

Faculty Report 2018

XIX. Fakultät für Chemie und Biochemie



Table of Contents

Vorwort des <i>Faculty Report Teams 2018</i>	4
Wolfgang Schuhmann	7
Prof. Dr. Axel Rosenhahn	8
Dr. Adrian Ruff	9
Dr. Felipe Conzuelo	10
Prof. Dr. Nicolas Plumeré	11
Prof. Dr. Kristina Tschulik	12
Michael Hollmann	14
Prof. Dr. Thomas Günther-Pomorski	15
Rolf Heumann	16
Raphael Stoll	17
Prof. Dr. Katrin Sommer	18
Enrica Bordignon	19
Prof. Dr. Martin Muhler	20
Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte	21
Dr. Ulf-Peter Apfel	22
Dr. Klaus Merz	23
Prof. Dr. Viktoria Däschlein-Gessner	24
Prof. Dr. Anjana Devi	25
Prof. Dr. Rochus Schmid	26
Prof. Dr. Lukas Gooßen	27
Prof. Dr. Frank Schulz	28
Prof. Dr. Stefan Huber	29
Prof. Dr. Wolfram Sander	30
Dr. Christian Merten	31
Prof. Dr. Karina Morgenstern	32
Prof. Dr. Christian Herrmann	33
Prof. Dr. Martina Havenith	34
Prof. Dr. Poul Petersen	35
Dominik Marx	36
Prof. Dr. Christof Hättig	37
Dr. Michael Römelt	38
Robert Franke	39
Lars Schäfer	40
List of Publications 2018	41
Analytical Chemistry I	41
Analytical Chemistry II	45
Biochemistry I	45
Biochemistry II	46

Didactics of Chemistry	47
EPR Spectroscopy	47
Inorganic Chemistry I.....	47
Inorganic Chemistry II	49
Organic Chemistry I.....	50
Organic Chemistry II.....	51
Physical Chemistry I	52
Physical Chemistry II.....	53
Theoretical Chemistry	54

Vorwort des *Faculty Report Teams* 2018

Liebe Leserinnen und Leser,

auch wenn das Jahr 2019 bereits in vollem Gange ist, lohnt es sich auf das Wissenschaftsjahr 2018 in der XIX. Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum zurückzublicken. Unseren Gruppenleitern ist es im Jahr 2018 wieder gelungen beeindruckende Erkenntnisse in ihren einzelnen wissenschaftlichen Fachbereichen zu erzielen und die Ruhr-Universität Bochum angemessen zu repräsentieren sowie zum hohen Standard unserer Forschungseinrichtung beizutragen.

Wie in den vergangenen Jahren auch bietet der *Faculty Report* den einzelnen Lehrstühlen und Arbeitsgruppen unserer Fakultät die Plattform, um ihre aufsehenerregendste Publikation hervor zu heben. Des Weiteren sind alle unter dem Dach der Fakultät erschienen Publikationen in diesem Bericht aufgeführt. Diese Informationen wurden von den Masterstudenten der Chemie des *Faculty Report Teams* 2018 in Kooperation mit den Gruppenleitern zusammengetragen, bei denen wir uns an dieser Stelle ausdrücklich bedanken möchten. Bei tiefergehendem Interesse an den präsentierten Forschungsbeiträgen steht es Ihnen frei, die Gruppen persönlich über die auch hier im Bericht angegebenen Kontaktdaten zu erreichen. Aufgrund der neuen EU Datenschutz Richtlinie (DSGVO) dürfen dieses Jahr die Namen der Studenten die einen Abschluss erreicht haben nicht veröffentlicht werden.

Wir hoffen, dass Ihnen das Studium unseres *Faculty Reports* einen lehrreichen und erfreulichen Rückblick auf das Forschungsjahr 2018 liefert!

Mit besten Wünschen für ein erfolgreiches 2019

Ihr *Faculty Report Team* 2018

Felix Hiege
Adrian Buchmann
Michelle Judaeva
Jonas Goebel
Justine Bassil
Philipp Schwiderowski
Maximilian.Purcel
Philipp Meyer
Svenja Jaeger
Dominik Welzel
Pascal Telaar
Kseniya Gorbatenko
Mykhailo Kondratiuk

Preface of the Faculty Report Team 2018

Dear Readers,

the year 2019 is already in full swing, therefore it is time to look back at the scientific work of the year 2018 in the XIX. Faculty of Chemistry and Biochemistry at the Ruhr-University Bochum. Our group leaders have managed to achieve important findings in their respective fields and suitably represent the university as well as holding up the high standard of our institute.

Similar to the recent years the Faculty Report offers the different chairs and groups of our faculty the platform to display their most inspiring publication. Furthermore, all publications that have been published under the roof of the faculty during the year 2018 are listed in this report. This information was collected by master students of chemistry in their work on the faculty report 2018 in cooperation with the group leaders, whom we would like to sincerely thank for their effort. If there is interest for supplementary information in the displayed topics it is possible to inquire further material from the group leaders via the given contact data. Unfortunately, the list of graduated students cannot be published this year due to the new EU data protection guidelines (DSGVO).

We hope you enjoy the study of the Faculty Report and have an informative and pleasant review of the scientific year 2018!

We wish you a successful year 2019

Your Faculty Report team 2018

Felix Hiege
Adrian Buchmann
Michelle Judaeva
Jonas Goebel
Justine Bassil
Philipp Schwiderowski
Maximilian.Purcel
Philipp Meyer
Svenja Jaeger
Dominik Welzel
Pascal Telaar
Kseniya Gorbatenko
Mykhailo Kondratiuk

Vorwort der Dekanin / Preface of the Dean

Liebe Leserinnen und Leser,

mit den vielfältigen Beiträgen der Wissenschaftler der Fakultät für Chemie und Biochemie in dem Ihnen vorliegenden Forschungsbericht erhalten Sie in einen Überblick über einige der wichtigsten Forschungsergebnisse, die an unserer Fakultät im Jahr 2018 publiziert wurden, sowie ein vollständiges Publikationsverzeichnis. Sollten einzelne Themen Ihr Interesse geweckt haben, so finden Sie weiterführende Informationen unter den angegebenen Adressen der Homepages der Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (<https://www.chemie.ruhr-uni-bochum.de/index.html>).

Den Beitragenden sowie den Masterstudenten, die diesen Forschungsbericht im Rahmen des Praktikums „Introduction to the scientific community (ITSC)“ zusammengestellt haben, danke ich im Namen der Fakultät herzlich.

Ihnen wünsche ich viel Vergnügen beim Lesen.

Karina Morgenstern

Dear Readers,

The present research report gives you an overview over the large variety of research field followed in the Department of Chemistry and Biochemistry as published in 2018. The highlights of peer reviewed articles are specified in the individual contributions. For further information about these topics, please visit the researcher's home pages, as specified, or the one of our Department (<https://www.chemie.ruhr-uni-bochum.de/index.html>).

Thanks to all contributors and specifically to the master students that put this report together in their course work of "Introduction to the scientific community (ITSC)".

Have fun reading,

Karina Morgenstern

Wolfgang Schuhmann

Analytical Chemistry - Center for Electrochemical Sciences (CES)

Ruhr-University Bochum; D-44780 Bochum

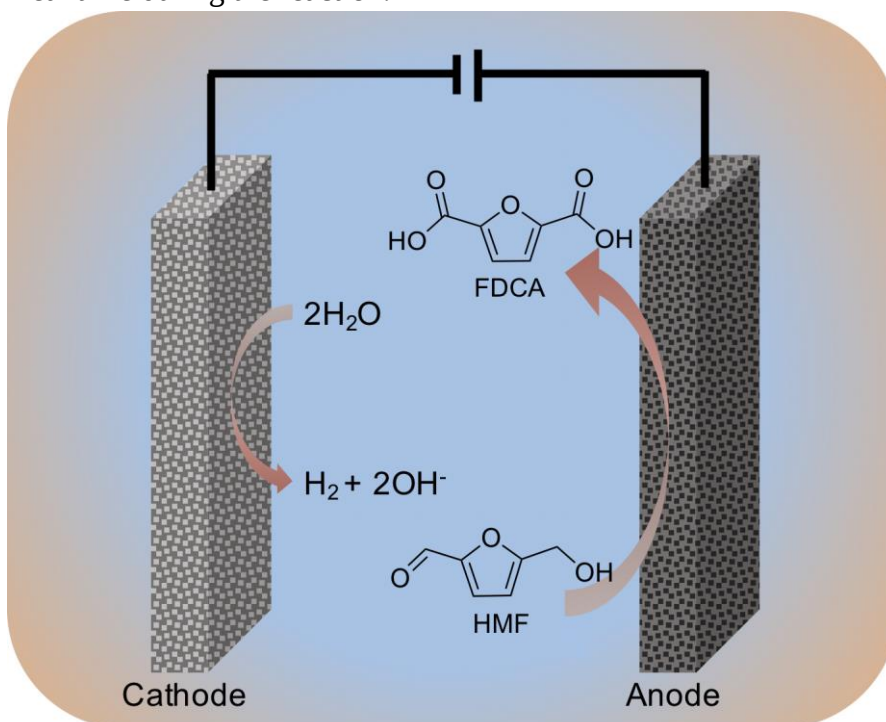
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683

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

S. Barwe, J. Weidner, S. Cychy, D. M. Morales, D. Hiltrop, J. Masa, M. Muhler, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **57** (2018) 11460-11464.

Electrocatalytic 5-(hydroxymethyl)furfural oxidation using high surface area nickel boride.

A new, low-cost catalyst for the potential production of polymer building blocks was developed, which turns the biorefinery product hydroxymethylfurfural (HMF) into FDCA (2,5-furandicarboxylic acid) which is a starting material for the synthesis of polymers ultimately providing a sustainable alternative to widespread PET. At the same time, hydrogen as a potential energy source can also be formed during the reaction at the cathode. The proposed non-precious metal-based nickel boride catalyst is readily available and affordable as compared to many other catalysts. FDCA is supposed to be interesting for the industry because it can be processed into polyesters, namely PEF, an alternative to PET. The catalyst converted 98.5 % of the starting material HMF into FDCA within half an hour; and no waste products were created. The catalyst was designed in such a way that it is effective under the same conditions under which hydrogen production is also successful. Hydrogen is usually acquired from water using electrolysis, which also produces oxygen. The particularly energy-consuming reaction step, namely the oxygen evolution reaction, was eliminated by linking hydrogen evolution at the cathode with FDCA production at the anode. By combining electrochemistry with FT-IR spectroscopy, the reaction pathway from HMF to FDCA including all intermediates could be elucidated in real time during the reaction.



Reaction scheme for the simultaneous electrolytic formation of hydrogen and conversion of HMF to FDCA using a nickel boride-modified cathode.

Prof. Dr. Axel Rosenhahn

Analytical Chemistry – Biointerfaces [Number]

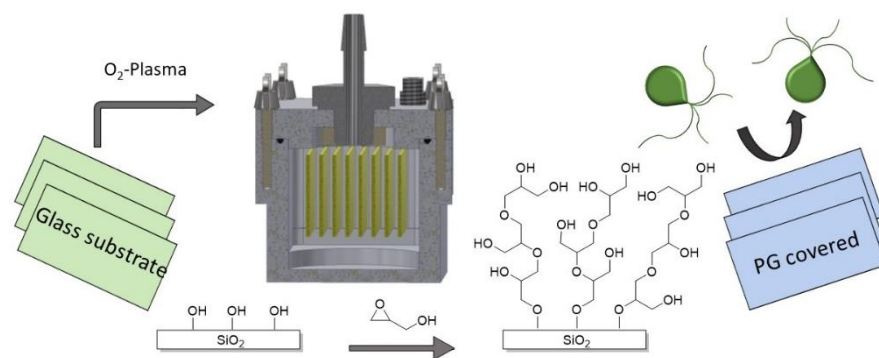
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: +49 234 32-24200

Email: axel.rosenhahn@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/biointerfaces/index.html>

Robin Wanka, John A. Finlay, Kim A. Nolte, Julian Koc, Victoria Jakobi, Charlotte Anderson, Anthony S. Clare, Harrison Gardner, Kelli Z. Hunsucker, Geoffrey W. Swain, and Axel Rosenhahn, *ACS Applied Materials & Interfaces* 2018, 10(41), 34965

Fouling-Release Properties of Dendritic Polyglycerols against Marine Diatoms



TOC: Dendritic polyglycerol coatings prepared via surface-initiated ring-opening polymerization were discovered as marine fouling-release coatings

Polyethylene glycol (PEG) based surface coatings show outstanding antifouling properties, which are commonly assigned to their hydrophilicity and their highly hydrated nature. A structurally related but hyperbranched version are polyglycerols (PGs) that increase the spatial density of non-fouling polymer units and decrease the defect density in coatings. Using a surface-initiated ring-opening polymerization reaction, we grafted dendritic PGs on surfaces and the fouling-release properties against marine organisms were determined. The resulting samples were characterized by spectroscopic ellipsometry, contact angle goniometry, ATR-FTIR and stability experiments. A high resistance towards the attachment of different proteins was found. The PG coatings with three different thicknesses were tested in a laboratory assay against the diatom *Navicula incerta* and in a field assay using a rotating disk. The initial attachment of diatoms under static conditions was similar on the PGs as compared to a hydrophobic control. However, PGs show outstanding fouling release properties. Up to 94% of attached diatoms could be removed from the coatings after the exposure to a shear stress of 19 Pa. These results were confirmed in field experiments.

Polyethylenglycol (PEG) basierte Beschichtungen zeigen außergewöhnliche antifouling Eigenschaften. Als Grund hierfür gilt ihre hohe Hydrophilie und die Fähigkeit Wasser zu speichern. Eine strukturell verwandte, aber dendritisch verzweigte Version von PEG, sind Polyglycerole (PGs). Aufgrund der dendritischen Struktur weisen sie eine höhere Dichte an funktionellen Gruppen auf. Mit Hilfe der Ringöffnungspolymerisation haben wir PGs kovalent auf Substrate aufgebracht und ihre antifouling Eigenschaften erforscht. Neben der Charakterisierung durch spektroskopische Ellipsometrie, Kontaktwinkel-Goniometrie und ATR-FTIR wurden Stabilitäts- und Proteinresistenz-Assays durchgeführt. PG zeigte eine hohe Resistenz gegenüber Proteinen und eine sehr gute Langzeitstabilität in Meerwasser. Drei verschiedene Schichtdicken der PGs wurden genutzt um in Laborassays mit *Navicula incerta* und in Feldexperimenten die antifouling und fouling-release Eigenschaften der Oberflächen zu bestimmen. Trotz einer hohen initialen Besiedlung durch Algen zeigten die PGs eine ungewöhnlich große Fähigkeit gesiedelte Algen wieder abzustreifen. Lediglich ein geringer Wasserstrom (19 Pa) war nötig um bis zu 94% der Algen von den Beschichtungen zu entfernen. Diese exzellenten fouling-release Eigenschaften wurden in dynamischen Feldexperimenten bestätigt.

Dr. Adrian Ruff

Analytical Chemistry – Center for Electrochemical Sciences (CES), Redox Polymers and Bioelectrocatalysis

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

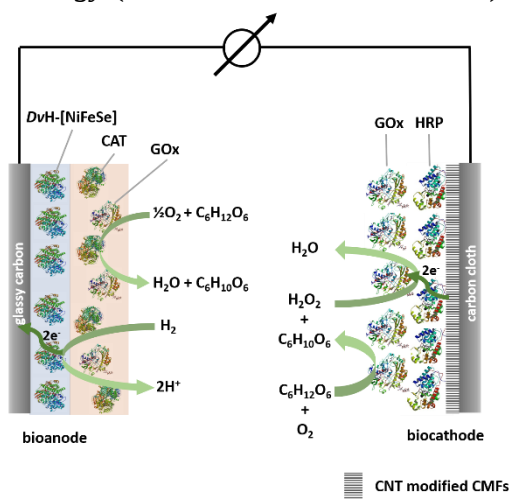
Tel.: ++49-(0)234-32-24208; Fax.: ++49-(0)234-14683

Email: adrian.ruff@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/Adrian/Adrian-Ruff.html>

A. Ruff, J. Szczesny, N. Marković, F. Conzuelo, S. Zacarias, I. A.C. Pereira, W. Lubitz, W. Schuhmann, *Nature Communications* **9**, Article number: 3675 (2018)

A fully protected hydrogenase/polymer-based bioanode for high-performance hydrogen/glucose biofuel cells

Hydrogenases are highly active biocatalysts for the interconversion of hydrogen with active centers that are solely based on the abundant metals Ni and/or Fe. Thus, these biocatalysts are promising models for new efficient and economic catalysts in fuel cell applications. However, beside their high activity, the active centers are highly sensitive towards oxygen and thus an efficient protection is required for hydrogenase based H₂-oxidation bioanodes. In this paper we combined the protection properties of a low potential O₂-reducing viologen modified polymer matrix and a bienzymatic O₂-scavenging system to fully protect a hydrogenase under operational conditions. Combined to an oxidase/peroxidase based biocathodes a biofuel cell with an remarkable OCV of 1.15 V and power densities of $\approx 0.5 \text{ mW cm}^{-2}$ at 0.85 V was accessible. The work was highlighted in *Nat. Catal.* (10.1038/s41929-018-0174-6) and *Nat. Energy* (10.1038/s41560-018-0271-4).



Schematic of the proposed biofuel cell equipped with a doubly protected hydrogenase/polymer based bioanode and an oxidase/horseradish peroxidase based biocathode. The hydrogenase was protected by a O₂ reducing low potential redox polymer (blue layer) and a O₂ scavenging system immobilized on top of the H₂-oxidation layer (pink layer). DvH-[NiFeSe] = NiFeSe hydrogenase from *Desulfovibrio vulgaris* Hildenborough; CAT = catalase, GOx = glucose oxidase, HRP = horseradish peroxidase.

Hydrogenasen sind hoch-aktive Biomoleküle, die die Oxidation von Wasserstoff zu Protonen katalysieren. Die aktiven Zentren dieser Biokatalysatoren basieren dabei einzig auf den Elementen Ni und/oder Fe. Dadurch stellen diese Verbindungen vielversprechende Modelle für neue effiziente und kostengünstige Katalysatoren für Anoden in Brennstoffzellen dar. Neben ihrer hohen Aktivität weisen diese Biomoleküle allerdings eine sehr hohe Sensitivität gegenüber O₂ auf. Somit ist ein effizienter Schutz unter Betriebsbedingungen unerlässlich. In diesem Beitrag kombinierten wir die Schutzeigenschaften eines O₂-reduzierenden viologen modifizierten Redoxpolymers mit einem bienzymatischen O₂-Entfernungssystem, wodurch die Hydrogenase unter Betriebsbedingungen vollständig geschützt werden konnte. Kombination der geschützten Hydrogenase Bioanode mit einer Oxidase/Peroxidase basierten Biokathode erlaubte den Zugang zu einer Biobrennstoffzelle mit einer Leerlaufspannung von 1.15 V und einer Leistung von $\approx 0.5 \text{ mW cm}^{-2}$ bei 0.85 V. Die Arbeit wurde in *Nat. Catal.* (10.1038/s41929-018-0174-6) und *Nat. Energy* (10.1038/s41560-018-0271-4) als Forschungshighlight vorgestellt.

Dr. Felipe Conzuelo

Analytical Chemistry – Center for Electrochemical Sciences

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225474; Fax.: ++49-(0)234-3214683

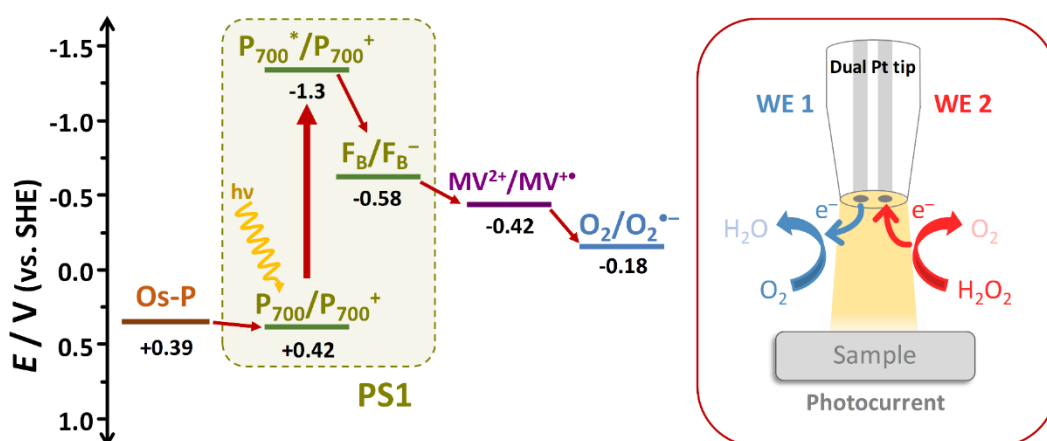
Email: felipe.conzuelo@ruhr-uni-bochum.de; <https://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/Felipe/Felipe-Conzuelo>

F. Zhao, S. Hardt, V. Hartmann, H. Zhang, M. M. Nowaczyk, M. Rögner, N. Plumeré, W. Schuhmann, F. Conzuelo, *Nature Communications* (2018) 9:1973

Light-induced formation of partially reduced oxygen species limits the lifetime of photosystem 1-based biocathodes.

Why bioelectrodes for energy conversion are not stable:

The use of natural biomolecules participating in photosynthesis for the fabrication of photovoltaic devices constitutes an interesting strategy for the development of cost-effective and environmentally friendly energy conversion systems. Although protein complexes such as photosystem 1 (PS1) are surprisingly stable in nature, the use of isolated PS1 in semi-artificial devices is associated with a considerably low long-term stability. In our work, analysis of a PS1-based photocathode reveals the generation of reactive oxygen species under light irradiation that are responsible for the loss in activity over time and highlight the importance of operation of the biodevice in an oxygen-free environment.



Operation of a photosystem 1 (PS1) biocathode in the presence of oxygen leads to the generation of reactive oxygen species (left). The use of scanning photoelectrochemical microscopy (right) allows simultaneous monitoring of the photocurrent and associated production of partially reduced oxygen species.

Warum Bioelektroden für die Energieumwandlung nicht stabil sind:

Die Verwendung natürlicher Biomoleküle, die an der Photosynthese beteiligt sind, zur Entwicklung von Photovoltaiksystemen, stellt eine interessante Strategie für zukünftige kostengünstige und umweltfreundliche Energieumwandlungssysteme dar. Obwohl die photosynthetischen Proteinkomplexe wie z.B. Photosystem 1 (PS1) in der Natur überraschend stabil sind, ist isoliertes PS1 in semiartifiziellen Systemen auf Dauer nicht funktionstüchtig. Unsere Analyse einer PS1 Photokathode zeigt die Erzeugung reaktiver Sauerstoffspezies induziert durch die Bestrahlung mit Licht. Diese sind für den Aktivitätsverlust im Lauf der Zeit verantwortlich. Die vorgestellten Ergebnisse unterstreichen die Wichtigkeit der Anwendung solcher photovoltaischer Zellen in sauerstofffreier Umgebung.

Prof. Dr. Nicolas Plumeré

Chair of Analytical Chemistry – Center for Electrochemical Sciences

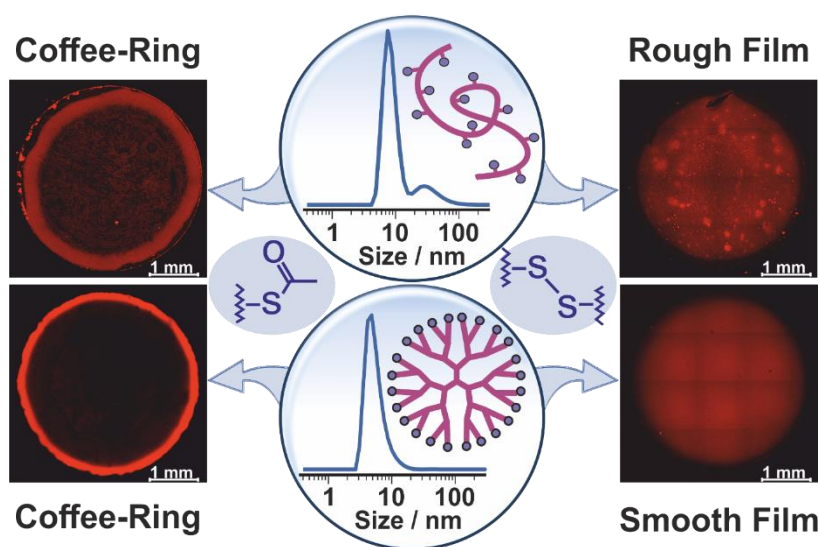
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3229434; Fax.: ++49-(0)234- 3214420

Email: nicolas.plumere@rub.de; www.ruhr-uni-bochum.de/nanostructures/index.html

H. Li, D. Buesen, R. Williams, J. Henig, S. Stapf, K. Mukherjee, E. Freier, W. Lubitz, M. Winkler, T. Happe and N. Plumeré, *Chemical Science*, **2018**, 9, 7596-7605

Preventing the Coffee-Ring Effect and Aggregate Sedimentation by in Situ Gelation of Monodisperse Materials



Elucidation of the mechanism for “coffee-ring” formation from drying droplets (Deegan, *Nature* 1997) has triggered the development of a multitude of approaches to assemble films with uniform thicknesses from drop-casting or inkjet printing (Yunker, *Nature* 2011; Larsson, *Nature* 2017). The remaining unsolved question is how to achieve macroscale cohesion in such films. This is essential

for applications which require concerted functionality such as long-range charge transport, light-induced energy transfer or macroscopic plasmonic effects.

Our key finding is that a mechanism for film formation that avoids aggregate sedimentation by inducing homogeneous in-situ gel formation in the full volume of the droplets, leads to uniform deposition. We introduce an in-situ gelation method based on spontaneous thiocetate crosslinking to form disulfide bridges between perfectly monodisperse building blocks to lock the materials in the volume of the droplet. While other strategies are also able to prevent “coffee-ring” formation, in-situ gelation has the advantage of providing a coherent, interconnected matrix originated from a single volume (the droplet), in contrast to the accumulation of disconnected volumes obtained from aggregate sedimentation. We illustrate the impact of this method with bioelectrocatalyst for H and NADPH oxidation. Peak performances are comparable to previously studied systems but are reached at 10-fold thinner thicknesses owing to the high control on film cohesion and thickness homogeneity, thus setting a new benchmark in catalyst utilization.

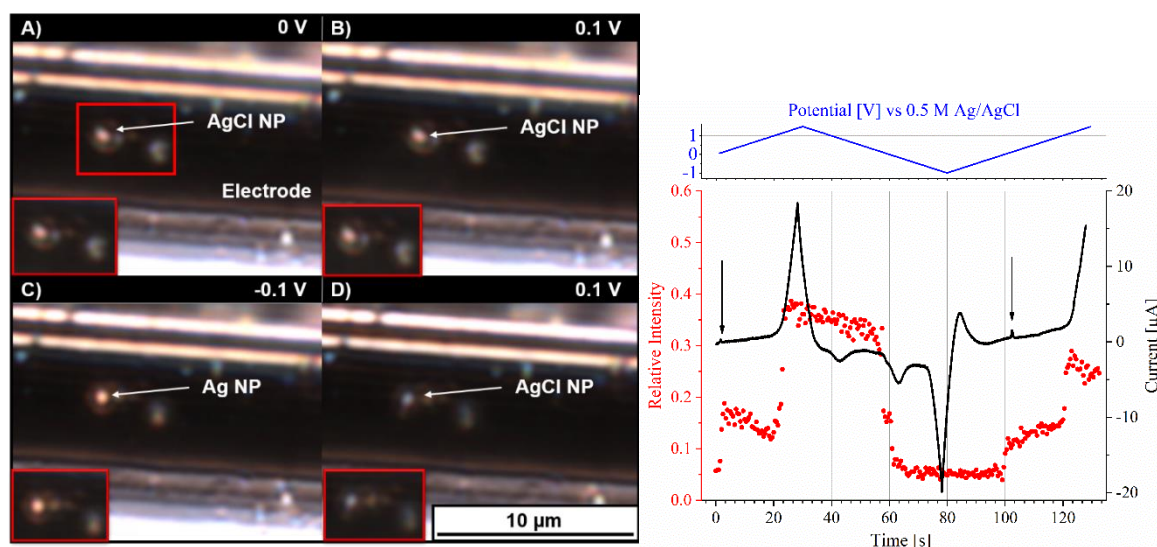
This general concept will serve as blueprint for the future design of materials for drop-casting and will facilitate the development of inkjet printing for photovoltaics, electrocatalysis, displays, sensors and a variety of other systems requiring films with macroscale cohesion.

Kevin Wonner, Mathies V. Evers, and Kristina Tschulik, *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 40, 12658-12661

Simultaneous Opto- and Spectro-Electrochemistry: Reactions of Individual Nanoparticles
Uncovered by Dark-Field Microscopy

Despite the frequent use of Ag nanoparticles in consumer products and medical treatments, their reactivity and degradation in aqueous solutions are still under debate. Here we investigate this reactivity by an in situ opto- and spectro-electrochemical approach. Using dark-field microscopy coupled to a spectrophotometer and to an electrochemical cell, redox reactions of individual Ag nanoparticles are analyzed in the presence of chloride. The intensity and spectral position of the linear surface plasmon resonance of an individual particle are tracked simultaneously and in real time during cyclic voltammetry. They both change instantaneously with the detected current in a chemically reversible manner. Thus, it is demonstrated that the intensity decrease of the optical signal at the Ag peak position is due to the reversible formation of AgCl and not by dissolution of Ag to Ag^+ . Moreover, at largely positive potentials, further transformation to Ag_2O_3 or AgClO_3 is revealed spectroscopically, although the electrochemical current is hidden by water and chloride oxidation [1]. Hence, the combination of electrochemistry with dark-field microscopy and hyperspectral imaging is presented as a novel tool for real-time analysis of electrochemical reactions of nanoparticles on a single particle level [2].

- [1] Wonner, K.; Evers, M. V.; Tschulik, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 12658–12661,
 [2] Evers, M. V.; Wonner, K.; Tschulik, K. *Nachr. Chem.* **2018**, 66, 1153–1156.



Left: Dark-field microscopy images of silver and resulting silver chloride nanoparticles attached to an electrode in potassium chloride solution at different potentials during cyclic voltammetry. Right: Correlated plot of the applied potential (blue), the relative intensity of the scattered light (red) and the current (black) depending on the time.

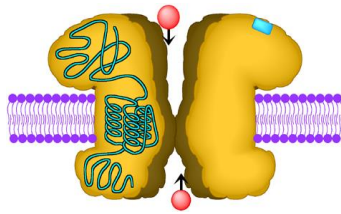
Trotz der zunehmenden Verwendung von Silber-Nanopartikeln in industriellen und medizinischen Produkten sind deren Reaktivität und Abbau in biologischen Systemen weitgehend ungeklärt. In dieser Arbeit klären wir die Reaktivität individueller Nanopartikel mittels Dunkelfeldmikroskopie und hyperspektraler Analyse auf. Dafür wird eine neuentwickelte elektrochemische Zelle in einem Dunkelfeldmikroskop implementiert und die elektrochemischen Reaktionen von Silber-Nanopartikeln in Anwesenheit von Chlorid untersucht.

Dabei werden die Intensität und die spektrale Position der Oberflächenplasmonenresonanz genauer untersucht. Beide alternieren reversibel, wenn ein Stromsignal im entsprechenden zyklischen Voltammogramm beobachtet wird. Anhand dieser spektralen Änderung kann geschlossen werden, dass sich die Nanopartikel nicht in der Elektrolytlösung auflösen, sondern schwerlösliches Silberchlorid formen. Des Weiteren kann beobachtet werden, dass bei sehr hohen Überpotentialen eine weitere Umwandlung zu höheren Silberoxid-Spezies oder Silber-Chlorit gebildet werden kann, obwohl das Stromsignal durch die elektrochemische Wasserspaltung überlagert wird [1].

Die Kombination von Dunkelfeldmikroskopie und Elektrochemie ist somit eine effektive Methode, um Reaktionsdynamiken und Transformationen von einzelnen Silber-Nanopartikeln zu untersuchen. Diese Methode ist vielseitig einsetzbar und ermöglicht operando Reaktivitätsstudien von einzelnen Nanopartikeln unterschiedlicher Zusammensetzung [2].

[1] Wonner, K.; Evers, M. V.; Tschulik, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 12658–12661,

[2] Evers, M. V.; Wonner, K.; Tschulik, K. *Nachr. Chem.* **2018**, *66*, 1153–1156.



Michael Hollmann

Biochemistry I – Receptor Biochemistry
 Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
 Tel.: +49-(0)234-32-24225; Fax: +49-(0)234-32-14244
 Email: michael.hollmann@rub.de
 Website: <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1>

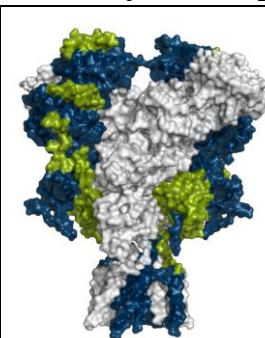
H. Pan, B. Oliveira, G. Saher, E. Dere, D. Tapken, M. Mitjans, J. Seidel, J. Wesolowski, D. Wakhloo, C. Klein-Schmidt, A. Ronnenberg, K. Schwabe, R. Trippe, K. Mätz-Rensing, S. Berghoff, Y. Al-Krinawe, H. Martens, M. Begemann, W. Stöcker, F.-J. Kaup, R. Mischke, S. Boretius, K.-A. Nave, J. K. Krauss, **M. Hollmann**, F. Lühder, and H. Ehrenreich, *Molecular Psychiatry* (2018)

Uncoupling the widespread occurrence of anti-NMDAR1 autoantibodies from neuropsychiatric disease in a novel autoimmune model

Up to 20% of the human population carry antibodies against glutamate receptors of the NMDA type, independent of any disease, with prevalence increasing with age. In collaboration with the Clinical Neuroscience Group of Hannelore Ehrenreich at the Max Planck Institute for Experimental Medicine in Göttingen, we have now shown a similar prevalence of such autoantibodies against NMDA receptors in other mammals. Dogs, cats, rats and mice also displayed the age dependency found in most humans, whereas baboons and rhesus macaques held in captivity did not. Based on this result and the observation that human migrants also show a weaker age dependency, we hypothesize that chronic stress triggers autoantibody production.

When we immunized mice against NMDA receptors, they produced large amounts of antibodies. When the animals had a disrupted blood-brain barrier, they showed psychosis-like symptoms like the ones known to be caused by drug-induced NMDA receptor block. However, none of the animals had any signs of brain inflammation, the hallmark of an encephalitis. This indicates that some of the neurological symptoms observed in encephalitis patients carrying autoantibodies against NMDA receptors may indeed be caused by those autoantibodies, whereas the encephalitis itself has another independent cause.

Bis zu 20 % der Bevölkerung, Gesunde wie Kranke, haben Antikörper gegen Glutamaterezeptoren des NMDA-Typs im Blut, wobei die Häufigkeit mit dem Alter zunimmt. In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Klinische Neurowissenschaften von Hannelore Ehrenreich am Max-Planck-Institut für Experimentelle Medizin in Göttingen konnten wir nun eine ähnliche Häufigkeit von Autoantikörpern gegen NMDA-Rezeptoren bei anderen Säugetieren nachweisen. Hunde, Katzen, Ratten und Mäuse zeigten dabei eine ähnliche Altersabhängigkeit, wie sie bei den meisten Menschen auftritt, Paviane und Rhesusaffen in Gefangenschaft dagegen nicht. Daraus und aus dem Befund, dass auch Migranten eine geringere Altersabhängigkeit aufweisen, leiteten wir die Hypothese ab, dass chronischer Stress die Autoantikörperproduktion auslöst. Immunisiert man Mäuse gegen NMDA-Rezeptoren, produzieren sie große Mengen Antikörper; wenn die Tiere eine defekte Blut-Hirn-Schranke haben, entwickeln sie anschließend eine Art Psychose, wie sie auch auftritt, wenn man NMDA-Rezeptoren mit Medikamenten blockiert. Bei keinem der Tiere konnten wir jedoch eine Entzündung im Gehirn, also eine klassische Enzephalitis feststellen. Das deutet darauf hin, dass manche der Symptome, die man bei Enzephalitis-Patienten mit Autoantikörpern gegen NMDA-Rezeptoren beobachtet, zwar von den Antikörpern ausgelöst werden, die Enzephalitis selbst jedoch eine andere, unabhängige Ursache hat.



The tetrameric NMDA receptor.
 Structure of an NMDA receptor (PDB ID 4PE5, GluN1 blue, GluN2B gray). Shown in green are domains that were used to immunize mice.

Prof. Dr. Thomas Günther-Pomorski

Chair of Biochemistry II

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

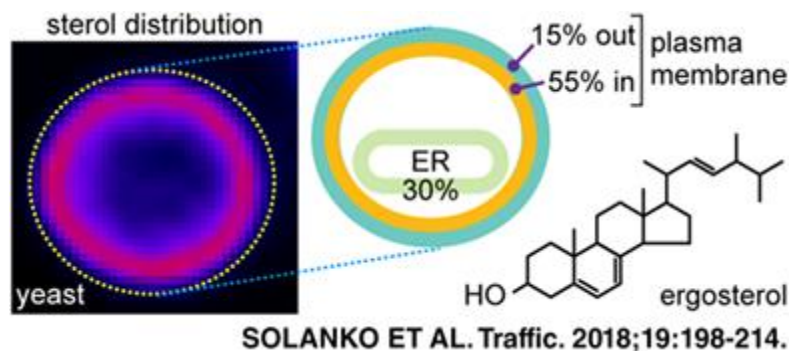
Tel.: ++49-(0)234-3224230; Fax.: ++49-(0)234-3214105

Email: Thomas.Guenther-Pomorski@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc2/>

L.M. Solanko, D.P. Sullivan, Y.Y. Sere, M. Szomek, A. Lunding, K.A. Solanko, A. Pizovic, L.D. Stanchev, T. Günther-Pomorski, A.K. Menon and D. Wüstner, *Traffic* 2018, 19: 198–214

Ergosterol is mainly located in the cytoplasmic leaflet of the yeast plasma membrane

Sterols constitute an essential lipid class in eukaryotic membranes whose intracellular levels and distribution are highly regulated. Disorders related to sterol handling in the body cause severe diseases such as atherosclerosis and neurodegeneration. However, the underlying mechanisms are poorly understood. In collaboration with scientists from Denmark and the United States we developed here a sophisticated imaging technique to analyze the distribution of sterols in living cells. Using fluorescence spectrophotometry and microscopy we found that the majority of the plasma membrane sterol is localized in the inner leaflet. This result necessitates revision of current models of the architecture of the plasma membrane lipid bilayer.



Yeast cells loaded with dehydroergosterol, an intrinsically fluorescent analog of the yeast sterol ergosterol, were imaged in presence and absence of membrane-impermeant quenchers. Our measurements indicate that ~15% of dehydroergosterol is quenched, i.e. plasma membrane sterol is asymmetrically distributed in a 15:55 ratio.

Sterole sind essentielle Lipidkomponenten in eukaryotischen Membranen, deren intrazelluläre Konzentration und Verteilung stark reguliert werden. Obwohl Störungen im zellulären Steroltransport schwere Krankheiten wie Atherosklerose und eine Degeneration des Nervensystems verursachen können, ist über die zu Grunde liegenden molekularen Ursachen nur wenig bekannt. Gemeinsam mit Forschern aus Dänemark und den USA haben wir eine ausgefeilte Methode entwickelt, um die Sterolverteilung in lebenden Zellen zu analysieren. Mittels Fluoreszenzspektroskopie und Mikroskopie konnten wir nachweisen, dass Sterole überwiegend in der inneren Hälfte der Plasmamembran von lebenden Zellen lokalisiert sind. Dieser Befund erfordert eine Korrektur der gegenwärtigen Vorstellungen zum Aufbau der zellulären Plasmamembran.

Rolf Heumann

Biochemistry II - Molecular Neurobiochemistry
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3228230; Fax: ++49-(0)234-3214105
Email: rolf.heumann@ruhr-uni-bochum.de;
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/mol-neurobio/Lehrstuhl/Molneurobio.html>

D. Paliga, F. Raudzus, S. H. Leppla, R. Heumann, S. Neumann, *Mol Neurobiol* 2018,
DOI: 10.1007/s12035-018-1311-6

Lethal Factor Domain-Mediated Delivery of Nurr1 Transcription Factor Enhances Tyrosine Hydroxylase Activity and Protects from Neurotoxin-Induced Degeneration of Dopaminergic Cells

Parkinson's disease is a neurodegenerative disease characterized by the loss of dopaminergic neurons in the *substantia nigra*. The transcription factor nuclear receptor-related 1 protein (Nurr1) is involved in the development and maintenance of dopaminergic neurons. Its dysfunction is partially involved in the progression of Parkinson's disease and Nurr1 is therefore considered as a pharmacological target for protein therapy. Here, Nurr1 was fused to the non-toxic first n-terminal 254 amino acids derived from lethal factor (LFn) of the bacterium *Bacillus anthracis* allowing cellular uptake of the active transcription factor. Its biological activity was confirmed using a tyrosine hydroxylase promotor assay in the human neuroblastoma cell line SH-SY5Y. Furthermore, we demonstrated that the cellular application of Nurr1 fusion protein protected from the neurotoxin 6-hydroxydopamine mediated cell death in SH-SY5Y cells. In summary, Nurr1 fusion protein increases tyrosine hydroxylase promotor activity and protects from toxic insults in dopaminergic neurons making it an interesting target for further developments as a therapy treating Parkinson's disease.

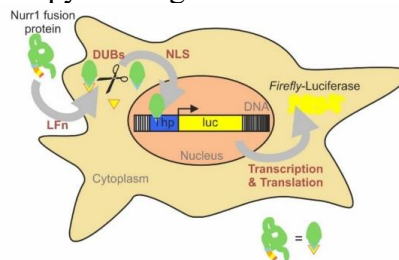


Figure: This scheme shows the tyrosine hydroxylase promoter reporter assay used for demonstrating the biological activity of Nurr1 fusion protein upon cellular uptake. The fusion protein is intracellularly cleaved by deubiquitinating enzymes (DUBs) at the ubiquitin domain.

Morbus Parkinson ist eine neurodegenerative Erkrankung, die durch den Verlust an dopaminergen Neuronen in der *Substantia nigra* charakterisiert ist. Der Transkriptionsfaktor *nuclear receptor-related 1 protein* (Nurr1) ist an der Entwicklung und der Erhaltung dopaminerger Neurone beteiligt. Seine Funktionsstörung ist partiell an dem Fortschreiten von Morbus Parkinson beteiligt, weshalb Nurr1 als pharmakologisches Target in einer Proteintherapie betrachtet wird. Hier wurde Nurr1 mit den nicht-toxischen ersten n-terminalen 254 Aminosäuren des Letalen Faktors (LFn) aus dem Bakterium *Bacillus anthracis* fusioniert, wodurch eine zelluläre Aufnahme des aktiven Transkriptionsfaktors ermöglicht wird. Seine biologische Aktivität wurde unter Verwendung eines Tyrosinhydroxylase-Promoter-Assay in der humanen Neuroblastoma Zelllinie SH-SY5Y bestätigt. Zudem zeigten wir, dass die zelluläre Anwendung von Nurr1-Fusionsprotein vor dem durch das Neurotoxin 6-Hydroxydopamin vermittelten Zelltod in SH-SY5Y-Zellen schützen konnte. Zusammenfassend erhöht Nurr1-Fusionsprotein die Tyrosinhydroxylase-Promoter-Aktivität und schützt vor toxischen Einflüssen in dopaminergen Neuronen, was es zu einem interessanten Target für weitere Entwicklungen einer Therapie zur Behandlung von Morbus Parkinson macht.

Raphael Stoll

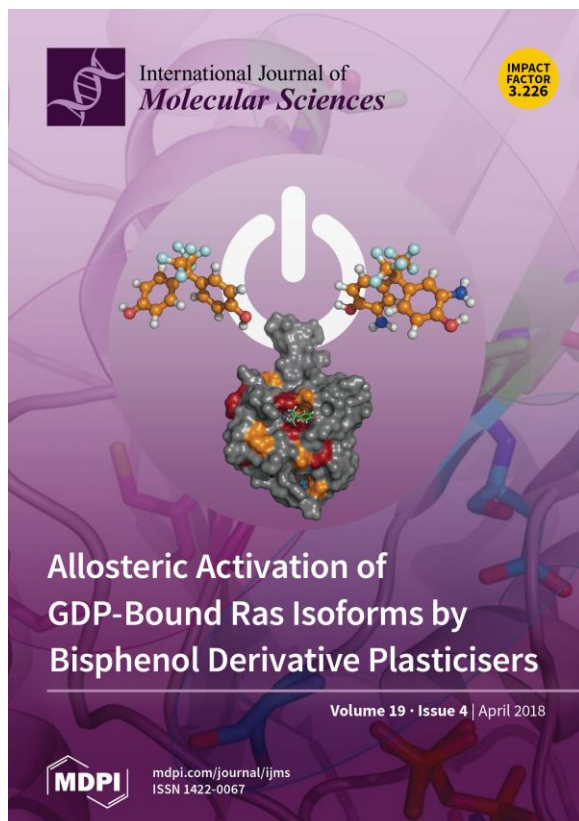
Biomolekulare Spektroskopie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

Miriam Schöpel, Oleksandr Shkura, Jana Seidel, Klaus Kock, Xueyin Zhong, Stefanie Löffek, Iris Helfrich, Hagen S. Bachmann, Jürgen Scherkenbeck, Christian Herrmann, and Raphael Stoll, *Int. J. Mol. Sci.* 2018, **19**(4), 1133; <https://doi.org/10.3390/ijms19041133>.

Allosteric Activation of GDP-Bound Ras Isoforms by Bisphenol Derivative Plasticisers



The protein family of small GTPases controls cellular processes by acting as a binary switch between an active and an inactive state. The most prominent family members are H-Ras, N-Ras, and K-Ras isoforms, which are highly related and frequently mutated in cancer. Bisphenols are widespread in modern life because of their industrial application as plasticisers. Bisphenol A (BPA) is the best-known member and has gained significant scientific as well as public attention as an endocrine disrupting chemical, a fact that eventually led to its replacement. However, compounds used to replace BPA still contain the molecular scaffold of bisphenols. BPA, BPAF, BPB, BPE, BPF, and an amine-substituted BPAF-derivate all interact with all GDP-bound Ras-Isoforms through binding to a common site on these proteins. NMR-, SOS^{cat}-, and GDI-assay-based data revealed a new bisphenol-induced, allosterically activated GDP-bound Ras conformation that define these plasticisers as Ras allosteric agonists.

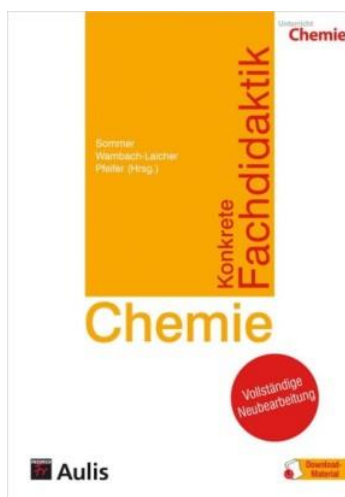
Die Proteinfamilie kleiner GTPasen steuert zelluläre Prozesse, indem diese GTPasen als binärer Schalter zwischen einem aktiven und inaktivem Proteinzustand fungieren. Die prominentesten Familienmitglieder sind dabei die Isoformen H-Ras, N-Ras und K-Ras, welche eng miteinander verwandt und oftmals bei Krebserkrankungen mutiert sind. Bisphenole sind als industrielle Weichmacher in der modernen Welt weitverbreitet. Bisphenol A (BPA) ist davon der bekannteste Vertreter, der als sogenannter endokriner Disruptor Bekanntheit erlangt hat und deswegen heutzutage durch andere Substanzen ersetzt wird. Diese Verbindungen enthalten jedoch noch immer das grundlegende Strukturgerüst der Bisphenole. Diese Studie zeigt, dass die Bisphenole BPA, BPAF, BPB, BPE, BPF und ein aminosubstituiertes BPAF-Derivat alle an eine gemeinsame Stelle GDP-beladener Ras-Isoformen binden. Daten aus NMR-, SOS^{cat}-, und GDI-Experimenten deuten daraufhin, dass Bisphenole allosterisch eine aktive, GDP-gebundene Form des Ras-Proteins induzieren können. Offenbar handelt es sich bei diesen Bisphenolen um allosterische Ras-Agonisten.

Prof. Dr. 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>

K. Sommer, J. Wambach-Laicher, P. Pfeifer (Hrsg.)

Konkrete Fachdidaktik Chemie
Grundlagen für das Lernen und Lehren im Chemieunterricht

Can a single handbook cover both the university-based and the school-based phases of teacher education? For the first time, authors from both phases have collaborated on a Chemistry education handbook – the “Konkrete Fachdidaktik Chemie”. They take a holistic approach to Chemistry education. The book covers the fundamentals and the prerequisites for teaching students at secondary level. It presents approaches for planning sequences for the Chemistry classroom as well as dealing with the most current challenges in Chemistry education. Basic concepts of Chemistry, didactic reduction, experiment and epistemology, education standards and competences, preconceptions, subject language, lesson planning and analysis, language support in the Chemistry classroom, inclusion and out-of-school learning environments are just some of the key words. The handbook is aimed at students of education, teacher trainees and teachers of Chemistry at all types of secondary schools.



Ein gemeinsames Lehrbuch für die erste und zweite Phase der Lehrerbildung? Zum ersten Mal erarbeiten Autorinnen und Autoren der ersten und zweiten Phase der Lehrerbildung gemeinsam ein chemiedidaktisches Lehrbuch, die „Konkrete Fachdidaktik Chemie.“ Der Chemieunterricht wird auf 770 Seiten umfassend betrachtet – beginnend mit den Grundlagen des Chemieunterrichts und den Voraussetzungen für das Lernen der Schülerinnen und Schüler über den Weg zur Planung einer Unterrichtseinheit bis zu aktuellen Herausforderungen des Chemieunterrichts. Exemplarisch seien die Stichworte Basiskonzepte der Chemie, didaktische Reduktion, Experiment & Erkenntnis, Bildungsstandards & Kompetenzen, Schülervorstellungen, Fachsprache, Unterrichtsprozessplanung & -analyse, sprachsensibler Chemieunterricht, Inklusion sowie außerschulische Lernorte genannt. Das Lehrbuch richtet sich an alle Lehramtsstudierenden, Referendar*innen und Lehrkräfte mit Chemie als Unterrichtsfach in allen Schulformen der Sekundarstufe I und II.

Enrica Bordignon

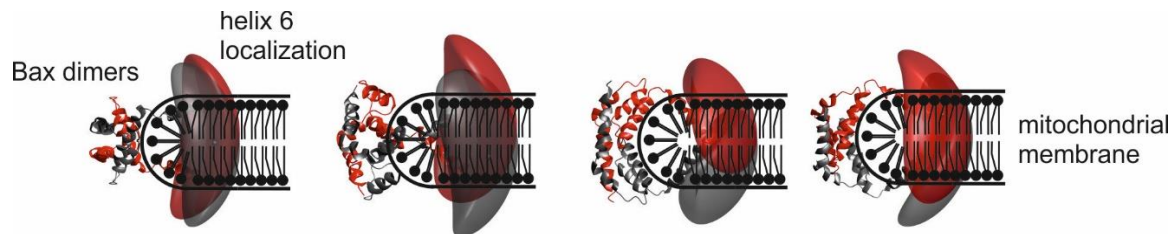
AG EPR Spectroscopy; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: enrica.bordignon@rub.de; www.epr.rub.de

S. Bleicken, T.E. Assafa, C. Stegmüller, A. Wittig, A.J. Garcia-Saez, E. Bordignon. *Cell Death Differ.* 2018 25(10) (2018) 1717-1731. doi: 10.1038/s41418-018-0184-6.

Topology of active, membrane-embedded Bax in the context of a toroidal pore.



Bax is a Bcl-2 protein critical for cell death in mammalian cells. The Bcl-2 family of proteins controls cell death primarily by direct binding interactions that regulate mitochondrial outer membrane permeabilization. In healthy cells Bax is mostly a monomeric, cytosolic globular protein containing nine alpha helices, while upon apoptosis initiation it inserts into the outer mitochondrial membrane, changes its conformation, dimerizes, then oligomerizes and forms pores that release proapoptotic factors like Cytochrome c into the cytosol. This triggers the point of no return in cell death. Malfunction or up-down regulation of the apoptotic machinery is correlated with development of cancer or autoimmune diseases. The structures of active Bax at the mitochondrial membrane is only partially understood and how the active proteins are located with respect to the membrane bilayer is controversially described in literature. In this manuscript, we systematically review and examine the protein-membrane, protein-water and protein-protein contacts of the nine helices of active Bax and its homolog Bak and add a new set of water accessibility data obtained by fluorescence and EPR methods. We conclude that the core domain of Bax (helices 1-5) is water exposed with only helices 4-5 in membrane contact, whilst helices 6-8 are in peripheral membrane contact with helix 9 being transmembrane. Among the available structural models, those considering the core domain at the rim of a toroidal pore are the most plausible to describe the active state of the proteins, although the structural flexibility of the latch domain does not yet allow unambiguous discrimination between the existing models.

Prof. Dr. Martin Muhler

Chair of Industrial Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

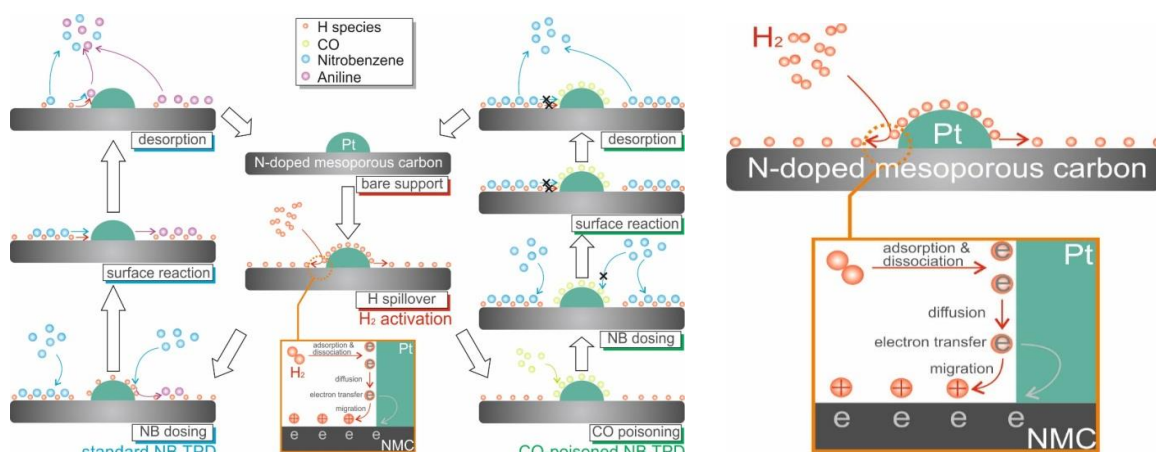
Tel.: ++49-(0)234-123456; Fax.: ++49-(0)234-123456

Email: muhler@techem.ruhr-uni-bochum.de; <http://www.techem.rub.de>

Fengkai Yang, Bin Hu, Wei Xia, Baoxiang Peng, Jianyi Shen, Martin Muhler,
J. Catal. 365(2018) 55-62

On the Nature of Spillover Hydrogen Species on Platinum/Nitrogen-doped Mesoporous Carbon Composites: a Temperature-Programmed Nitrobenzene Desorption Study

Hydrogen spillover is defined as the transport of activated H species, which have adsorbed on one surface, to another surface, which does not directly adsorb the H species under the same conditions. This hydrogen activation and migration phenomenon is of fundamental importance in heterogeneous catalysis. Also, hydrogen spillover from noble metals to carbon surfaces may influence the hydrogen storage properties of carbon materials. Spillover H species are very difficult to detect and some of the methods, which had been employed to investigate the mechanism of hydrogen spillover, were gradually falsified by further studies in this field. Temperature-programmed nitrobenzene desorption showed that H species generated by dissociative H_2 chemisorption on Pt can be reversibly stored in the adjacent carbonaceous support. By flushing with helium and poisoning with CO it was demonstrated that hydrogen was stored quite firmly. These findings provide a new point of view on many spillover-related phenomena in hydrogen storage materials and hydrogen fuel cell catalysts.



Surface chemistry evolution of 1%Pt/NMC during pre-reduction (steps labeled in red), standard NB TPD experiment (blue) and CO-poisoned NB TPD steps (green). The proposed model for hydrogen spillover onto NMC is shown on the right.

Wasserstoff-Spillover ist definiert als der Transport von aktivierten H-Spezies, die an einer Oberfläche adsorbiert sind, zu einer anderen Oberfläche, die die H-Spezies unter den gleichen Bedingungen nicht direkt adsorbiert. Dieses Phänomen der Wasserstoffaktivierung und -migration ist für die heterogene Katalyse von grundlegender Bedeutung. Der Wasserstoff-Spillover von Edelmetallen auf Kohlenstoffoberflächen kann auch die Wasserstoffspeichereigenschaften von Kohlenstoffmaterialien beeinflussen. Spillover-H-Spezies sind sehr schwer nachzuweisen und einige der Methoden, die zur Untersuchung des Spillover-Mechanismus eingesetzt wurden, erwiesen sich durch weitere Untersuchungen auf diesem Gebiet als ungeeignet. Die temperaturprogrammierte Nitrobenzol-Desorption zeigte, dass H-Spezies, die durch dissoziative H_2 -Chemisorption an Pt erzeugt werden, reversibel im benachbarten kohlenstoffbasierten Träger gespeichert werden können. Durch Spülen mit Helium und Vergiftung mit CO wurde nachgewiesen, dass der Wasserstoff in Form von Protonen und Elektronen gespeichert wird. Diese Ergebnisse liefern einen neuen Blickwinkel auf viele Systeme, die den Spillover-Effekt nutzen, z.B. in Wasserstoffspeichermaterialien und in Brennstoffzellen-Katalysatoren.

Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte

Chair of Inorganic Chemistry I – Bioinorganic Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

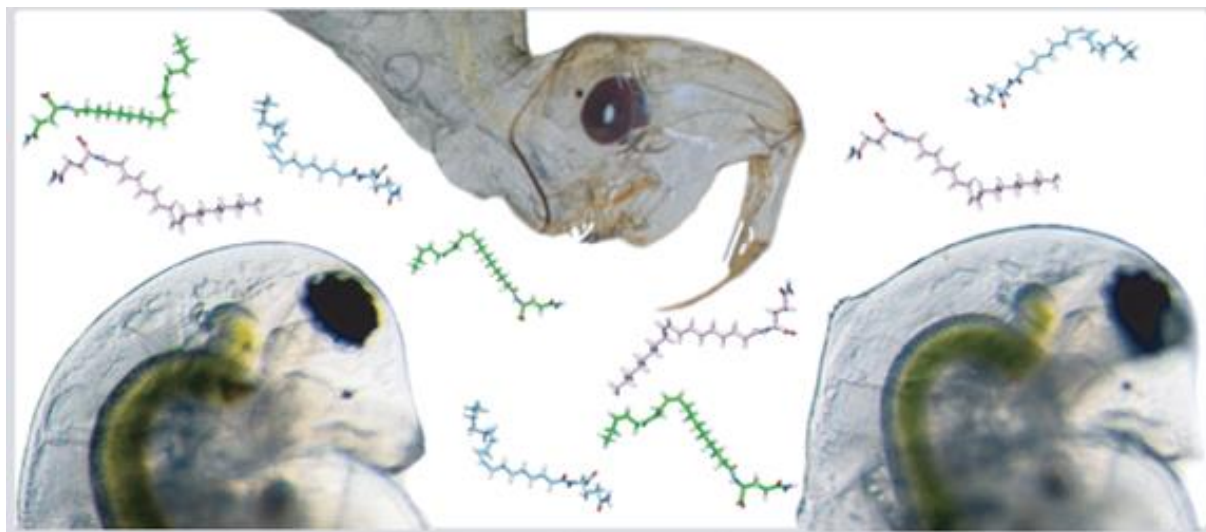
Tel.: ++49-(0)234-123456; Fax.: ++49-(0)234-123456

Email: nils.metzler-nolte@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.chemie.rub.de/ac1/>

L. C. Weiss, B. Albada, S. M. Becker, S. W. Meckelmann, J. Klein, M. Meyer, O. J. Schmitz,
U. Sommer, M. Leo, J. Zagermann, N. Metzler-Nolte, R. Tollrian
Nature Chem. Biol. **14** (2018) 1133 – 1139.

Identification of Chaoborus kairomone chemicals that induce defences in Daphnia

Infochemicals play important roles in aquatic ecosystems. They even modify food web interactions, such as by inducing defenses in prey. In one classic but still not fully understood example, the planktonic freshwater crustacean *Daphnia pulex* forms specific morphological defenses (neckteeth) induced by chemical cues (kairomones) released from its predator, the phantom midge larva *Chaoborus*. On the basis of liquid chromatography, mass spectrometry, and chemical synthesis, we report here the chemical identity of the *Chaoborus* kairomone. The biologically active cues consist of fatty acids conjugated to the amino group of glutamine via the N terminus. These cues are involved in *Chaoborus* digestive processes, which explains why they are consistently released despite the disadvantage for its emitter. In this interdisciplinary collaboration, our group provided the initial identification and the chemical synthesis of these interesting infochemicals that led to the solution to this long-standing biological puzzle.



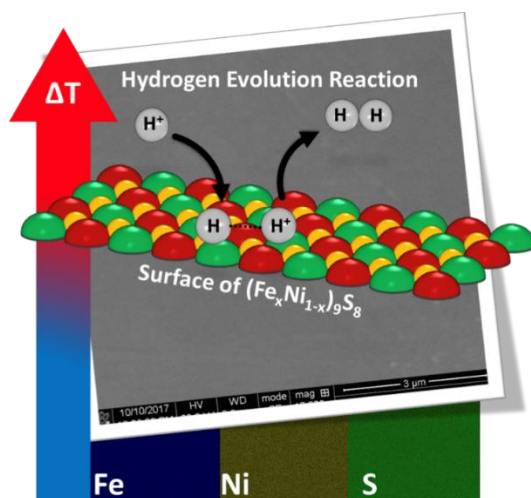
Zur Kommunikation unter verschiedenen Spezies spielen Infochemikalien in aquatischen Ökosystemen eine große Rolle, unter anderem induzieren sie Abwehrmechanismen in Opferfischen. In einem klassischen System, welches nicht vollständig verstanden war, bilden Wasserflöhe (*Daphnia pulex*) als Schutz vor ihren Fressfeinden, den Phantom-Mückenlarven (*Chaoborus*), Nackenzähne aus. Wir konnten nun durch die Kombination von Chromatographie, Massenspektrometrie und chemischer Synthese die hier involvierten Infochemikalien identifizieren und als Derivate der Aminosäure Glutamin charakterisieren, deren N-Terminus durch Fettsäuren acetyliert ist. Interessanterweise entstehen diese Signalmoleküle durch den Verdauungsprozess in den Mückenlarven selber, so dass ein sich selbst regulierendes Ökosystem entsteht. Unsere Gruppe konnte im Rahmen dieser interdisziplinären Zusammenarbeit mit Evolutionsbiologen die Infochemikalien erstmals identifizieren und durch chemische Synthese der Moleküle den Nachweis ihrer Wirkung sowie auch weiterführende Struktur-Wirkungsbeziehungen aufdecken, und so zur Lösung dieses seit langem bestehenden biologischen Puzzles entscheidend beitragen.

Dr. Ulf-Peter Apfel
Inorganic Chemistry I
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3224187; Fax.: ++49-(0)234-32 14378
Email: ulf.apfel@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/smallmolecules>

S. Piontek, C. Andronescu, A. Zaichenko, B. Konkana, K. junge Puring, B. Marler, H. Antoni, I. Sinev, M. Muhler, D. Mollenhauer, B. Roldan Cuenya, W. Schuhmann, U.-P. Apfel, *ACS Catalysis*, **2018**, 8, 987-966.

Influence of the Fe : Ni Ratio and Reaction Temperature on the Efficiency of $(\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x})_9\text{S}_8$ Electrocatalysts Applied in the Hydrogen Evolution Reaction.

Inspired by our recent finding on the high activity of pentlandites, $\text{Fe}_{4.5}\text{Ni}_{4.5}\text{S}_8$, for the hydrogen evolution reaction (HER), we got interested on the influence of the Fe : Ni ratio on the material properties. In the presented report, we highlight describe the high temperature synthesis of $(\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x})_9\text{S}_8$ ($x = 0 - 1$) from the elements along with a thorough investigation of the surface composition those materials. In addition, we investigated the potential of bulk electrodes built from $(\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x})_9\text{S}_8$ materials to act as a HER catalysts. Notably, the highest amount of surface active sites as well as highest activity of the respective electrodes was found for a Fe : Ni ratio of 1:1. The experiments were further supported by DFT calculations utilizing the surface energy as an activity descriptor. Our results show that distinct interactions between the different metal sites are key towards the high HER activity of pentlandite electrodes. In addition, we showed that industrially relevant temperatures have to be accounted for in order to allow for a comparison with commonly utilized platinum electrodes.



The HER activity strongly correlates with temperature and the composition of $(\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x})_9\text{S}_8$ materials.

Dr. Klaus Merz

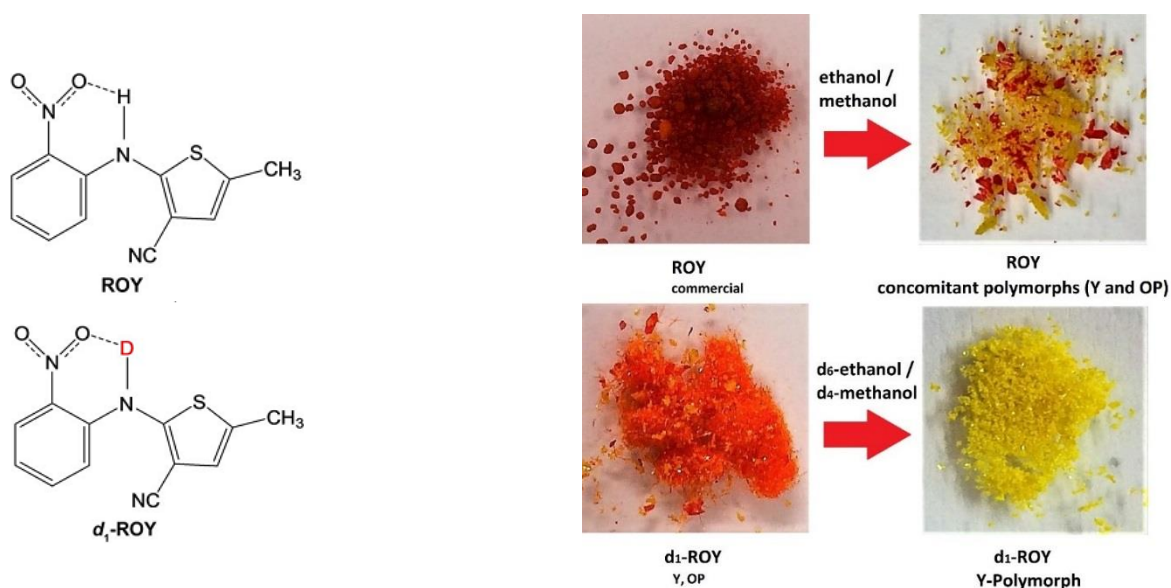
Chair of Inorganic Chemistry Chemistry 1
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-32-24187; Fax.: ++49-(0)234-32-14378
Email: klaus.merz@rub.de; www.rub.de/ac1/merz

Jacqueline Falk, Detlef Hofmann, Klaus Merz, IUCrJ (2018). 5, 569–573

Controlled usage of H/D exchange to circumvent concomitant polymorphs of ROY

Recently, deutetrabenazine, the first deuterated drug, has been approved by the US Food and Drug Administration. This is one stepping stone of the remarkably upcoming interest on deuterated organic compounds during the last years. However, the impact of deuterium substituents is not limited on reduced metabolism of APIs.

The hypothesis that H/D exchange affects the structural formation of organic compounds in the solid state is supported by the deeper understanding of the altering polymorphism of the organic compound ROY. Therefore, ROY was deuterated at its amine function, which leads to a seemingly small but effective modification of the hydrogen bond (HB) strength. In contrast to the crystallization of the non-deuterated ROY in methanol or ethanol which leads simultaneous to the formation of two forms (OP and Y-polymorph), so-called concomitant polymorphs, the crystallization of d₁-ROY leads to a selective formation of exclusively the Y-polymorphic form.



Crystallization of ROY yields concomitant polymorphs (top); crystallization of d₁-ROY under the same conditions gives the Y polymorph.

Vor kurzem wurde Deutetrabenazin, das erste deuterierte Medikament, von der US Food and Drug Administration zugelassen. Dies ist ein Meilenstein für das bemerkenswert steigende Interesse an deuterierten organischen Verbindungen in den letzten Jahren. Die Wirkung von Deuteriumsubstituenten ist jedoch nicht auf den reduzierten Stoffwechsel von APIs beschränkt. Die Hypothese, dass der H/D-Austausch die Strukturbildung organischer Verbindungen im festen Zustand beeinflusst, wird durch das tiefere Verständnis des polymorphen Verhaltens der organischen Verbindung ROY unterstützt. Dafür wurde ROY an seiner Aminfunktion deuteriert, was zu einer scheinbar kleinen, aber effektiven Modifikation der Wasserstoffbindungsstärke (HB) führt. Im Gegensatz zur Kristallisation des nicht deuterierten ROY in Methanol oder Ethanol, die zur gleichzeitigen Bildung der beiden Formen (OP und Y-Polymorph), so genannte concomitant polymorphs, führt, zeigt die Kristallisation von d₁-ROY aus deuteriertem Methanol ausschließlich die Ausbildung des Y-Polymorphs.

T. Scherpf, C. Schwarz, L. T. Scharf, J.-A. Zur, A. Helbig, V. H. Gessner*
Angew.Chem.Int.Ed. 2018, 57, 12859–12864

Ylide-Functionalized Phosphines: Strong Donor Ligands for Homogeneous Catalysis

Phosphines are important ligands in homogenous catalysis. The design of new phosphines has been decisive for the development of more active and selective catalysts as well as new catalytic processes. In our publication we present the preparation of a novel type of phosphines, the ylide-substituted phosphines (YPhos ligands). The YPhos ligands are easily accessible via different synthetic routes from commercially available starting materials. They are generally strong donors due to the electron donation from the ylide group bound at the phosphorus atom. The donor capacity surpasses that of commonly used phosphines and carbenes and can easily be tuned by changing the substitution pattern at the ylidic carbon atom. Due to these electronic properties and the large steric demand of our YPhos ligands they are ideal for homogenous catalysis. As such, excellent performance at low catalyst loadings were observed under mild reaction conditions in gold-catalyzed hydroamination and addition reactions.

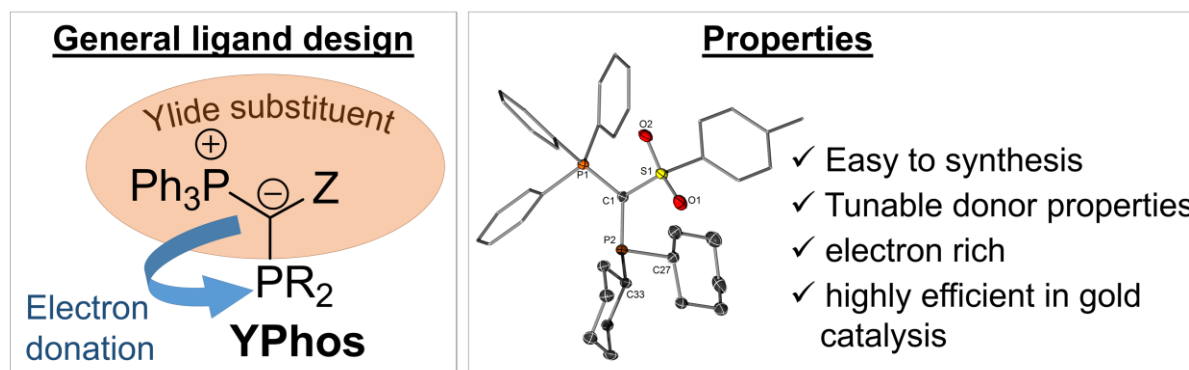


Figure 1: General design of the YPhos ligands

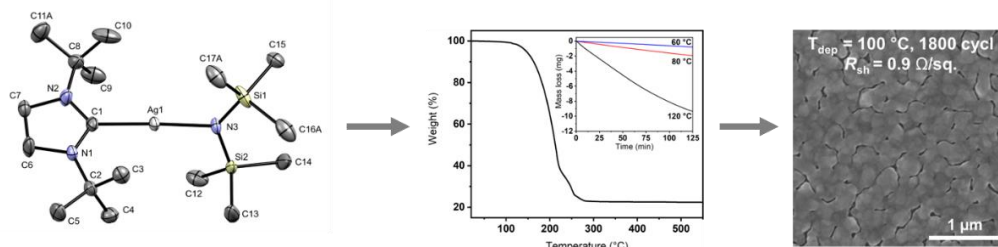
Phosphane zählen zu den wichtigsten Liganden in der homogenen Katalyse. Dabei ist das Design neuer Phosphane entscheidend für die Entwicklung von aktiveren und selektiveren Katalysatoren sowie neuen katalytischen Prozessen. In unserer Publikation berichten wir von der Darstellung einer neuen Phosphanklasse, den Ylid-substituierten Phosphanen (YPhos-Liganden). Diese sind über unterschiedliche Syntheserouten von käuflich erwerbbaen Startmaterialien leicht zugänglich. Aufgrund der Elektronendonation des am Phosphoratom gebundenen Ylid-Substituenten sind die YPhos-Liganden in der Regel starke Donoren. Dabei übertrifft ihre Donorstärke jene einfacher Phosphane und sogar Carbene und lässt sich dabei dennoch durch Änderung des Substitutionsmusters am Ylidkohlenstoffatom einstellen. Aufgrund dieser elektronischen Eigenschaften sowie ihrem großen räumlichen Anspruch sind die YPhos-Liganden ideal für Anwendungen in der homogenen Katalyse. So konnten wir ausgezeichnete Aktivitäten bei niedrigen Katalysatorbeladungen unter milden Bedingungen in Gold-katalysierten Hydroaminierungs- und Additionsreaktionen erreichen.

Prof. Dr. Anjana Devi
 Inorganic Materials Chemistry
 Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
 Tel.: ++49 (0)234 32 24150 ; Fax.: ++49 (0)234 32-14174
 Email: anjana.devi@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.imc.rub.de/>

N. Boysen, T. Hasselmann, S. Karle, D. Rogalla, D. Theirich, M. Winter, T. Riedl and A. Devi et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 16224.

An N-Heterocyclic Carbene Based Silver Precursor for Plasma-Enhanced Spatial Atomic Layer Deposition of Silver Thin Films at Atmospheric Pressure

The realization of transparent electrodes for solar cells and LEDs based on metals like silver remains a challenge due to a preferred Volmer-Weber growth mode in the initial stages of thin film growth. This results in a typically observed non-percolated metal island formation with a high sheet resistance (R_{sh}). Atomic layer deposition (ALD) can be the method of choice to effectively lower the percolation threshold and to afford electrically conductive but at the same time optically transparent silver thin films. We herein report the synthesis and evaluation of a new fluorine-, oxygen- and phosphorous-free volatile N-heterocyclic carbene (NHC)-based silver precursor. The successful synthesis of the new NHC-based silver amide compound [(NHC)Ag(hmds)] was confirmed, while the thermal characteristics of the compound were studied in-depth. Subsequently, the volatile silver precursor was employed in spatial atmospheric plasma-enhanced ALD (APP-ALD) yielding high purity conductive silver thin films at temperatures as low as 100 °C and with a low resistivity of $10^{-5} \Omega\text{cm}$ utilizing an Ar/H₂ plasma. The current study marks the first example of a carbene stabilized Ag complex that was successfully employed for ALD applications of Ag metal layers. In addition, these promising results create a basis for the development of new metal ALD precursors as there is only a very limited number of ALD precursors known, especially for silver metal ALD.



Crystal structure, thermal characteristics of [(NHC)Ag(hmds)] and SEM of the silver layer.

Die Realisierung transparenter Elektroden für Solarzellen und LEDs basierend auf Metallen wie Silber ist immer noch schwer aufgrund eines typischen Volmer-Weber Wachstumsmodus in den ersten Schritten des Schichtwachstums. Dies führt gängiger Weise zu nicht perkolierten Metallinseln mit einem hohen Flächenwiderstand (R_{sh}). Die Atomlagenabscheidung (ALD) kann eine effektive Methode sein, um die Perkolationsschwelle abzusenken und so elektrisch leitfähige und außerdem optisch transparente Silberdünnschichten herzustellen. Wir berichten hiermit die Synthese und Evaluation einer neuen Fluor-, Sauerstoff- und Phosphor freien volatilen N-heterozyklisch Carben (NHC) basierten Silber Vorstufe. Die erfolgreiche Synthese dieser Substanz wurde bestätigt und die thermischen Eigenschaften tiefgründig untersucht. Infolgedessen wurde die Volatile Silbervorstufe in einem plasmaunterstützten räumlich getrennten Atomlagenabscheidungsprozess bei Atmosphärendruck und 100 °C (APP-ALD) eingesetzt und hoch reine elektrisch leitende Silber Dünnschichten mit einem geringen Widerstand von $10^{-5} \Omega\text{cm}$ unter Zuhilfenahme eines Ar/H₂ Plasmas erhalten. Die gegenwärtige Studie unterstreicht das erste Beispiel eines Carben stabilisierten Silberkomplex welcher erfolgreich in ALD für die Herstellung von Silber Dünnschichten getestet wurde. Zusätzlich stellen diese Resultate eine Basis für die weitere Entwicklung neuer ALD Präkursoren dar, da bisher nur wenige für die Herstellung von Silberdünnschichten mittels ALD bekannt sind.

Prof. Dr. Rochus Schmid

Chair of Inorganic Chemistry II – Computational Materials Chemistry Group

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

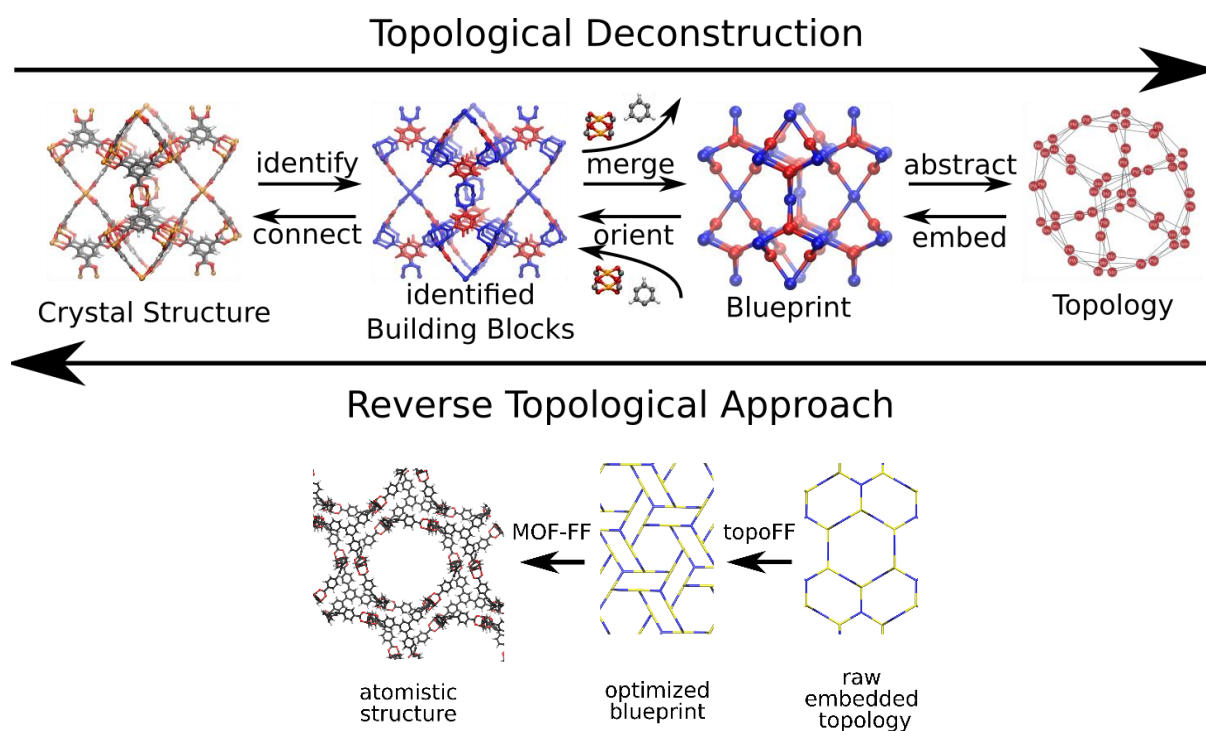
Tel.: ++49-(0)234-32 24166

Email: rochus.schmid@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rochusschmid.de>

J. Keupp, R. Schmid, *Faraday Discuss.* **2018**, 211, 79-101.

TopoFF : MOF structure prediction using specifically optimized blue prints

The deconstruction of metal organic frameworks (MOFs) to their underlying network topology is a standard procedure for analysis and comparison of such materials. Over the last years, our group has developed the reversed method to predict MOF structures for given building blocks. The reverse topological approach (RTA) usually starts from the barycentric maximum symmetry embedding of the net. In our contribution for the Faraday Discussions we have extended the method by a *topoFF* step, in which the embedding is optimized with respect to the shape of the building block structure, prior to the construction of the atomistic structure. This improves and widens the predictive capabilities of RTA.



Die Dekonstruktion metallorganischer Netzwerke (MOFs) in ihre zugrundeliegenden Netzwerktopologien ist eine Standardprozedur für die Analyse und den Vergleich dieser Verbindungen. In den letzten Jahren hat unsere Arbeitsgruppe die reverse Methode zur Vorhersage von MOF Strukturen, ausgehend von gegebenen Baueinheiten, entwickelt. Der reverse topologische Ansatz (RTA) beginnt üblicherweise bei den baryzentrischen Einbettungen der Netzwerke mit höchster Symmetrie. In unserem Beitrag für die Faraday Discussions haben wir die Methode durch den *topoFF* Schritt erweitert, bei dem diese Einbettung zunächst in Bezug auf die Form der Baueinheiten optimiert wird, bevor das atomistische System konstruiert wird. Dies verbessert und erweitert die Vorhersagemöglichkeiten des RTA.

Prof. Dr. Lukas Goossen

Chair of Organic Chemistry I

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

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

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

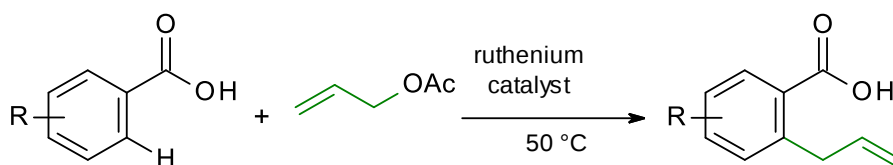
A. S. Trita, A. Biafora, M. Pichette-Drapeau, P. Weber, L. J. Goossen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 14580-14584

Regiospecific ortho-C-H Allylation of Benzoic Acids.

The development of efficient synthetic strategies for the regiospecific introduction of allyl residues into aromatic systems is of great importance due to the ubiquity of allyl arenes in pharmaceuticals, natural products and functional materials. Catalytic C–H allylations are particular attractive synthetic entries to this substrate class. However, they require strongly coordinating directing groups, which are arduous to introduce and remove.

In the publication, we have disclosed a regiospecific *ortho*-C–H allylation of benzoic acids with allyl acetates. The key advantage of this method is that a carboxylate group, which is a common functionality in organic molecules, is utilized as directing groups. After the reaction, the carboxylate group can be tracelessly removed by protodecarboxylation or utilized as leaving group for ipso-substitutions. The reaction proceeds efficiently at remarkably low temperature in the presence of an inexpensive, easy-to-handle ruthenium catalyst and a mild base.

Various (hetero)aromatic benzoic acids were successfully converted to the corresponding *ortho*-allylarenes. Further examples demonstrate that the reaction can be combined with hydroacyloxylation, double-bond isomerizations or protodecarboxylations, opening up new synthetic entries to a wide range of drug-like molecules.



Combining C-H with C-O activation in a sustainable C-C bond forming reaction.

Michael Dirkmann, Julia Nowack, Frank Schulz, *ChemBioChem* 2018, 19, 2146.

An in vitro Biosynthesis of Sesquiterpenes starting from Acetic Acid

Terpenes are famous for their importance in technology and medicine and infamous for their often low accessibility. Both total synthesis and heterologous fermentation are currently employed to produce e.g. artemisinin or simple terpenes like menthol. We here report on a reductionistic approach to fermentation, in which terpenes are biosynthesized in a cell-free setup. Starting from either acetic acid, the generic C5-precursors of terpenoids, DMAPP and IPP, are enzymatically synthesized via mevalonic acid as intermediate.

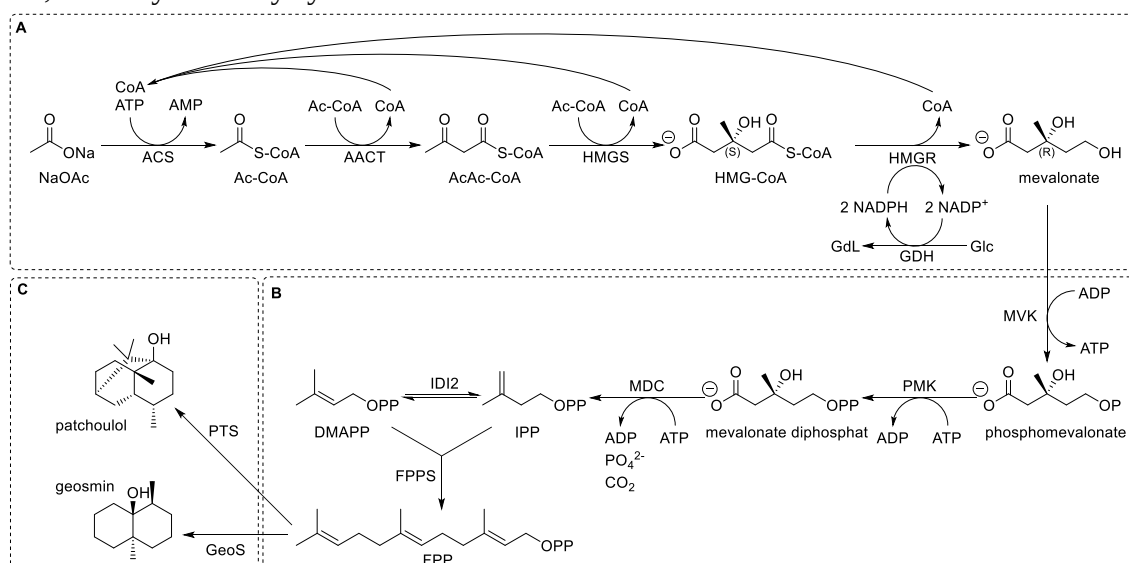


Fig.

1: Schematic view on the artificial mevalonic acid pathway as used for the enzymatic terpene synthesis.

Enzymes from various microbial and plant species are heterologously expressed and combined in the *ex vivo* biosynthesis. Furthermore, enzymes for the regeneration of expensive cofactors like NADPH and Coenzyme A were included in the pathway to yield farnesyl pyrophosphate in yields of 1.7 g/L and further downstream corresponding sesquiterpenes in yields of approx. 1 g/L in an overnight reaction cascade.

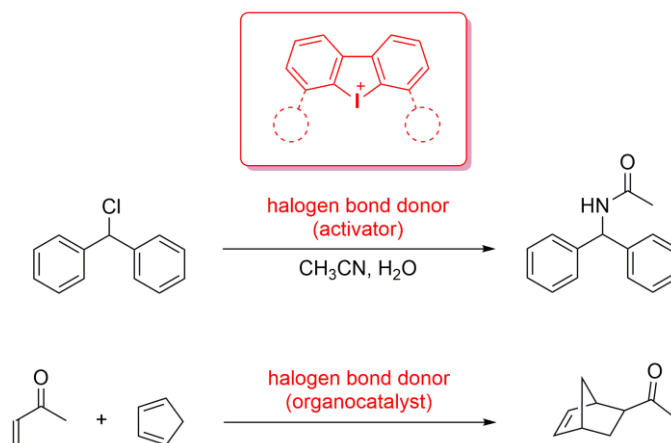
Terpene sind bekannt für ihre Bedeutung in Technik und Medizin und berüchtigt für ihre oft schlechte Verfügbarkeit. Sowohl Totalsynthese als auch heterologe Fermentation werden derzeit eingesetzt, um z.B. Artemisinin oder einfache Terpene wie Menthol herzustellen. Wir berichten hier über einen reduktionistischen Ansatz der Fermentation, bei dem Terpene in einem zellfreien Aufbau biosynthetisiert werden. Ausgehend von Essigsäure werden die generischen C5-Vorläufer von Terpenoiden, DMAPP und IPP, enzymatisch über Mevalonsäure als Zwischenprodukt synthetisiert.

Enzyme verschiedener mikrobieller und pflanzlicher Spezies werden in der *ex vivo* Biosynthese heterolog exprimiert und kombiniert. Darüber hinaus werden Enzyme zur Regeneration von teuren Cofaktoren wie NADPH und Coenzym A genutzt, um Farnesylpyrophosphat in Ausbeuten von 1,7 g/L und weiter stromabwärts entsprechende Sesquiterpene in Ausbeuten von ca. 1 g/L in einer Übernachtreaktionskaskade zu erhalten.

F. Heinen, E. Engelage, A. Dreger, R. Weiss, S.M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 3830.

Iodine(III) Derivatives as Halogen Bonding Organocatalysts

Hypervalent iodine(III) derivatives are known as versatile reagents in organic synthesis, but there is only one previous report on their use as Lewis acidic organocatalysts. In this paper, we present first strong indications for the crucial role of halogen bonding in this kind of catalyses. To this end, the solvolysis of benzhydryl chloride and the Diels–Alder reaction of cyclopentadiene with methyl vinyl ketone served as benchmark reactions for halide abstraction and the activation of neutral compounds. Iodolium compounds (cyclic diaryl iodonium species) were used as activators or catalysts, and we were able to markedly reduce or completely switch off their activity by sterically blocking one or two of their electrophilic axes. Compared with previously established bidentate cationic halogen bond donors, the monodentate organoiodine derivatives used here are at least similarly active (in the Diels–Alder reaction) or even decidedly more active (in benzhydryl chloride solvolysis).



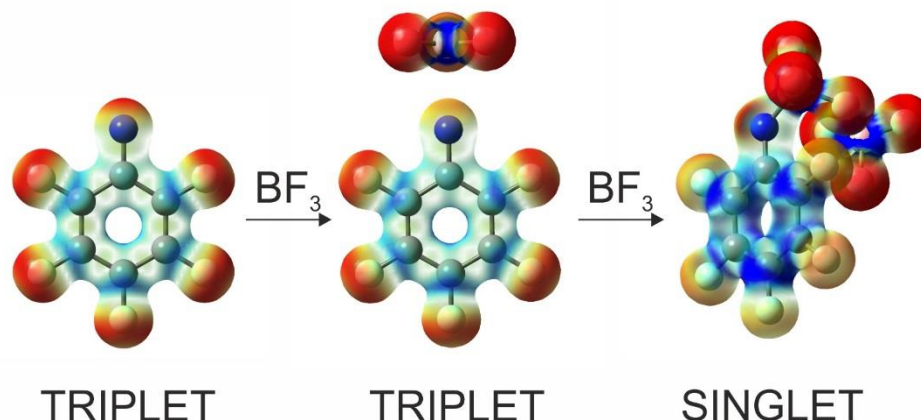
Test reactions to investigate the use of hypervalent halogen bond donors in organocatalysis.

Hypervalente Iod(III)-Verbindungen sind als vielseitige Reagenzien in der organischen Synthese bekannt. Bisher gibt es allerdings nur einen Bericht über ihren Einsatz als Lewis-Säuren in der Organokatalyse. Wir berichten in dieser Veröffentlichung über erste starke Hinweise auf die entscheidende Bedeutung von Halogenbrücken in dieser Art der Katalyse. Hierbei dienten die Solvolyse von Benzhydrylchlorid und die Diels-Alder-Reaktion zwischen Cyclopentadien und Methylvinylketon als Testreaktionen für Halogenidabstraktion sowie die Aktivierung von Neutralverbindungen. Iodoliumsalze (cyclische Diaryliodonium-Verbindungen) wurden als Aktivatoren und Katalysatoren verwendet, und ihre Aktivität konnte durch Blockieren einer oder beider elektrophiler Achsen signifikant verringert bzw. vollständig ausgeschaltet werden. Im Vergleich zu den zuvor veröffentlichten zweizähligen kationischen Halogenbrückendonoren zeigen die hier verwendeten einzähligen Organoiodderivate eine vergleichbare Aktivität (in der Diels-Alder-Reaktion) oder sogar eine deutlich höhere (in der Solvolyse von Benzhydrylchlorid).

J. Mieres-Perez, P. Costa, E. Mendez-Vega, R. Crespo-Otero, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.*
140 (2018), 17271-17277.

Switching the Spin State of Pentafluorophenylnitrene: Isolation of an Singlet Arylnitrene Complex

The chemistry of aryl nitrenes is dominated by their triplet ground states and excited open-shell singlet states. This results in radical-type reactions and unwanted rearrangements, which diminish the use of aryl nitrenes as intermediates in organic synthesis. While the closed-shell singlet states of aryl nitrenes are expected to undergo useful chemical transformations (comparable to the closed-shell singlet states of carbenes), these states are too high in energy to be chemically accessible. When triplet pentafluorophenylnitrene is interacting with the Lewis acid BF_3 under the conditions of matrix isolation, a Lewis acid–base complex consisting of the closed-shell singlet state of the nitrene and two molecules of BF_3 is formed. Although the closed-shell singlet state of pentafluorophenylnitrene is calculated (CCSD(T)) to lie more than 25 kcal/mol above its triplet ground state, the reaction with BF_3 results in switching the spin state from triplet to singlet. The formation of the singlet complex was monitored by IR, UV–vis, and EPR spectroscopy. DFT, CCSD(T), and CASPT2 calculations confirm the experimental findings.



Die Chemie von Arylnitrenen wird dominiert durch ihren Triplet-Grundzustand und angeregte open-shell Singulett-Zustände. Diese ergeben radikalartige Reaktionen und unerwünschte Umlagerungen, die den Gebrauch von Arylnitrenen als Zwischenstufen in organischen Synthesen einschränken. Während von closed-shell Singulett-Zuständen von Arylnitrenen brauchbare chemische Transformationen erwartet werden (vergleichbar mit closed-shell Singulett Carbenen), sind diese Zustände energetisch zu hoch gelegen, um chemisch erreichbar zu sein. Wenn Triplet Pentafluorphenylnitren mit der Lewis-Säure BF_3 unter Matrixisolation wechselwirkt, bildet sich ein Lewis-Säure-Base Komplex, der den closed-shell Singulett-Zustand des Nitrens und zwei Moleküle BF_3 enthält. Obwohl der closed-shell Singulett-Zustand von Pentafluorphenylnitren laut quantenchemischer Rechnungen (CCSD(T)) mehr als 25 kcal/mol über seinen Triplet-Grundzustand liegt, erfolgt durch Reaktion mit BF_3 ein Umschalten des Spinzustandes von Triplet nach Singulett. Die Bildung des Singulett-Komplexes wurde nachgewiesen durch IR, UV-vis, und ESR Spektroskopie. DFT, CCSD(T), und CASPT2 – Rechnungen bestätigen die experimentellen Ergebnisse.

Dr. Christian Merten

Organic Chemistry II – Chirality and Vibrational Optical Activity

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

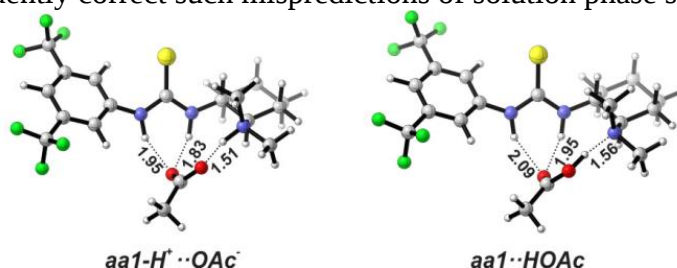
Tel.: ++49-(0)234-3224529; Fax.: ++49-(0)234-3214353

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

Nora M. Kreienborg, Christian Merten, *Chem. Eur. J.* **24** (2018) 17948-17954

How do substrates bind to a bifunctional thiourea catalyst? A vibrational CD study on carboxylic acid binding

Knowledge about the active conformation of an asymmetric catalyst is highly valuable in order to understand its stereo-inductive power, but spectroscopic access to these structures is often limited. From NMR spectroscopy, for instance, information on the exact conformation or the conformational ensemble can often only be derived if suitable NOE contacts can be detected. Similarly, crystallography can only provide a snapshot of the interaction geometry most favorably adopted in solid state. In the highlighted work, we demonstrate the capability of VCD spectroscopy to characterize the conformational preferences of Takemoto's bifunctional thiourea catalyst with and without having a reactant bound to it. In particular we show that the binding orientation of carboxylic acids can easily be derived from a computationally guided analysis of the spectra. Furthermore, we also discuss the problem that the popular DFT functional M06-2X, which we found to perform exceptionally well in the calculations of vibrational frequencies for fluorinated molecules, predicts incorrect structures of the molecular clusters. We relate this poor performance in predicting the structure of the binding topologies to an overestimation of dispersive CH- π and π - π interactions, which occur due to a neglect of the solvent molecules in the clusters. VCD spectroscopy is thus shown to be a powerful tool to identify and subsequently correct such mispredictions of solution phase structures.



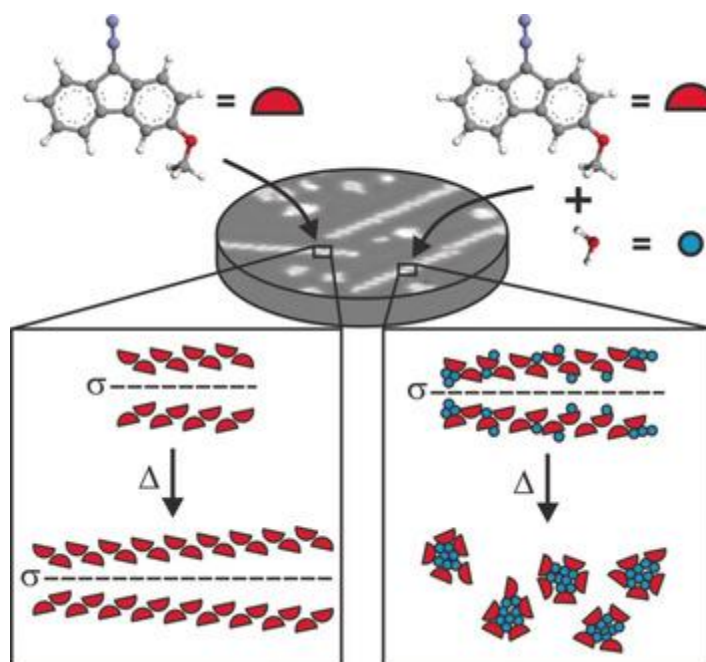
Structure of the most stable complexes of Takemoto's catalyst with acetic acid.

Detaillierte Informationen über die aktive Konformation eines asymmetrischen Katalysators ist für das Verständnis von Stereochemie von großem Wert, der spektroskopische Zugang zu diesen Strukturen jedoch oft begrenzt. Beispielsweise lassen sich über die NMR-Spektroskopie oft nur dann Informationen über die genaue ableiten, wenn geeignete NOE-Kontakte nachgewiesen werden können. In ähnlicher Weise kann die Kristallographie nur eine Momentaufnahme über die im Festkörper günstigste Wechselwirkungsgeometrie liefern. In unserer Arbeit zeigen wir, dass VCD-Spektroskopie effektiv genutzt werden kann um die Konformationen von Takemoto's bifunktionellem Thioharnstoffkatalysator mit und ohne daran gebundenen Reaktanden zu charakterisieren. Insbesondere zeigen wir, dass die Bindungsorientierung von Carbonsäuren leicht aus der computergestützten Analyse der Spektren abgeleitet werden kann. Darüber hinaus diskutieren wir auch das Problem, dass das beliebte funktionelle DFT-Funktional M06-2X, das sich bei der Berechnung der Schwingungsfrequenzen für fluoriierte Moleküle als außergewöhnlich gut erwiesen hat, falsche Strukturen der aktiven Konformationen vorhersagt. Wir vermuten, dass diese schlechte Performance bei der Vorhersage der Struktur der Bindungstopologien auf eine Überschätzung der dispersiven CH- π - und π - π -Wechselwirkungen zurückzuführen ist. Die VCD-Spektroskopie ist somit ein spannendes spektroskopisches Werkzeug, um solche Fehlvorhersagen von Lösungsphasenstrukturen zu erkennen und anschließend zu korrigieren.

Karsten Lucht, Iris Trosien, Wolfram Sander, Karina Morgenstern, *Angew. Chem. Int. Ed.*
2018, 57, 16334–16338

Imaging the Solvation of a One-Dimensional Solid on the Molecular Scale

We have observed the inversion of the solvation environment of a one-dimensional solid by low-temperature scanning tunneling microscopy. Adsorption of 3-methoxy-9-diazofluorene on Ag(111) yields highly oriented supramolecular chains. Subsequently, these were exposed to water molecules. The annealing of either dry or water-decorated chains results in dramatically different structures. The former simply leads to an increase in chain length and number, thus the structures remain their dimensionality; the latter results in a complete loss of order and produces zero-dimensional water clusters decorated by the organic molecule. This reversal in solute/solvent interaction represents a completely new aspect of solvation science. Furthermore, we believe that the conventional picture of a solvated molecule with weak polar groups may have to be reconsidered as a closed solvation shell does not necessarily exist.



Mittels Rastertunnelmikroskopie bei tiefen Temperaturen wurde die Umkehrung der Solvationsumgebung eines eindimensionalen Festkörpers abgebildet. Zu diesem Zweck wurden hochgradig geordneten supermolekularen Ketten des 3-methoxy-9-Diazofluorens auf Ag(111) gewachsen. Bei tiefen Temperaturen wurde Wasser hinzugefügt, was die Struktur der Ketten nicht änderte. Das Tempern der reinen und der wasserdekorierten Strukturen ergab höchst unterschiedliche Strukturen. Die Ketten des reinen Diazofluorensystems werden länger und perfekter; das System bleibt dabei eindimensional. Die wasserdekorierten Ketten werden hingegen aufgelöst. Es bilden sich Wassercluster, die mit den organischen Molekülen dekoriert sind. Diese strukturelle Änderung führt also zu nulldimensionalen Strukturen. Die Umkehrung von zu lösendem Stoff und Lösungsmittel gibt der Solvatationsforschung eine vollständig neue Komponente, so dass das traditionelle Bild von vollständigen Solvathüllen für solvatisierte Moleküle mit schwachpolaren Gruppen überdacht werden muss.

Prof. Dr. Christian Herrmann

Physical Chemistry I – Biophysical Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

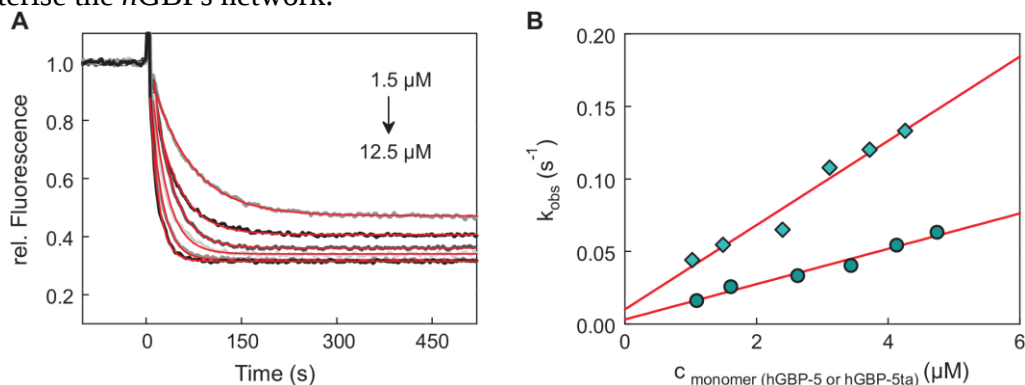
Tel.: ++49-(0)234-24173; Fax.: ++49-(0)234-14785

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

M. Kutsch, S. Ince, C. Herrmann, *FEBS J.* 285, 2019-2036 (2018)

Homo and hetero dimerisation of the human guanylate-binding proteins *hGBP-1* and *hGBP-5* characterised by affinities and kinetics.

The immune system is a complex and powerful tool to eliminate invaded pathogens as well as degenerated body cells. Interferon-inducible GTPases like *hGBP-1* and *hGBP-5* represent a group of proteins that drive a distinct mechanism of antipathogenic activity specifically directed against intracellular pathogens. The two isoforms investigated here form homomeric complexes and localise to specific cellular compartments. Upon heteromeric interactions, *hGBPs* are able to guide each other to their specific compartments. Thus, homo and heteromeric interactions allow the *hGBPs* to build a network within the cell which might be important for their diverse biological functions. We characterised homomeric and heteromeric complexes of *hGBPs* by multi-angle light scattering and fluorescence based kinetic methods. The tumour-associated splice variant (*hGBP-5ta*) was able to form a hetero dimer with *hGBP-1* even more efficiently than the wild-type. Intriguingly, both *hGBP-5* splice variants were able to induce domain rearrangements within *hGBP-1*. Our study provides mechanistic insights into the homomeric and heteromeric interactions of *hGBP-1* and *hGBP-5* and yields useful strategies to further characterise the *hGBPs* network.



(A) The rearrangement of *hGBP-1*'s C-terminal domain reported by a covalently attached FRET couple serves as a tool for the hetero dimer detection. Under pseudo-first order conditions the stopped flow kinetics show single exponentials yielding the observed rate constant k_{obs} . (B) The k_{obs} values were plotted against the *hGBP-5* monomer (circles) and the *hGBP-5ta* monomer (diamonds) concentrations, respectively, showing faster association of the tumour-associated splice variant.

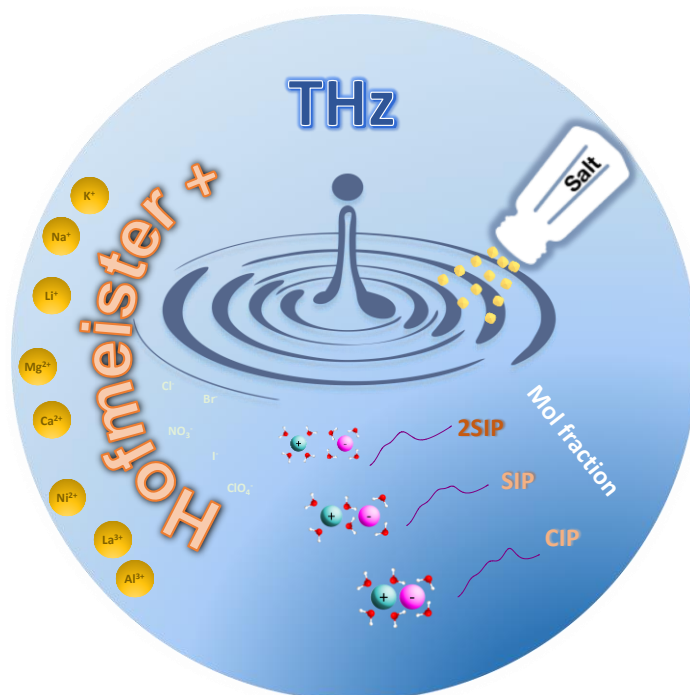
Die Vertreter der *humanen* Guanylat bindenden Proteine (*hGBP*) sind Bestandteile der immanenten Immunabwehr. In der Publikation untersuchen wir die Interaktionen zwischen verschiedenen Isoformen der *hGBPs*, wobei sich die Tumor-assoziierte Splice-Variante 5 trotz ihrer C-terminalen Deletion als besonders interaktiv mit *hGBP1* erweist (s. Abb.). Sie kann auch die gleichen strukturellen Änderungen im *hGBP1* induzieren wie der Wildtyp, was mithilfe von FRET Studien beobachtet werden konnte. Außerdem zeigen wir in dieser Veröffentlichung experimentelle Möglichkeiten auf, wie mit Lichtstreu- und mit Fluoreszenz-Methoden die Interaktionen aller Guanylat bindenden Proteine quantitativ analysiert werden können, um den Aufbau des von ihnen gespannten, zellulären Netzwerkes zu verstehen.

Prof. Dr. Martina Havenith
Chair of Physical Chemistry II
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3224249; Fax.: ++49-(0)234-14183
Email: martina.havenith@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rub.de/pc2/>

G. Schwaab, F. Sebastiani and M. Havenith, *Angew. Chem. Intl Ed.* 2019, 58, 3000–3013

Ion hydration and ion pairing as probed by THz spectroscopy.

Ion hydration is relevant to understand a variety of fundamental processes. THz-FTIR-spectroscopy is an important method to tackle questions that are still open. By a careful dissection of THz spectra we were able to identify characteristic resonances of strongly hydrated ions in their hydration cage as well as vibrationally induced charge fluctuations of weakly hydrated ions. A comparison of 39 salts yielded information on the cooperativity of anions and cations, the size of their dynamic hydration shell as well as the lifetimes of collective ion-hydration water modes and their connecting thermal bath states. We find strong indications of non-additive ionic behavior, thus putting into question the simplifying Hofmeister model. For high salt concentrations, THz spectroscopy allows us to observe and to quantify ion pair formation.



Testing the water: *The microscopic interplay between cations, anions, and water can be understood by THz-FTIR spectroscopy.*

Die Hydratation von Ionen ist wichtig für das Verständnis fundamentaler Prozesse. THz-FTIR-Spektroskopie ist eine wichtige Methode, um noch offene Fragen zu klären. Durch eine geschickte Zerlegung von THz-Spektren können sowohl charakteristische Schwingungen von stark hydratisierten Ionen in ihrem umgebenden "Solvatkäfig" als auch die schwingungsinduzierten Ladungsfluktuationen von schwach solvatisierten Ionen separiert werden. Eine weitergehende Analyse liefert zudem Informationen zur Kooperativität von Kationen und Anionen, der Größe der dynamischen Hydrathülle sowie den Lebensdauern kollektiver Ionen-Solvatwasser-Moden und der Zustände des damit verbundenen thermischen Bades. Durch Hinweise auf nicht-additives Verhalten wird das vereinfachende Hofmeister-Modell infrage gestellt. Für hohe Salzkonzentrationen wurde mittels THz-Spektroskopie Ionenpaarbildung beobachtet und quantifiziert.

Prof. Dr. Poul Petersen

Physical Chemistry II: AG Nonlinear Infrared Spectroscopy

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-32-25533

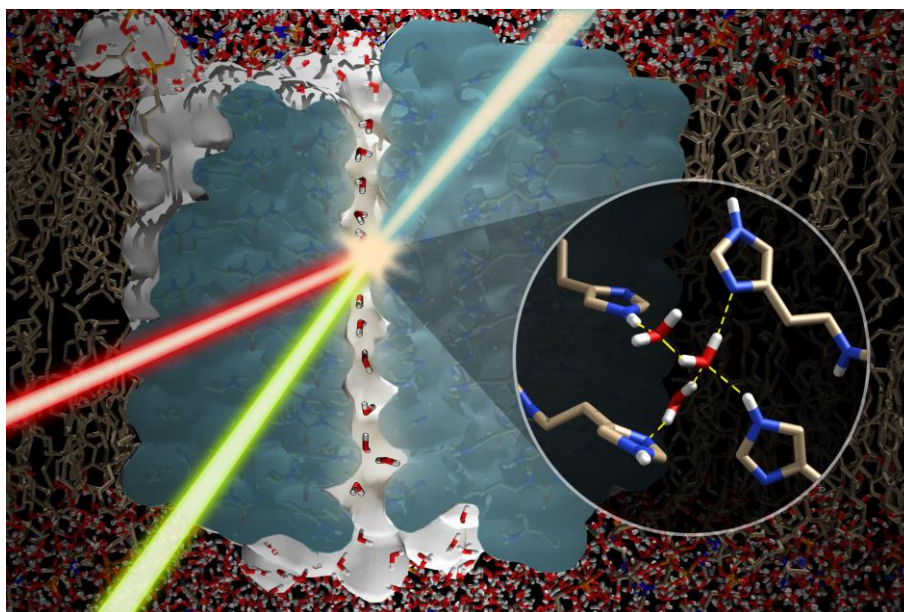
Email: poul.petersen@ruhr-uni-bochum.de; <https://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2/petersen/index.html.en>

Kocsis et al., *Sci. Adv.* 2018;4: eaao5603

Oriented chiral water wires in artificial transmembrane channels

Transmembrane channels are responsible for transporting water, protons, and ions across the cell membrane. In essence the channels form little water filled pores in the otherwise hydrophobic center of the membrane to allow the transport of the non-polar species. Being able to selectively regulate the ion and proton gradients across the cell membrane is essential to the function of the cell as well as allowing water to be transported in response in changes to the osmotic pressure. The selectivity of the transmembrane channels is governed by the hydrogen-bonded network inside the channels, but it is very difficult to obtain direct experimental information on the strength of this hydrogen-bonded network. Using chiral sum-frequency generation, we can selectively single-out and characterize the water inside artificial transmembrane channels. We find that the channel water forms a chiral water superstructure of aligned water dipoles, which is induced by the chiral channel structure, which in turn is biased towards a specific chirality by the chirality of the membrane lipids. Being able to characterize and control the dipolar orientation of the water molecules inside the channels is important to optimize the transport in artificial water channels for desalination and other purposes and in extension understanding the transport and selectivity of natural transmembrane channels.

Here **one** picture of this publication (for better visualization and understanding):



Chiral nonlinear spectroscopy offer insight into chiral water superstructures inside artificial transmembrane channels.

Dominik Marx

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

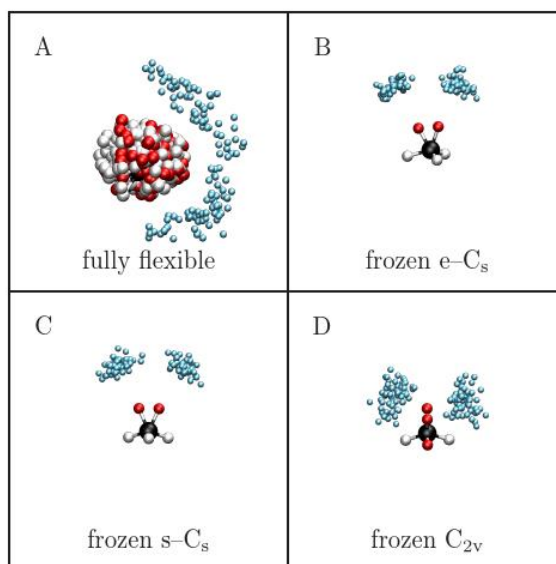
Tel.: ++49-(0)234-32-28083; Fax: ++49-(0)234-3214045

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

F. Uhl and D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* 57, 14792-14795 (2018).

Helium Tagging of Protonated Methane in Messenger Spectroscopy: Does it Interfere with the Fluxionality of CH_5^+ ?

Messenger infrared predissociation spectroscopy is an enormously powerful experimental technique to investigate elusive molecules. Despite accumulating evidence that He-tagging has a minor effect on structure due to its weak interactions, its impact on exquisite intramolecular large-amplitude motion is much less clear. Using one of the most floppy molecules known, protonated methane, we investigate to what extent helium tags perturb its large-amplitude motion. Our bosonic path integral quantum simulations show that the impact of attaching up to four He messengers is negligible.



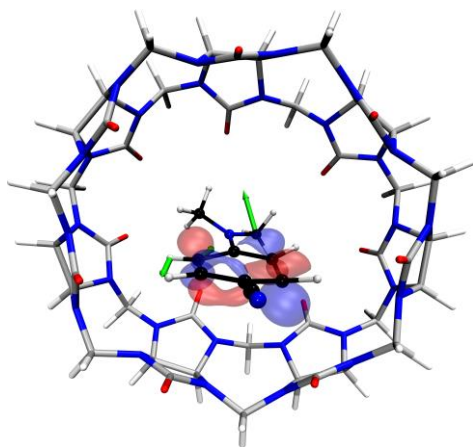
Sonden IR-Prädissoziationspektroskopie ist eine mächtige experimentelle Methode, um schwierige Moleküle zu untersuchen. Trotz vieler Hinweise, dass Heliumatome aufgrund ihrer schwachen Wechselwirkungen nur einen geringen Einfluss auf die Molekülstruktur haben ist unklar, wie ihr Einfluss auf grossamplitudige Bewegungen ist. Wir benutzen eines der fluxionalsten Moleküle, protoniertes Methan, um den Einfluss der Heliumatome auf seine grossamplitudige Bewegungen zu untersuchen. Unsere bosonischen Pfadintegralsimulationen zeigen, dass der Einfluss von bis zu vier Heliumatomen vernachlässigbar ist.

Prof. Dr. Christof Hättig
Quantum Chemistry Research Group
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3228082; Fax.: ++49-(0)234-3214045
Email: christof.haettig@rub.de; <https://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/~christof.haettig/webpage/home.html>

A. M. Khah, S. K. Khani and Christof Hättig, *J. Chem. Theory Comput.*, 2018, 14(9), pp 4640-4650

Analytic Excited State Gradients for the QM/MM Polarizable Embedded Second-Order Algebraic Diagrammatic Construction for the Polarization Propagator PE-ADC(2)

In this publication, we present a novel implementation of the second-order algebraic diagrammatic construction with a polarizable MM embedding (PE), PE-ADC(2) for the calculation of excited states of complex molecular systems, as example solutes in solvents, molecules bio-molecular environment or guests in super-molecular complexes. The performance of the method is evaluated for the host-guest complex of 4-(dimethylamino)benzonitrile inside curcubit[7]uril. We found that the system can be rather well represented in the QM/MM-PE-ADC(2) fashion and could demonstrate to which extent the PE approximation influences the excited state geometries.



Electronic excited states geometries of molecules in complex molecular environment can be studied accurately with the developed PE-ADC(2) method

In dieser Publikation präsentieren wir eine neuartige Implementierung der algebraisch-diagrammatischen Konstruktion zweiter Ordnung mit polarisierbarer Einbettung, PE-ADC(2), für die Berechnung von angeregten Zuständen komplexer molekularer Systeme, zum Beispiel in Molekülen in Lösung oder in biomolekularen Umgebungen, oder Gastmolekülen in supramolekularen Komplexen. Die Leistungsfähigkeit dieser Methode wurde für das (Dimethylamino)benzonitril im Curcubit[7]uril Komplex evaluiert. Wir stellten fest, dass sich das System sehr gut mit dem QM/MM Modell beschreiben lässt und konnten zeigen, wie weit die PE Näherung die Geometrien angeregter Zustände beeinflusst.

M. Roemelt, V. Krewald, D. A. Pantazis *J. Chem. Theory Comput.* 2018, 14, 1, 166-179

Exchange Coupling Interactions from the Density Matrix Renormalization Group and N-Electron Valence Perturbation Theory: Application to a Biomimetic Mixed-Valence Manganese Complex

The accurate description of magnetic level energetics in oligonuclear exchange-coupled transition-metal complexes remains a formidable challenge for quantum chemistry. The density matrix renormalization group (DMRG) brings such systems for the first time easily within reach of *ab initio* wave function methods. In this work we investigate how DMRG can be used to obtain exchange coupling constants (J) for an experimentally characterized manganese complex of known structure and magnetic properties, an antiferromagnetically coupled mixed-valence bis- μ -oxo/ μ -acetato Mn(III,IV) dimer (Figure 1). Importantly, numerical agreement between experiment and theory could only be achieved when both, static and dynamic electron correlation effects, are properly taken into account. This study constitutes the first time that *ab initio* wavefunction based methods have been used to quantitatively correctly calculate exchange coupling constants for a compound of this magnitude with more than two unpaired electrons. Furthermore, this work provides a guideline for applying this methodology in the same context but to compounds with other metals and ligand environments.

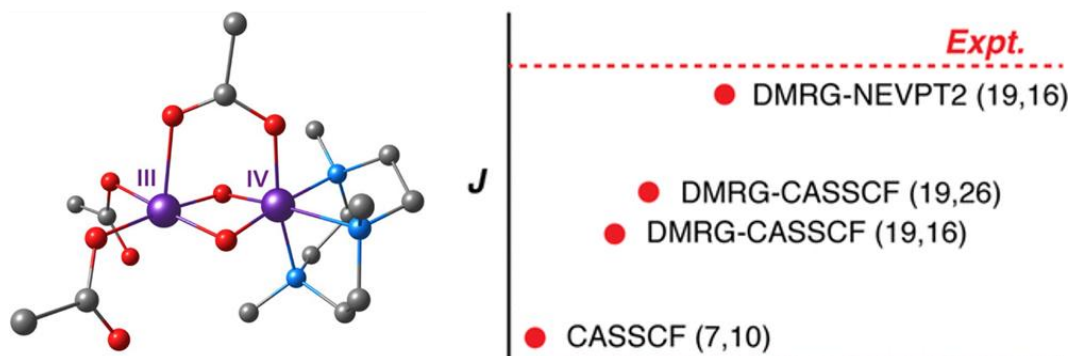


Figure 1. The mixed-valence bis- μ -oxo/ μ -acetato Mn(III,IV) dimer investigated in this study (left) together with schematic a summary of the obtained exchanged coupling constants at various levels of theory (right).

Die korrekte Beschreibung relativer Energien verschiedener Spinzustände in oligonuklearen Übergangsmetallverbindungen ist eine große Herausforderung für quantenchemische Methoden. Die Dichtematrix-Renormalisierungsgruppe (DMRG) bringt solche Systeme zum ersten Mal in die Reichweite von wellenfunktionsbasierten *ab initio* Methoden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde untersucht, wie die DMRG eingesetzt werden kann um Austauschkopplungskonstanten (J) für einen experimentell charakterisiertes bis- μ -oxo/ μ -acetato Mn(III/IV) Dimer (Figure 1) mit bekannter Struktur und bekannten magnetischen Eigenschaften zu berechnen. Numerisch korrekte Ergebnisse konnten nur erzielt werden wenn sowohl statische als auch dynamische Elektronenkorrelationseffekte in die Rechnungen miteinbezogen wurden. Diese Studie stellt den ersten Fall dar, bei dem *ab initio* Methoden erfolgreich eingesetzt wurden, um quantitativ korrekte Austauschkopplungs-konstanten für einen Komplex dieser Größenordnung mit mehr als zwei ungepaarten Elektronen zu berechnen. Darüber hinaus bietet diese Arbeit eine Leitlinie für die Anwendung dieser Methoden auf Verbindungen mit anderen Metallen und Ligandensystemen.

Robert Franke

Chair of Theoretical Chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

Evonik Performance Materials GmbH, Paul-Baumann-Straße 1, D-45772 Marl

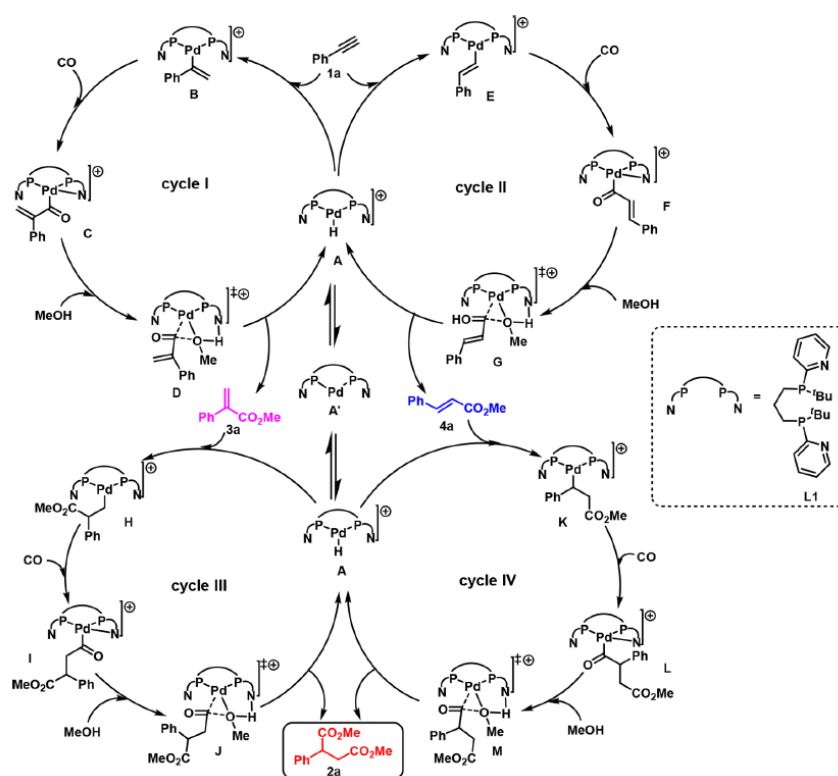
Tel.: ++49-(0)2365-492899; FAX: ++49-(0)2365-49802899

email: robert.franke@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de>

J. Liu, K. Dong, R. Franke, H. Neumann, R. Jackstell, M. Beller, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, (2018), 10282-10288

Selective Palladium-Catalyzed Carbonylation of Alkynes: An Atom-Economic Synthesis of 1,4-Dicarboxylic Acid Diesters

1,4- Dicarboxylester stellen eine wichtige Klasse von Intermediaten in der chemischen Industrie dar. Die Herausforderung und letztlich auch die notwendige Voraussetzung für Wertschöpfung ist die atomökonomische Synthese derartiger Verbindungen. Hierzu haben wir in dieser Arbeit eine neue Klasse von Liganden beschrieben, die es ermöglicht diese Verbindungen mittels Palladium-katalysierter Carbonylierung von Alkinen in effizienter Weise herzustellen.



1,4- Dicarboxyl esters are an important class of intermediates in the chemical industry. The challenge and ultimately the necessary prerequisite for value creation is the atomic-economic synthesis of such compounds. In this work we therefore describe a new class of ligands which enables the efficient production of these compounds by palladium-catalyzed carbonylation of alkynes. The resulting palladium complexes allow for chemo- and regioselective dialkoxycarbonylation of various aromatic and aliphatic alkynes affording a wide range of 1,4-dicarboxylic acid diesters in high yields and selectivities. Kinetic studies suggest the generation of 1,4-dicarboxylic acid diesters via cascade hydroesterification of the corresponding alkynes.

Lars Schäfer

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

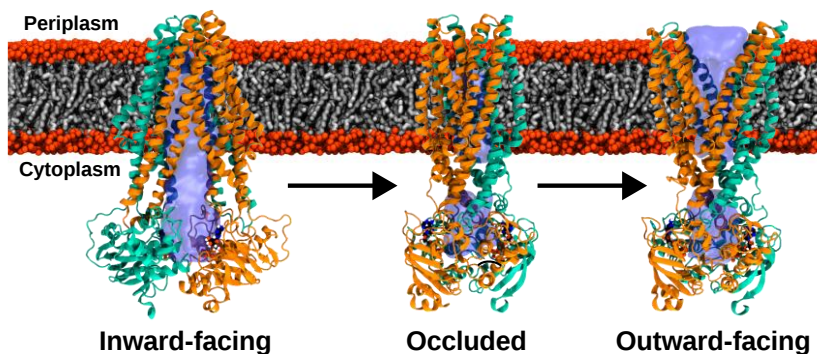
Tel.: ++49-(0)234-3221582; Fax: ++49-(0)234-3214045

email: lars.schaefer@rub.de; <http://www.molecular-simulation.org>

H. Göddeke, M.H. Timachi, C.A.J. Hutter, L. Galazzo, M.A. Seeger, M. Karttunen, E. Bordignon, L. Schäfer., *J. Am. Chem. Soc.* **140** (2018) 4543-4551.

Atomistic Mechanism of Large-Scale Conformational Transition in a Heterodimeric ABC Exporter

ATP-binding cassette (ABC) transporters are ATP-driven molecular machines, in which ATP



binding and hydrolysis in the nucleotide-binding domains (NBDs) is chemomechanically coupled to large-scale alternating access conformational changes in the transmembrane domains (TMDs), ultimately leading to the translocation of substrates across biological membranes. The precise nature of the

structural dynamics behind the large-scale conformational transition as well as the coupling of NBD and TMD motions is still unresolved.

In our work, we combine all-atom molecular dynamics (MD) simulations with electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy to unravel the atomic-level mechanism of the dynamic conformational transitions underlying the functional working cycle of the heterodimeric ABC exporter TM287/288. Extensive multimicrosecond simulations in an explicit membrane/water environment show how in response to ATP binding, TM287/288 undergoes spontaneous conformational transitions from the inward-facing (IF) state via an occluded (Occ) intermediate to an outward-facing (OF) state. The latter two states have thus far not been characterized at atomic level. ATP-induced tightening of the NBD dimer involves closing and reorientation of the two NBD monomers concomitant with a closure of the intracellular TMD gate, which leads to the occluded state. Subsequently, opening at the extracellular TMD gate yields the OF conformer. The obtained mechanism imposes NBD-TMD coupling via a tight orchestration of conformational transitions, between both the two domains and also within the TMDs, ensuring that the cytoplasmic and periplasmic gate regions are never open simultaneously.

List of Publications 2018

Analytical Chemistry I

- C. Andronescu, S. Seisel, P. Wilde, S. Barwe, J. Masa, Y.-T. Chen, E. Ventosa, W. Schuhmann, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 13773.
- H. Antoni, D. M. Morales, Q. Fu, Y.-T. Chen, J. Masa, W. Schuhmann, M. Muhler, *ACS Omega* **2018**, 3, 11216.
- S. Barwe, B. Mei, J. Masa, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Nano Energy* **2018**, 53, 763.
- S. Barwe, J. Weidner, S. Cychy, D. M. Morales, S. Dieckhöfer, D. Hiltrop, J. Masa, M. Muhler, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **2018**, 130, 11631.
- F. Behboodi-Sadabad, H. Zhang, V. Trouillet, A. Welle, N. Plumeré, P. A. Levkin, *Chem. Mater.* **2018**, 30, 1937.
- T. M. Benedetti, C. Andronescu, S. Cheong, P. Wilde, J. Wordsworth, M. Kientz, R. D. Tilley, W. Schuhmann, J. J. Gooding, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, 13449.
- C. L. Bentley, C. Andronescu, M. Smialkowski, M. Kang, T. Tarnev, B. Marler, P. R. Unwin, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 4093.
- T. Bobrowski, E. González Arribas, R. Ludwig, M. D. Toscano, S. Shleev, W. Schuhmann, *Biosensors & bioelectronics* **2018**, 101, 84.
- T. Bobrowski, W. Schuhmann, *Current Opinion in Electrochemistry* **2018**, 10, 112.
- A. Botz, J. Clausmeyer, D. Öhl, T. Tarnev, D. Franzen, T. Turek, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 12285.
- V. Brasiliense, J. Clausmeyer, P. Berto, G. Tessier, C. Combellas, W. Schuhmann, F. Kanoufi, *Analytical chemistry* **2018**, 90, 7341.
- K. Bruchlos, D. Trefz, A. Hamidi-Sakr, M. Brinkmann, J. Heinze, A. Ruff, S. Ludwigs, *Electrochimica Acta* **2018**, 269, 299.
- J. Clausmeyer, M. Nebel, S. Grützke, Y. U. Kayran, W. Schuhmann, *ChemPlusChem* **2018**, 83, 414.
- F. Conzuelo, N. Marković, A. Ruff, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 13681.
- F. Conzuelo, A. Ruff, W. Schuhmann, *Current Opinion in Electrochemistry* **2018**, 12, 156.
- F. Conzuelo, A. Schulte, W. Schuhmann, *Proceedings. Mathematical, physical, and engineering sciences* **2018**, 474, 20180409.

- M. Dirkmann, J. Iglesias-Fernández, V. Muñoz, P. Sokkar, C. Rumancev, A. von Gundlach, O. Krenczyk, T. Vöpel, J. Nowack, M. A. Schroer et al., *Chembiochem : a European journal of chemical biology* **2018**, 19, 153.
- K. Elumeeva, M. A. Kazakova, D. M. Morales, D. Medina, A. Selyutin, G. Golubtsov, Y. Ivanov, V. Kuznetsov, A. Chuvilin, H. Antoni et al., *ChemSusChem* **2018**, 11, 1204.
- M. Ertl, C. Andronescu, J. Moir, M. Zobel, F. E. Wagner, S. Barwe, G. Ozin, W. Schuhmann, J. Breu, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 9004.
- V. Eßmann, C. Santana Santos, T. Tarnev, M. Bertotti, W. Schuhmann, *Analytical chemistry* **2018**, 90, 6267.
- G. García, S. Dieckhöfer, W. Schuhmann, E. Ventosa, *J. Mater. Chem. A* **2018**, 6, 4746.
- Garzón-Manjón, H. Meyer, D. Grochla, T. Löffler, W. Schuhmann, A. Ludwig, C. Scheu, *Nanomaterials (Basel, Switzerland)* **2018**, 8.
- L. Gloag, T. M. Benedetti, S. Cheong, Y. Li, X.-H. Chan, L.-M. Lacroix, S. L. Y. Chang, R. Arenal, I. Florea, H. Barron et al., *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 10241.
- V. Hartmann, A. Ruff, W. Schuhmann, M. Rögner, M. M. Nowaczyk, *Photosynthetica* **2018**, 56, 229.
- D. Hiltrop, S. Cychy, K. Elumeeva, W. Schuhmann, M. Muhler, *Beilstein journal of organic chemistry* **2018**, 14, 1428.
- W. Jaikaew, A. Ruff, P. Khunkaewla, T. Erichsen, W. Schuhmann, A. Schulte, *Analytica chimica acta* **2018**, 1041, 33.
- V. Jakobi, J. Schwarze, J. A. Finlay, K. A. Nolte, S. Spöllmann, H.-W. Becker, A. S. Clare, A. Rosenhahn, *Biomacromolecules* **2018**, 19, 402.
- D. Jambrec, F. Conzuelo, B. Zhao, W. Schuhmann, *Electrochimica Acta* **2018**, 276, 233.
- K. Jayaramulu, J. Masa, D. M. Morales, O. Tomanec, V. Ranc, M. Petr, P. Wilde, Y.-T. Chen, R. Zboril, W. Schuhmann et al., *Advanced science (Weinheim, Baden-Wuerttemberg, Germany)* **2018**, 5, 1801029.
- Y. U. Kayran, N. Cinar, D. Jambrec, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **2018**, 5, 756.
- C. H. W. Kelly, T. M. Benedetti, A. Alinezhad, W. Schuhmann, J. J. Gooding, R. D. Tilley, *J. Phys. Chem. C* **2018**, 122, 21718.
- G. Kopiec, K. Starzec, J. Kochana, T. P. Kinnunen-Skidmore, W. Schuhmann, W. H. Campbell, A. Ruff, N. Plumeré, *Biosensors & bioelectronics* **2018**, 117, 501.

- D. Koster, R. Gutkowski, J. Masa, W. Schuhmann, *Journal of Electroanalytical Chemistry* **2018**, 812, 207.
- S. Kumari, R. Gutkowski, J. R. C. Junqueira, A. Kostka, K. Hengge, C. Scheu, W. Schuhmann, A. Ludwig, *ACS combinatorial science* **2018**, 20, 544.
- H. Li, D. Buesen, R. Williams, J. Henig, S. Stapf, K. Mukherjee, E. Freier, W. Lubitz, M. Winkler, T. Happe et al., *Chemical science* **2018**, 9, 7596.
- T. Löffler, H. Meyer, A. Savan, P. Wilde, A. Garzón Manjón, Y.-T. Chen, E. Ventosa, C. Scheu, A. Ludwig, W. Schuhmann, *Adv. Energy Mater.* **2018**, 8, 1802269.
- T. Löffler, P. Wilde, D. Öhl, Y.-T. Chen, K. Tschulik, W. Schuhmann, *Faraday discussions* **2018**, 210, 317.
- F. Lopez, T. Siepenkoetter, X. Xiao, E. Magner, W. Schuhmann, U. Salaj-Kosla, *Journal of Electroanalytical Chemistry* **2018**, 812, 194.
- F. Lopez, S. Zerria, A. Ruff, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **2018**, 30, 1311.
- M. Marquitan, T. Bobrowski, A. Ernst, P. Wilde, J. Clausmeyer, A. Ruff, W. Schuhmann, *J. Electrochem. Soc.* **2018**, 165, G3008-G3014.
- K. A. Nolte, J. Koc, J. M. Barros, K. Hunsucker, M. P. Schultz, G. W. Swain, A. Rosenhahn, *Biofouling* **2018**, 34, 398.
- K. A. Nolte, J. Schwarze, C. D. Beyer, O. Özcan, A. Rosenhahn, *Biointerphases* **2018**, 13, 41007.
- D. Öhl, J. Clausmeyer, S. Barwe, A. Botz, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **2018**, 5, 1886.
- D. Öhl, Y. U. Kayran, J. R. C. Junqueira, V. Eßmann, T. Bobrowski, W. Schuhmann, *Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids* **2018**, 34, 12293.
- A. Oughli, A. Ruff, N. P. Boralugodage, P. Rodríguez-Maciá, N. Plumeré, W. Lubitz, W. J. Shaw, W. Schuhmann, O. Rüdiger, *Nature Communications* **2018**, 9, 864.
- A. Oughli, M. Vélez, J. A. Birrell, W. Schuhmann, W. Lubitz, N. Plumeré, O. Rüdiger, *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2018**, 47, 10685.
- S. Piontek, C. Andronesco, A. Zaichenko, B. Konkena, K. junge Puring, B. Marler, H. Antoni, I. Sinev, M. Muhler, D. Mollenhauer et al., *ACS Catal.* **2018**, 8, 987.
- M. Riedel, W. J. Parak, A. Ruff, W. Schuhmann, F. Lisdat, *ACS Catal.* **2018**, 8, 5212.
- M. Rose, T. Senkbeil, A. R. von Gundlach, S. Stuhr, C. Rumancev, D. Dzhigaev, I. Besedin, P. Skopintsev, L. Loetgering, J. Viefhaus et al., *Optics express* **2018**, 26, 1237.
- A. Ruff, X. Qian, K. Porfyraakis, S. Ludwigs, *ChemistrySelect* **2018**, 3, 5778.
- A. Ruff, J. Szczesny, N. Marković, F. Conzuelo, S. Zacarias, I. A. C. Pereira, W. Lubitz, W. Schuhmann, *Nature Communications* **2018**, 9, 3675.

- G. Saper, D. Kallmann, F. Conzuelo, F. Zhao, T. N. Tóth, V. Liveanu, S. Meir, J. Szymanski, A. Aharoni, W. Schuhmann et al., *Nature Communications* **2018**, 9, 2168.
- R. Scholz, L. Davico, V. Jakobi, S. Kareth, A. Rosenhahn, E. Weidner, *Chemie Ingenieur Technik* **2018**, 90, 562.
- E. Schönemann, A. Laschewsky, A. Rosenhahn, *Polymers* **2018**, 10.
- K. P. Sokol, W. E. Robinson, J. Warnan, N. Kornienko, M. M. Nowaczyk, A. Ruff, J. Z. Zhang, E. Reisner, *Nat Energy* **2018**, 3, 944.
- K. P. Sokol, W. E. Robinson, A. R. Oliveira, J. Warnan, M. M. Nowaczyk, A. Ruff, I. A. C. Pereira, E. Reisner, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, 16418.
- S. Stuhr, V. K. Truong, J. Vongsivut, T. Senkbeil, Y. Yang, M. Al Kobaisi, V. A. Baulin, M. Werner, S. Rubanov, M. J. Tobin et al., *Scientific reports* **2018**, 8, 8413.
- J. Szczesny, N. Marković, F. Conzuelo, S. Zacarias, I. A. C. Pereira, W. Lubitz, N. Plumeré, W. Schuhmann, A. Ruff, *Nature Communications* **2018**, 9, 4715.
- R. Tavallaie, J. McCarroll, M. Le Grand, N. Ariotti, W. Schuhmann, E. Bakker, R. D. Tilley, D. B. Hibbert, M. Kavallaris, J. J. Gooding, *Nature nanotechnology* **2018**, 13, 1066.
- S. Teanphonkrang, S. Janke, P. Chaiyen, J. Sucharitakul, W. Suginta, P. Khunkaewla, W. Schuhmann, A. Ruff, A. Schulte, *Analytical chemistry* **2018**, 90, 5703.
- E. Ventosa, O. Amedu, W. Schuhmann, *ACS Appl. Energy Mater.* **2018**.
- R. Wanka, J. A. Finlay, K. A. Nolte, J. Koc, V. Jakobi, C. Anderson, A. S. Clare, H. Gardner, K. Z. Hunsucker, G. W. Swain et al., *ACS applied materials & interfaces* **2018**, 10, 34965.
- J. Weidner, S. Barwe, K. Sliozberg, S. Piontek, J. Masa, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Beilstein journal of organic chemistry* **2018**, 14, 1436.
- P. Wilde, S. Barwe, C. Andronescu, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Nano Res.* **2018**, 11, 6034.
- P. Wilde, T. Quast, H. B. Aiyappa, Y.-T. Chen, A. Botz, T. Tarnev, M. Marquitan, S. Feldhege, A. Lindner, C. Andronescu et al., *ChemElectroChem* **2018**, 5, 3083.
- L. Xiao, J. A. Finlay, M. Röhrig, S. Mieszkina, M. Worgull, H. Hölscher, J. A. Callow, M. E. Callow, M. Grunze, A. Rosenhahn, *Biofouling* **2018**, 34, 86.
- A. R. Zeradjanin, E. Ventosa, J. Masa, W. Schuhmann, *Journal of Electroanalytical Chemistry* **2018**, 828, 63.
- F. Zhao, S. Hardt, V. Hartmann, H. Zhang, M. M. Nowaczyk, M. Rögner, N. Plumeré, W. Schuhmann, F. Conzuelo, *Nature Communications* **2018**, 9, 1973.

- F. Zhao, V. Hartmann, A. Ruff, M. M. Nowaczyk, M. Rögner, W. Schuhmann, F. Conzuelo, *Electrochimica Acta* **2018**, 290, 451.

Analytical Chemistry II

- G. Bertoli, B. Exner, M. V. Evers, K. Tschulik, L. J. Gooßen, *Journal of Fluorine Chemistry* **2018**, 210, 132.
- V. Brasiliense, J.-M. Noël, K. Wonner, K. Tschulik, C. Combellas, F. Kanoufi, *ChemElectroChem* **2018**, 5, 3036.
- M. V. Evers, K. Wonner, K. Tschulik, *Nachr. Chem.* **2018**, 66, 1153.
- V. Grasmik, C. Rurainsky, K. Loza, M. V. Evers, O. Prymak, M. Heggen, K. Tschulik, M. Epple, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 9051.
- D. Hayrapetyan, R. K. Rit, M. Kratz, K. Tschulik, L. J. Gooßen, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 11288.
- K. Kanokkanchana, E. N. Saw, K. Tschulik, *ChemElectroChem* **2018**, 5, 3000.
- T. Löffler, J. Clausmeyer, P. Wilde, K. Tschulik, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Nano Energy* **2019**, 57, 827.
- T. Löffler, P. Wilde, D. Öhl, Y.-T. Chen, K. Tschulik, W. Schuhmann, *Faraday discussions* **2018**, 210, 317.
- E. N. Saw, N. Blanc, K. Kanokkanchana, K. Tschulik, *Electrochimica Acta* **2018**, 282, 317.
- K. Wonner, M. V. Evers, K. Tschulik, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, 12658.

Biochemistry I

- J. Borycz, A. Ziegler, J. A. Borycz, G. Uhlenbrock, D. Tapken, L. Caceres, M. Hollmann, B. T. Hovemann, I. A. Meinertzhagen, *Biology open* **2018**, 7.
- A. Jack, M. I. K. Hamad, S. Gonda, S. Gralla, S. Pahl, M. Hollmann, P. Wahle, *Molecular neurobiology* **2018**.
- S. Pachernegg, S. Eilebrecht, E. Eilebrecht, H. Schöneborn, S. Neumann, A. G. Benecke, M. Hollmann, *PloS one* **2018**, 13, e0192242.
- H. Pan, B. Oliveira, G. Saher, E. Dere, D. Tapken, M. Mitjans, J. Seidel, J. Wesolowski, D. Wakhloo, C. Klein-Schmidt et al., *Molecular psychiatry* **2018**.

Biochemistry II

- T. Al-Harthy, W. M. Zoghaib, R. Stoll, R. Abdel-Jalil, *Monatsh Chem* **2018**, 149, 645.
- P. S. Athanasopoulos, R. Heumann, A. Kortholt, *Biological chemistry* **2018**, 399, 643.
- R. Heumann, *Biological chemistry* **2018**, 399, 621.
- G. Kock, M. Dicks, K. T. Yip, B. Kohl, S. Pütz, R. Heumann, K. S. Erdmann, R. Stoll, *Journal of molecular biology* **2018**, 430, 4275.
- P. F. J. Lipiński, P. Garnuszek, M. Maurin, R. Stoll, N. Metzler-Nolte, A. Wodyński, J. C. Dobrowolski, M. K. Dudek, M. Orzełowska, R. Mikołajczak, *EJNMMI research* **2018**, 8, 33.
- D. Paliga, F. Raudzus, S. H. Leppla, R. Heumann, S. Neumann, *Molecular neurobiology* **2019**, 56, 3393.
- H. Schöneborn, F. Raudzus, M. Coppey, S. Neumann, R. Heumann, *International journal of molecular sciences* **2018**, 19.
- M. Schöpel, O. Shkura, J. Seidel, K. Kock, X. Zhong, S. Löffek, I. Helfrich, H. S. Bachmann, J. Scherkenbeck, C. Herrmann et al., *International journal of molecular sciences* **2018**, 19.
- M. Serdar, J. Herz, K. Kempe, E. Winterhager, H. Jastrow, R. Heumann, U. Felderhoff-Müser, I. Bendix, *Frontiers in neurology* **2018**, 9, 175.
- L. M. Solanko, D. P. Sullivan, Y. Y. Sere, M. Szomek, A. Lunding, K. A. Solanko, A. Pizovic, L. D. Stanchev, T. G. Pomorski, A. K. Menon et al., *Traffic (Copenhagen, Denmark)* **2018**, 19, 198.
- T.-T. Tung, T. T. Dao, M. G. Junyent, M. Palmgren, T. Günther-Pomorski, A. T. Fuglsang, S. B. Christensen, J. Nielsen, *ChemMedChem* **2018**, 13, 37.
- Y. Yordanova, W. Vanderlinden, R. Stoll, D. Rüdiger, A. Tosstorff, W. Zaremba, G. Winter, S. Zahler, W. Friess, *Scientific reports* **2018**, 8, 11280.
- X. Zhong, O. Arnolds, O. Krenczyk, J. Gajewski, S. Pütz, C. Herrmann, R. Stoll, *Biochemistry* **2018**, 57, 6045.

Didactics of Chemistry

- K. Sommer, J. Wirth, N. Rummel, *Unterrichtswiss* **2018**, 46, 253.
- C. Strippel, L. Tomala, K. Sommer, *RISTAL* **2018**, 1, 66.

EPR Spectroscopy

- T. E. Assafa, K. Anders, U. Linne, L.-O. Essen, E. Bordignon, *Structure (London, England : 1993)* **2018**, 26, 1534-1545.e4.
- S. Bleicken, T. E. Assafa, C. Stegmüller, A. Wittig, A. J. Garcia-Saez, E. Bordignon, *Cell death and differentiation* **2018**, 25, 1717.
- H. Göddeke, M. H. Timachi, C. A. J. Hutter, L. Galazzo, M. A. Seeger, M. Karttunen, E. Bordignon, L. V. Schäfer, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, 4543.
- M. Teucher, E. Bordignon, *Journal of magnetic resonance (San Diego, Calif. : 1997)* **2018**, 296, 103.

Inorganic Chemistry I

- U.-P. Apfel, S. Demir, A. Berkefeld, *Nachr. Chem.* **2018**, 66, 230;
- C. L. Bentley, C. Andronesco, M. Smialkowski, M. Kang, T. Tarnev, B. Marler, P. R. Unwin, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 4093;
- J. Duan, M. Senger, J. Esselborn, V. Engelbrecht, F. Wittkamp, U.-P. Apfel, E. Hofmann, S. T. Stripp, T. Happe, M. Winkler, *Nature communications* **2018**, 9, 4726;
- D. D. Enkelmann, J. Handelsmann, C. Schauerte, K. Merz, *CrystEngComm* **2019**, 21, 2130;
- J. Falk, D. Hofmann, K. Merz, *IUCrJ* **2018**, 5, 569;
- G. Gasser, I. Ott, N. Metzler-Nolte, *Journal of medicinal chemistry* **2011**, 54, 3;
- Y. Gothe, I. Romero-Canelón, T. Marzo, P. J. Sadler, L. Messori, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2018**, 2018, 2461;
- O. Kabil, N. Motl, M. Strack, J. Seravalli, N. Metzler-Nolte, R. Banerjee, *J. Biol. Chem.* **2018**, 293, 12429;
- M. König, D. Siegmund, L. J. Raszeja, A. Prokop, N. Metzler-Nolte, *MedChemComm* **2018**, 9, 173;
- K. Laun, S. Mebs, J. Duan, F. Wittkamp, U.-P. Apfel, T. Happe, M. Winkler, M. Haumann, S. Stripp, *Molecules* **2018**, 23, 1669;
- P. Laverman, M. Béhé, W. J. G. Oyen, P. H. G. M. Willems, F. H. M. Corstens, T. M. Behr, O. C. Boerman, *Bioconjugate Chem.* **2004**, 15, 561;

- S. Mebs, R. Kositzki, J. Duan, L. Kertess, M. Senger, F. Wittkamp, U.-P. Apfel, T. Happe, S. T. Stripp, M. Winkler et al., *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics* **2018**, 1859, 28;
- F. Möller, S. Piontek, R. G. Miller, U.-P. Apfel, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 1471;
- M. Muñoz-Osses, F. Godoy, A. Fierro, A. Gómez, N. Metzler-Nolte, *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2018**, 47, 1233;
- M. Muñoz-Osses, D. Siegmund, A. Gómez, F. Godoy, A. Fierro, L. Llanos, D. Aravena, N. Metzler-Nolte, *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2018**, 47, 13861;
- W. Neumann, E. M. Nolan, *Journal of biological inorganic chemistry : JBIC : a publication of the Society of Biological Inorganic Chemistry* **2018**, 23, 1025;
- W. Neumann, M. Sassone-Corsi, M. Raffatellu, E. M. Nolan, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 5193;
- S. Piontek, C. Andronesu, A. Zaichenko, B. Konkena, K. junge Puring, B. Marler, H. Antoni, I. Sinev, M. Muhler, D. Mollenhauer et al., *ACS Catal.* **2018**, 8, 987;
- M. Senger, S. Mebs, J. Duan, O. Shulenina, K. Laun, L. Kertess, F. Wittkamp, U.-P. Apfel, T. Happe, M. Winkler et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 3128;
- O. V. Shishkin, K. Merz, V. Vasylyeva, R. I. Zubatyuk, *Crystal Growth & Design* **2018**, 18, 4445;
- D. Smiłowicz, N. Metzler-Nolte, *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2018**, 47, 15465;
- D. Tetzlaff, C. Simon, D. S. Achilleos, M. Smialkowski, K. junge Puring, A. Bloesser, S. Piontek, H. Kasap, D. Siegmund, E. Reisner et al., *Faraday discussions* **2019**;
- U.-P. Apfel, S. T. Stripp, *GIT Labor-Fachzeitschrift*, **2018**, 2;
- J. Weidner, S. Barwe, K. Sliozberg, S. Piontek, J. Masa, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Beilstein journal of organic chemistry* **2018**, 14, 1436;
- L. C. Weiss, B. Albada, S. M. Becker, S. W. Meckelmann, J. Klein, M. Meyer, O. J. Schmitz, U. Sommer, M. Leo, J. Zagermann et al., *Nat Chem Biol* **2018**, 14, 1133;
- F. Wittkamp, M. Senger, S. T. Stripp, U.-P. Apfel, *Chem. Commun.* **2018**, 54, 5934;
- C. Y. Zamora, A. G. E. Madec, W. Neumann, E. M. Nolan, B. Imperiali, *Bioorganic & medicinal chemistry* **2018**, 26, 5314.

Inorganic Chemistry II

- J. Keupp, R. Schmid, *Faraday discussions* **2018**, 211, 79.
- C.-N. Liu, F. Böke, M. Gebhard, A. Devi, H. Fischer, A. Keller, G. Grundmeier, *Surface and Coatings Technology* **2018**, 345, 167.
- L. Mai, N. Boysen, E. Subaşı, T. d. l. Arcos, D. Rogalla, G. Grundmeier, C. Bock, H.-L. Lu, A. Devi, *RSC Adv.* **2018**, 8, 4987.
- M. Mattinen, J.-L. Wree, N. Stegmann, E. Ciftiyurek, M. E. Achhab, P. J. King, K. Mizohata, J. Räisänen, K. D. Schierbaum, A. Devi et al., *Chem. Mater.* **2018**, 30, 8690.
- A. C. Medina, R. Schmid, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **2019**, 350, 343.
- L. T. Scharf, J. Weismann, K.-S. Feichtner, F. Lindl, V. H. Gessner, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 3439.
- T. Scherpf, C. Schwarz, L. T. Scharf, J.-A. Zur, A. Helbig, V. H. Gessner, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 12859.
- M. Siebels, L. Mai, L. Schmolke, K. Schütte, J. Barthel, J. Yue, J. Thomas, B. M. Smarsly, A. Devi, R. A. Fischer et al., *Beilstein journal of nanotechnology* **2018**, 9, 1881.
- M. Wiesing, T. de Los Arcos, M. Gebhard, A. Devi, G. Grundmeier, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2017**, 20, 180.
- R. Medishetty, Z. Zhang, A. Sadlo, S. Cwik, D. Peeters, S. Henke, N. Mangayarkarasi, A. Devi, *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2018**, 47, 14179.
- R. O'Donoghue, S. Rahman, B. Mallick, M. Winter, D. Rogalla, H.-W. Becker, A. Devi, *New J. Chem.* **2018**, 42, 3196.
- D. Pache, R. Schmid, *ChemElectroChem* **2018**, 5, 1444.
- D. Peeters, O. Mendoza Reyes, L. Mai, A. Sadlo, S. Cwik, D. Rogalla, H.-W. Becker, H. M. Schütz, J. Hirst, S. Müller et al., *J. Mater. Chem. A* **2018**, 6, 10206.
- S. Pielsticker, G. Möller, B. Gövert, T. Kreitzberg, O. Hatzfeld, Ö. Yönder, V. Angenent, C. Hättig, R. Schmid, R. Kneer, *Biomass and Bioenergy* **2018**, 119, 392.
- Q.-H. Ren, Y. Zhang, H.-L. Lu, Y.-P. Wang, W.-J. Liu, X.-M. Ji, A. Devi, A.-Q. Jiang, D. W. Zhang, *ACS applied materials & interfaces* **2018**, 10, 468.
- A. Sadlo, S. M. J. Beer, S. Rahman, M. Grafen, D. Rogalla, M. Winter, A. Ostendorf, A. Devi, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2018**, 2018, 1824.
- G. Bačić, D. Zanders, B. Mallick, A. Devi, S. T. Barry, *Inorganic chemistry* **2018**, 57, 8218.

- D. Barreca, G. Carraro, E. Fois, A. Gasparotto, F. Gri, R. Seraglia, M. Wilken, A. Venzo, A. Devi, G. Tabacchi et al., *J. Phys. Chem. C* **2018**, 122, 1367.
- N. Boysen, T. Hasselmann, S. Karle, D. Rogalla, D. Theirich, M. Winter, T. Riedl, A. Devi, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 16224.
- S. Cwik, D. Mitoraj, O. Mendoza Reyes, D. Rogalla, D. Peeters, J. Kim, H. M. Schütz, C. Bock, R. Beranek, A. Devi, *Adv. Mater. Interfaces* **2018**, 5, 1800140.
- K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Chemical communications (Cambridge, England)* **2018**, 54, 6540.
- S. Impeng, R. Cedeno, J. P. Dürholt, R. Schmid, S. Bureekaew, *Crystal Growth & Design* **2018**, 18, 2699.
- K. Junge Puring, D. Zywitzki, D. H. Taffa, D. Rogalla, M. Winter, M. Wark, A. Devi, *Inorganic chemistry* **2018**, 57, 5133.
- M. Gebhard, F. Mitschker, C. Hoppe, M. Aghaee, D. Rogalla, M. Creatore, G. Grundmeier, P. Awakowicz, A. Devi, *Plasma Process Polym* **2018**, 15, 1700209.
- K.-S. Feichtner, T. Scherpf, V. H. Gessner, *Organometallics* **2018**, 37, 645.
- M. Gebhard, L. Mai, L. Banko, F. Mitschker, C. Hoppe, M. Jaritz, D. Kirchheim, C. Zekorn, T. de Los Arcos, D. Grochla et al., *ACS applied materials & interfaces* **2018**, 10, 7422.
- D. J. Hagen, L. Mai, A. Devi, J. Sainio, M. Karppinen, *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2018**, 47, 15791.

Organic Chemistry I

G. Bertoli, B. Exner, M. V. Evers, K. Tschulik, L. J. Gooßen, *Journal of Fluorine Chemistry* **2018**, 210, 132.

- V. Bragoni, R. K. Rit, R. Kirchmann, A. S. Trita, L. J. Gooßen, *Green Chem.* **2018**, 20, 3210.
- A. Dreger, E. Engelage, B. Mallick, P. D. Beer, S. M. Huber, *Chemical communications (Cambridge, England)* **2018**, 54, 4013.
- E. Engelage, N. Schulz, F. Heinen, S. M. Huber, D. G. Truhlar, C. J. Cramer, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 15983.
- D. Hayrapetyan, R. K. Rit, M. Kratz, K. Tschulik, L. J. Gooßen, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 11288.
- F. Heinen, E. Engelage, A. Dreger, R. Weiss, S. M. Huber, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 3830.
- X.-Q. Hu, Z. Hu, A. S. Trita, G. Zhang, L. J. Gooßen, *Chemical science* **2018**, 9, 5289.

- X.-Q. Hu, Z. Hu, G. Zhang, N. Sivendran, L. J. Gooßen, *Organic letters* **2018**, 20, 4337.
- S. Kovács, B. Bayarmagnai, A. Aillerie, L. J. Gooßen, *Adv. Synth. Catal.* **2018**, 360, 1913.
- H. Li, Q. Jiang, X. Jie, Y. Shang, Y. Zhang, L. J. Goossen, W. Su, *ACS Catal.* **2018**, 8, 4777.
- Y. Ou, L. J. Gooßen, *Asian J. Org. Chem.* **2019**, 8, 650.
- J. Pollini, V. Bragoni, L. J. Gooßen, *Beilstein journal of organic chemistry* **2018**, 14, 2737.
- N. Schulz, S. Schindler, S. M. Huber, M. Erdelyi, *The Journal of organic chemistry* **2018**, 83, 10881.
- N. Schulz, P. Sokkar, E. Engelage, S. Schindler, M. Erdelyi, E. Sanchez-Garcia, S. M. Huber, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 3464.
- J. Stoesser, G. Rojas, D. Bulfield, P. I. Hidalgo, J. Pasán, C. Ruiz-Pérez, C. A. Jiménez, S. M. Huber, *New J. Chem.* **2018**, 42, 10476.
- J. Thirman, E. Engelage, S. M. Huber, M. Head-Gordon, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2018**, 20, 905.
- A. S. Trita, A. Biafora, M. Pichette Drapeau, P. Weber, L. J. Gooßen, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 14580.
- L. Vogel, P. Wonner, S. M. Huber, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 1880.
- T. Wendling, E. Risto, T. Krause, L. J. Gooßen, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 6019.
- P. Wonner, L. Vogel, R. Weiss, S. M. Huber, *Nachr. Chem.* **2018**, 66, 952.
- G. Zhang, F. Jia, L. J. Gooßen, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 4537.
- N. Zumbrägel, C. Merten, S. M. Huber, H. Gröger, *Nature communications* **2018**, 9, 1949.

Organic Chemistry II

- K. Bünnemann, C. H. Pollok, C. Merten, *The journal of physical chemistry. B* **2018**, 122, 8056.
- S. Henkel, I. Trosien, J. Mieres-Pérez, T. Lohmiller, A. Savitsky, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *The Journal of organic chemistry* **2018**, 83, 7586.
- N. M. Kreienborg, C. Merten, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 17948.

- N. M. Kreienborg, C. Merten, *Physical chemistry chemical physics: PCCP* **2019**, 21, 3506.
- H. Li, R. Gontla, J. Flegel, C. Merten, S. Ziegler, A. P. Antonchick, H. Waldmann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 307.
- K. Lucht, I. Trosien, W. Sander, K. Morgenstern, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 16334.
- E. Mendez-Vega, M. Maehara, A. H. Raut, J. Mieres-Perez, M. Tsuge, Y.-P. Lee, W. Sander, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 18801.
- J. Mieres-Perez, P. Costa, E. Mendez-Vega, R. Crespo-Otero, W. Sander, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, 17271.
- S. Perera, J. Cheramy, C. Merten, J. Thomas, Y. Xu, *Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry* **2018**, 19, 2234.
- S. Radhakrishnan, M. S. Gudipati, W. Sander, A. Lignell, *ApJ* **2018**, 864, 151.
- H. Raut, P. Costa, W. Sander, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2018**, 24, 18043.
- G. Shan, J. Flegel, H. Li, C. Merten, S. Ziegler, A. P. Antonchick, H. Waldmann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 14250.
- S. Shankar, M. Peters, K. Steinborn, B. Krahwinkel, F. D. Sönnichsen, D. Grote, W. Sander, T. Lohmiller, O. Rüdiger, R. Herges, *Nature Communications* **2018**, 9, 4750.
- N. Zumbrägel, C. Merten, S. M. Huber, H. Gröger, *Nature Communications* **2018**, 9, 1949.

Physical Chemistry I

- P. Auburger, I. Kemeny, C. Bertram, M. Ligges, M. Bockstedte, U. Bovensiepen, K. Morgenstern, *Physical review letters* **2018**, 121, 206001.
- G. Bakradze, K. Morgenstern, *Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry* **2018**, 19, 2858.
- M. Dirkmann, J. Iglesias-Fernández, V. Muñoz, P. Sokkar, C. Rumancev, A. von Gundlach, O. Krenczyk, T. Vöpel, J. Nowack, M. A. Schroer et al., *Chembiochem : a European journal of chemical biology* **2018**, 19, 153.
- S.-C. Heidorn, C. Bertram, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **2018**, 122, 15304.
- M. Kutsch, S. Ince, C. Herrmann, *The FEBS journal* **2018**, 285, 2019.
- K. Lucht, D. Loose, M. Ruschmeier, V. Strotkötter, G. Dyker, K. Morgenstern, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 1266.

- K. Lucht, I. Trosien, W. Sander, K. Morgenstern, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2018**, 57, 16334.
- S. Mohammadi-Ostad-Kalayeh, F. Stahl, T. Scheper, K. Kock, C. Herrmann, F. A. Heleno Batista, J. C. Borges, F. Sasse, S. Eichner, J. Ongouta et al., *Chembiochem : a European journal of chemical biology* **2018**, 19, 562.
- Z. Qu, S. Fujita-Becker, E. Ballweber, S. Ince, C. Herrmann, R. R. Schröder, H. G. Mannherz, *The FEBS journal* **2018**, 285, 1715.
- M. Schöpel, O. Shkura, J. Seidel, K. Kock, X. Zhong, S. Löffek, I. Helfrich, H. S. Bachmann, J. Scherkenbeck, C. Herrmann et al., *International journal of molecular sciences* **2018**, 19.
- M. Schöpel, O. Shkura, J. Seidel, K. Kock, X. Zhong, S. Löffek, I. Helfrich, H. S. Bachmann, J. Scherkenbeck, C. Herrmann et al., *International journal of molecular sciences* **2018**, 19.
- C. Zaum, K. M. Meyer-auf-der-Heide, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **2018**, 97.
- C. Zaum, K. Morgenstern, *Physical review letters* **2018**, 121, 185901.
- C. Zaum, K. Morgenstern, *Appl. Phys. Lett.* **2018**, 113, 31602.
- X. Zhong, O. Arnolds, O. Krenczyk, J. Gajewski, S. Pütz, C. Herrmann, R. Stoll, *Biochemistry* **2018**, 57, 6045.

Physical Chemistry II

- V. Conti Nibali, G. Morra, M. Havenith, G. D'Angelo, G. Colombo, *AAPP* **2018**, 96, A6_1–A6_8.
- A. Esser, H. Forbert, F. Sebastiani, G. Schwaab, M. Havenith, D. Marx, *The journal of physical chemistry. B* **2018**, 122, 1453.
- C. Klinkhammer, F. Böhm, V. Sharma, G. Schwaab, M. Seitz, M. Havenith, *The Journal of chemical physics* **2018**, 148, 222802.
- I. Kocsis, M. Sorci, H. Vanselous, S. Murail, S. E. Sanders, E. Licsandru, Y.-M. Legrand, A. van der Lee, M. Baaden, P. B. Petersen et al., *Science advances* **2018**, 4, eaao5603.
- S. E. Sanders, H. Vanselous, P. B. Petersen, *Journal of physics. Condensed matter: an Institute of Physics journal* **2018**, 30, 113001.
- G. Schwaab, F. Sebastiani, M. Havenith, *Angew. Chem.* **2019**, 131, 3030.
- M. Senske, Y. Xu, A. Bäumer, S. Schäfer, H. Wirtz, J. Savolainen, H. Weingärtner, M. Havenith, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2018**, 20, 8515.
- A. M. Stingel, P. B. Petersen, *The journal of physical chemistry. A* **2018**, 122, 2670.
- B. L. van Hoozen, P. B. Petersen, *The Journal of chemical physics* **2018**, 148, 134309.

- H. Vanselous, P. E. Videla, V. S. Batista, P. B. Petersen, *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 26018.
- H. Wirtz, S. Schäfer, C. Hoberg, M. Havenith, *J Infrared Milli Terahz Waves* **2018**, *39*, 816.
- H. Wirtz, S. Schäfer, C. Hoberg, K. M. Reid, D. M. Leitner, M. Havenith, *Biochemistry* **2018**, *57*, 3650.

Theoretical Chemistry

- S. Pielsticker, G. Möller, B. Gövert, T. Kreitzberg, O. Hatzfeld, Ö. Yönder, V. Angenent, C. Hättig, R. Schmid, R. Kneer, *Biomass and Bioenergy* **2018**, *119*, 392.
- A. Marefat Khah, L. Grimmelsmann, J. Knorr, P. Nuernberger, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 28075.
- A. Marefat Khah, S. Karbalaei Khani, C. Hättig, *Journal of Chemical Theory and Computation* **2018**, *14*, 4640.
- C. Badala Viswanatha, B. Helmich-Paris, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 21051.
- C. Bock, F. Löhr, F. Tumulka, K. Reichel, J. Würz, G. Hummer, L. Schäfer, R. Tampé, B. Joseph, F. Bernhard et al., *Scientific Reports* **2018**, *8*, 15662.
- B. Dahms, R. Franke, S. R. Waldvogel, *ChemElectroChem* **2018**, *5*, 1244.
- K. Dong, R. Sang, Z. Wei, J. Liu, R. Dühren, A. Spannenberg, H. Jiao, H. Neumann, R. Jackstell, R. Franke et al., *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 2510.
- A. Esser, H. Forbert, D. Marx, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 1560.
- A. Esser, H. Forbert, F. Sebastiani, G. Schwaab, M. Havenith, D. Marx, *The Journal of Physical Chemistry B* **2018**, *122*, 1453.
- Fabian Nadolny, Bernd Hannebauer, Felix Alscher, Stephan Peitz, Wladimir Reschetilowski, Robert Franke, *Journal of Catalysis* **2018**, *367*, 81.
- R. Francke, B. Schille, M. Roemelt, *Chemical Reviews* **2018**, *118*, 4631.
- M. S. Frank, C. Hättig, *The Journal of Chemical Physics* **2018**, *148*, 134102.
- H. Göddeke, M. H. Timachi, C. A. J. Hutter, L. Galazzo, M. A. Seeger, M. Karttunen, E. Bordignon, L. V. Schäfer, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, *140*, 4543.
- F. Hoffmann, F. A. A. Mulder, L. V. Schäfer, *The Journal of Physical Chemistry B* **2018**, *122*, 5038.
- F. Hoffmann, M. Xue, L. V. Schäfer, F. A. A. Mulder, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, *20*, 24577.

- Y. Imada, J. L. Röckl, A. Wiebe, T. Gieshoff, D. Schollmeyer, K. Chiba, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Angewandte Chemie International Edition* **2018**, 57, 12136.
- S. Imoto, H. Forbert, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 6146.
- S. Karbalaei Khani, A. Marefat Khah, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 16354.
- N. Kumar, D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2018**, 20, 20886.
- S. Lips, B. A. Frontana-Urbe, M. Dörr, D. Schollmeyer, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Chemistry – A European Journal* **2018**, 24, 6057.
- S. Lips, D. Schollmeyer, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Angewandte Chemie International Edition* **2018**, 57, 13325.
- J. Liu, K. Dong, R. Franke, H. Neumann, R. Jackstell, M. Beller, *Chem. Commun.* **2018**, 54, 12238.
- J. Liu, K. Dong, R. Franke, H. Neumann, R. Jackstell, M. Beller, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140, 10282.
- D. Marx, M. I. Menéndez, *The Journal of Organic Chemistry* **2018**, 83, 2438.
- D. Muñoz-Santiburcio, M. Farnesi Camellone, D. Marx, *Angewandte Chemie International Edition* **2018**, 57, 3327.
- E. Oberem, A. F. Roesel, A. Rosas-Hernández, T. Kull, S. Fischer, A. Spannenberg, H. Junge, M. Beller, R. Ludwig, M. Roemelt et al., *Organometallics* **2019**, 38, 1236.
- M. Prieß, H. Göddeke, G. Groenhof, L. V. Schäfer, *ACS Central Science* **2018**, 4, 1334.
- F. M. S. Rodrigues, P. K. Kucmierczyk, M. Pineiro, R. Jackstell, R. Franke, M. M. Pereira, M. Beller, *ChemSusChem* **2018**, 11, 2310.
- M. Roemelt, V. Krewald, D. A. Pantazis, *Journal of Chemical Theory and Computation* **2018**, 14, 166.
- R. Sang, P. Kucmierczyk, K. Dong, R. Franke, H. Neumann, R. Jackstell, M. Beller, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, 140.
- M. Sawall, A. Moog, C. Kubis, H. Schröder, D. Selent, R. Franke, A. Brächer, A. Börner, K. Neymeyr, *Journal of Chemometrics* **2018**, 32, e3012.
- P. Schienbein, D. Marx, *Phys. Rev. E* **2018**, 98, 22104.
- P. Schienbein, D. Marx, *The Journal of Physical Chemistry B* **2018**, 122, 3318.
- C. Schran, F. Briec, D. Marx, *Journal of Chemical Theory and Computation* **2018**, 14, 5068.
- C. Schran, F. Uhl, J. Behler, D. Marx, *The Journal of Chemical Physics* **2018**, 148, 102310.
- L. Schulz, R. Franke, S. R. Waldvogel, *ChemElectroChem* **2018**, 5, 2069.

- N. Siemer, A. Lüken, M. Zalibera, J. Frenzel, D. Muñoz-Santiburcio, A. Savitsky, W. Lubitz, M. Muhler, D. Marx, J. Strunk, *Journal of the American Chemical Society* **2018**, *140*, 18082.
- F. Uhl, D. Marx, *Angewandte Chemie International Edition* **2018**, *57*, 14792.
- M. Wollenhaupt, C. Schran, M. Krupička, D. Marx, *ChemPhysChem* **2018**, *19*, 837.
- J.-X. Xu, R. Franke, X.-F. Wu, *Org. Biomol. Chem.* **2018**, *16*, 6180.
- R. Zhu, W. M. Bloch, J. J. Holstein, S. Mandal, L. V. Schäfer, G. H. Clever, *Chemistry – A European Journal* **2018**, *24*, 12976.