupka	Anna Katharina	Dr. K. Merz	22.01.2016	Untersuchungen zur Steuerung des Kristallisationsverhaltens von Aminosäuren in Lösung durch den Einsatz von Deuterium oder Biomineralen