

Faculty Report 2019

XVIII. Fakultät für Chemie und Biochemie

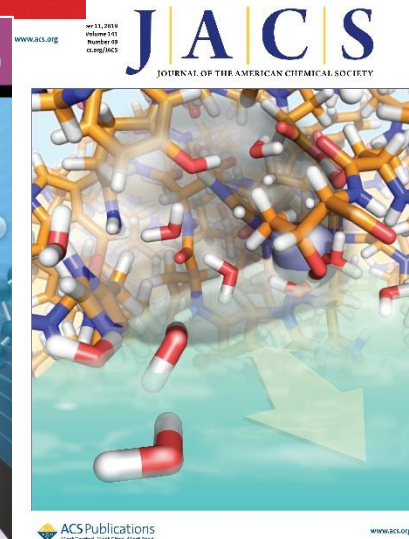
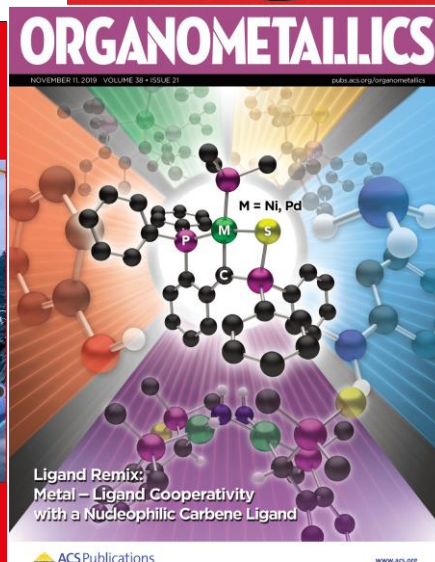
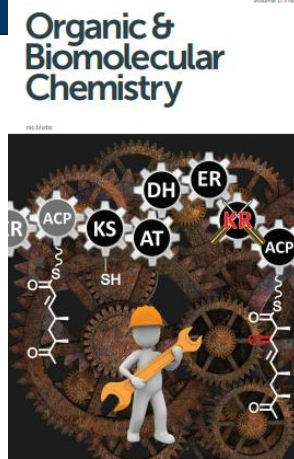
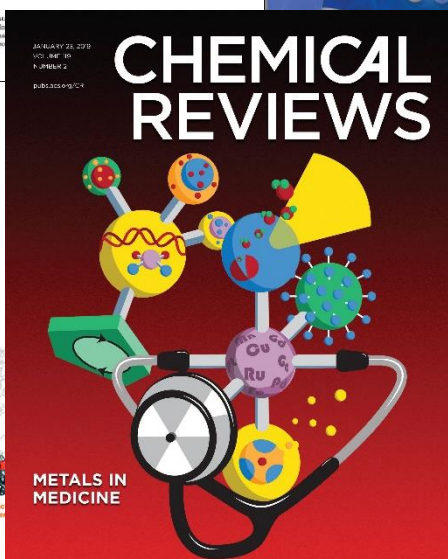
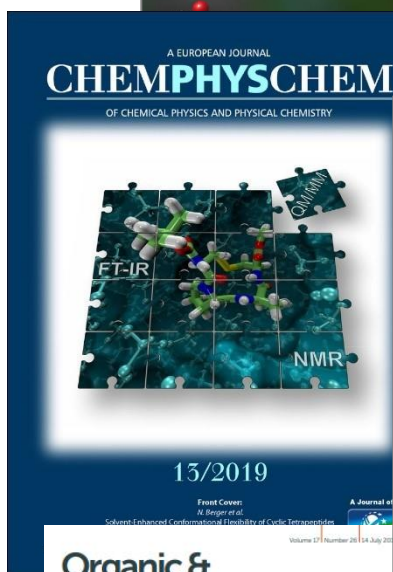
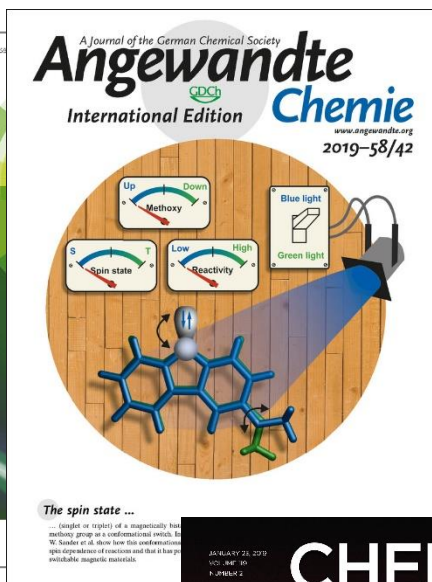


Table of Contents

Vorwort des <i>Faculty Report Teams 2019</i>	3
Preface of the <i>Faculty Report Team 2019</i>	4
Vorwort des Dekans / Preface of the Dean	5
Dr. Felipe Conzuelo	6
Dr. Justus Masa	7
Prof. Dr. Nicolas Plumeré	8
Dr. Adrian Ruff	9
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann	10
Prof. Dr. Kristina Tschulik	11
Prof. Dr. Michael Hollmann.....	12
Prof. Dr. Irmgard D. Dietzel-Meyer.....	13
Prof. Dr. Thomas Günther-Pomorski	14
Prof. Dr. Rolf Heumann	15
PD. Dr. Thorsten Müller	16
Prof. Dr. Katrin Sommer	18
Prof. Dr. Enrica Bordignon	19
Prof. Dr. Martin Muhler	20
Prof. Dr. Ulf-Peter Apfel.....	21
Prof. Dr. Lars Borchardt.....	22
Dr. Klaus Merz.....	23
Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte	24
Prof. Dr. Viktoria Däschlein-Gessner	25
Prof. Dr. Anjana Devi	26
Prof. Dr. Rochus Schmid.....	27
Prof. Dr. Lukas J. Gooßen.....	28
Prof. Dr. Stefan M. Huber	29
Prof. Dr. Frank Schulz.....	30
Prof. Dr. Gerald Dyker	31
Dr. Christian Merten	32
Prof. Dr. Wolfram Sander	33
Prof. Dr. Christian Herrmann	34
Prof. Dr. Karina Morgenstern	35
Prof. Dr. Martina Havenith	36
Prof. Dr. Poul Petersen.....	37
Prof. Dr. Robert Franke.....	38
Prof. Dr. Christof Hättig.....	39
Prof. Dr. Dominik Marx	40
Dr. Michael Römelt.....	41

Prof. Dr. Lars Schäfer	42
Prof. Dr. Volker Staemmler	43
List of Publications 2019.....	44
Analytical Chemistry I	44
Analytical Chemistry II.....	47
Biochemistry I.....	47
Biochemistry II.....	47
Didactics of Chemistry	49
EPR Spectroscopy	49
Industrial Chemistry	49
Inorganic Chemistry I.....	50
Inorganic Chemistry II	52
Organic Chemistry I.....	54
Organic Chemistry II.....	55
Physical Chemistry I	56
Physical Chemistry II.....	56
Theoretical Chemistry	57

Vorwort des *Faculty Report Teams 2019*

Liebe Leserinnen und Leser,

da das Jahr 2020 bereits in vollem Gange ist, lohnt es sich auf das Wissenschaftsjahr 2019 an der XVIII. Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum zurückzublicken. Unseren Gruppenleitern ist es im Jahr 2019 wieder gelungen, beachtliche Erkenntnisse in ihren spezifischen Fachbereichen zu erzielen und die Ruhr-Universität Bochum beeindruckend zu repräsentieren sowie zum hohen Standard unserer Forschungseinrichtung beizutragen.

Wie auch in den vergangenen Jahren bietet der *Faculty Report* den Lehrstühlen und Arbeitsgruppen unserer Fakultät eine Möglichkeit, um ihre bemerkenswerteste Publikation hervorzuheben. Des Weiteren sind alle unter dem Dach der Fakultät erschienen Publikationen aus 2019 in diesem Bericht aufgeführt. Diese Informationen wurden von den Chemie-Masterstudenten des *Faculty Report Teams 2019* in Zusammenarbeit mit den Gruppenleitern erstellt, 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 angegebenen Kontaktdaten zu erreichen.

Wir hoffen, dass Ihnen das Studium unseres *Faculty Reports* einen interessanten und erfreulichen Rückblick auf das Forschungsjahr 2019 liefert!

Mit besten Wünschen für ein erfolgreiches Jahr 2020 und bleiben Sie gesund,

Ihr *Faculty Report Team 2019*

Miriam Sander
Simon Vortmann
Frederike Beyer
Jannik Böttger
Sercan Akbaba
Max Surke
Mena Beshay

Preface of the *Faculty Report Team 2019*

Dear Readers,

Since the year 2020 is already in full swing, it is well worth looking back at the scientific work of the year 2019 at the XVIII. Faculty of Chemistry and Biochemistry of the Ruhr-University Bochum. In 2019, our group leaders have once again succeeded in achieving remarkable results in their specific fields of study and impressively representing the Ruhr-University Bochum as well as contributing to the high standard of our research institution.

As in recent years, the *Faculty Report* offers the chairs and working groups of our faculty an opportunity to highlight their most noteworthy publication. Furthermore, all publications of the faculty published in 2019 are listed in this report. This information was collected by chemistry master students of the *Faculty Report Team 2019* in cooperation with the group leaders, to whom we would like to sincerely express our gratitude. If there is interest in supplementary information for the displayed research topics, you are welcome to contact the groups personally using the provided contact data.

We hope that studying our *Faculty Report* will give you an informative and enjoyable review of the research year 2019!

With best wishes for a successful year 2020 and stay healthy,

Your *Faculty Report Team 2019*

Miriam Sander
Simon Vortmann
Frederike Beyer
Jannik Böttger
Sercan Akbaba
Max Surke
Mena Beshay

Vorwort des Dekans / Preface of the Dean

Sehr geehrte Leserinnen, sehr geehrte Leser,
Liebe Kolleginnen, liebe Kollegen,

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 2019 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.

Viel Freude bei der Lektüre des Forschungsberichts!

Thomas Günther-Pomorski

Dear readers,
Dear colleagues,

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 2019. 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 who assembled this report during their course work of "Introduction to the scientific community (ITSC)".

We hope you enjoy reading this research report!

Thomas Günther-Pomorski

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

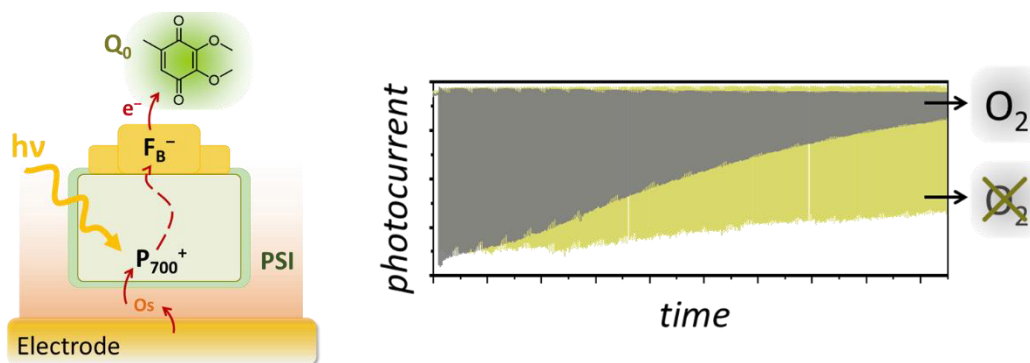
Email: felipe.conzuelo@ruhr-uni-bochum.de;

<https://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/Felipe/Felipe-Conzuelo>

F. Zhao, A. Ruff, M. Rögner, W. Schuhmann, F. Conzuelo, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 5102.

Extended operational lifetime of a photosystem-based bioelectrode

Although proteins such as photosystem I (PSI) are robust in nature, the use of isolated protein complexes for the fabrication of semi-artificial electrodes is usually associated with a substantially shorter long-term stability. In consequence, the possible technological application of this kind of biodevices is compromised. As we show, rational operation of the bioelectrode under the exclusion of O_2 prevents the deleterious effects of reactive oxygen species that are responsible for the limited lifetime of the biodevice. This has proven to be the key for achieving an effective increase of the device's lifetime for a substantial period of time in comparison with the performance obtained in the presence of ambient O_2 . The obtained results are an important step towards the efficient development and eventual application of photobiodevices for energy conversion.



Light-induced photocurrent generation with a photosystem I (PSI) biocathode is enabled by anisotropic electron flow within the assembly (left). While the presence of atmospheric O_2 leads to a relatively low long-term stability, the use of anaerobic conditions improves the operational lifetime of the bioelectrode significantly (right).

Obwohl Proteine wie das Photosystem I (PSI) von Natur aus robust sind, ist die Verwendung von isolierten Proteinkomplexen zur Herstellung von halbkünstlichen Elektroden in der Regel mit einer wesentlich kürzeren Langzeitstabilität verbunden. Dadurch wird die mögliche technologische Anwendung beeinträchtigt. Wie wir zeigen, verhindert der Betrieb der Bioelektrode unter Ausschluss von O_2 die schädlichen Auswirkungen reaktiver Sauerstoffspezies, die für die begrenzte Lebensdauer der photosynthetischen Proteinkomplexe verantwortlich sind. Dies hat sich als der Schlüssel für eine effektive Verlängerung der Lebensdauer im Vergleich zu den Ergebnissen, die in Gegenwart von O_2 in der Umgebung erzielt werden, erwiesen. Die vorgestellten Ergebnisse sind ein wichtiger Schritt zur effizienten Entwicklung und schließlich zur Anwendung von photosyntheseanalogen Energiekonversionssystemen.

Dr. Justus Masa

Chair of Analytical Chemistry and Center for Electrochemical Sciences (CES)

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

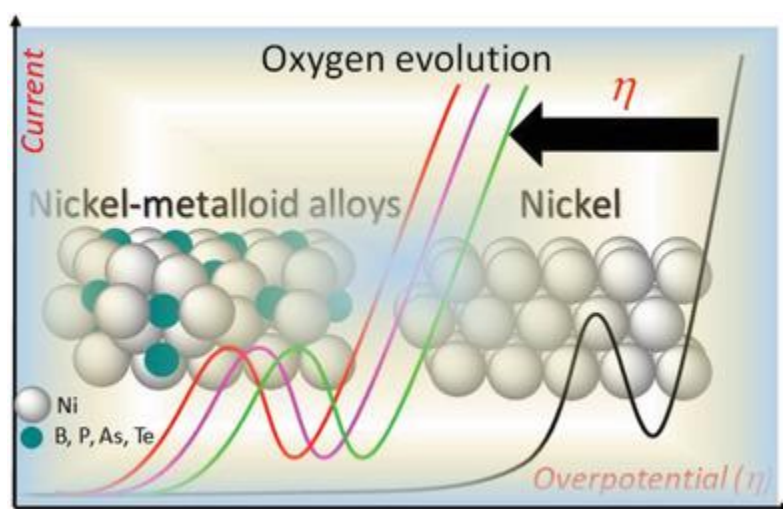
Tel.: ++49-(0)234-123456; Fax.: ++49-(0)234-123456

Email: Justus.masa@rub.de; <https://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/Justus-Masa.html>

J. Masa, S. Piontek, P. Wilde, H. Antoni, T. Eckhard, Y.-T. Chen, M. Muhler, A.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Advanced Energy Materials* **2019**, 9, 1900796.

Ni-Metalloid (B, Si, P, As, and Te) Alloys as Water Oxidation Electrocatalysts

In this work, we showed that alloying nickel with metalloid elements including B, P, As and Te creates catalysts with significantly higher activity for the oxygen evolution reaction (OER) in the alkaline electrolyte when compared with pure nickel. The properties of the materials were thoroughly investigated and the possible origin of activity enhanced was discussed.



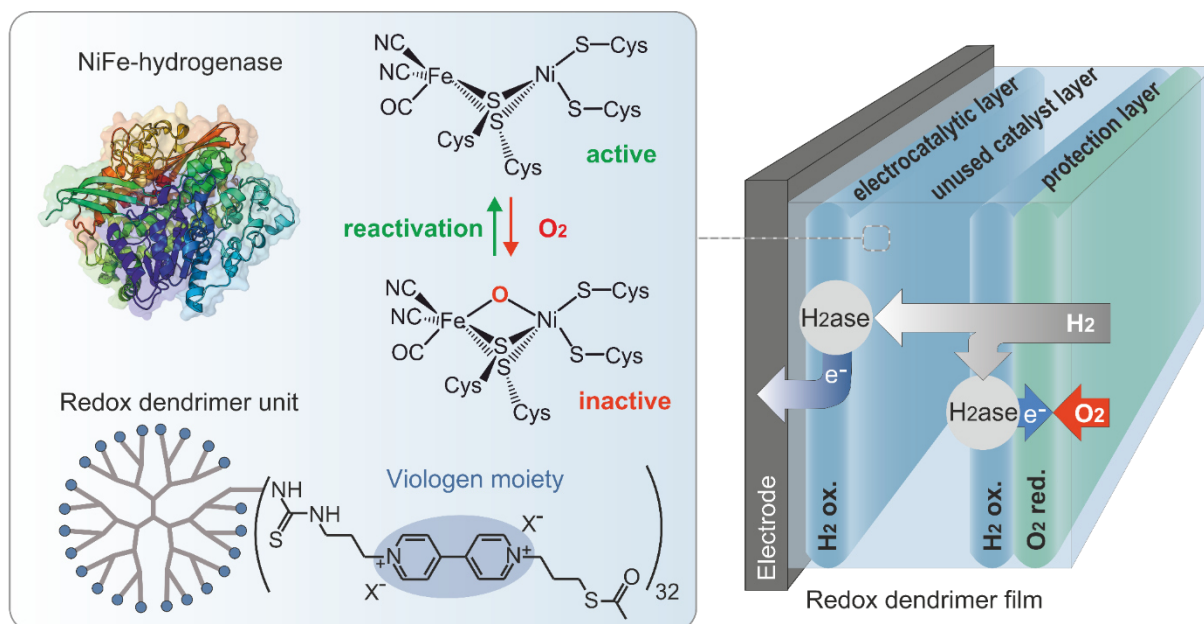
The alloying of Nickel (Ni) with the metalloid elements (B, P, As, Te) leads to a significant reduction of the overpotential in electrocatalytic water oxidation.

In dieser Arbeit haben wir gezeigt, dass das Legieren von Nickel mit metalloiden Elementen wie B, P, AS und Te Katalysatoren mit einer im Vergleich zu reinem Nickel signifikant höheren Aktivität für die Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) in alkalischem Elektrolyten erzeugt. Die Eigenschaften der Materialien wurden gründlich untersucht und der mögliche Ursprung der verstärkten Aktivität diskutiert.

H. Li, D. Buesen, S. Dementin, C. Léger, V. Fourmond, N. Plumeré, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 16734-16742.

Complete Protection of O₂-Sensitive Catalysts in Thin Films

Energy conversion schemes involving dihydrogen hold great potential for meeting sustainable energy needs, but widespread implementation cannot proceed without solutions that mitigate the cost of rare metal catalysts and the O₂ instability of biological and bioinspired replacements. Recently, thick films (>100 μm) of redox polymers were shown to prevent O₂ catalyst damage but also resulted in unnecessary catalyst load and mass transport limitations. Here we apply novel homogeneous thin films (down to 3 μm) that protect from O₂ while achieving highly efficient catalyst utilization. Our empirical data are explained by modeling, demonstrating that resistance to O₂ inactivation can be obtained for non-limiting periods when the optimal thickness for catalyst utilization and the generation of current is achieved, even when using highly fragile catalysts such as the enzyme hydrogenase. We show that different protection mechanisms operate depending on the matrix dimensions and the intrinsic catalyst properties and can be integrated synergistically to achieve stable H₂ oxidation currents in the presence of O₂, potentially enabling a plethora of practical applications for bioinspired catalysts under harsh oxidative conditions.



Redox films as protection matrices for hydrogenases. *Left:* Structure of the NiFe Hydrogenase active site used as a model of O₂-sensitive catalyst, showing its deactivation/reactivation in the presence of O₂. Schematic representation of viologen-modified dendrimers used as building blocks for the assembly of the redox matrix. *Right:* Scheme of the redox matrix homogeneously constituted of hydrogenase molecules and viologen-modified dendrimers. Under turnover for H₂ oxidation in the presence of O₂, several reaction layers formed within the matrix. The first layer of H₂ oxidation reaction (H₂ ox.) in the vicinity of the electrode produces electrons used for the generation of current (electrocatalytic layer). A second H₂ ox. layer associated with a layer of O₂ reduction reaction (O₂ red.) near the film/electrolyte interface reduces the incoming O₂ (protection layer).

Dr. Adrian Ruff

Chair of Analytical Chemistry – Center for Electrochemical Sciences

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

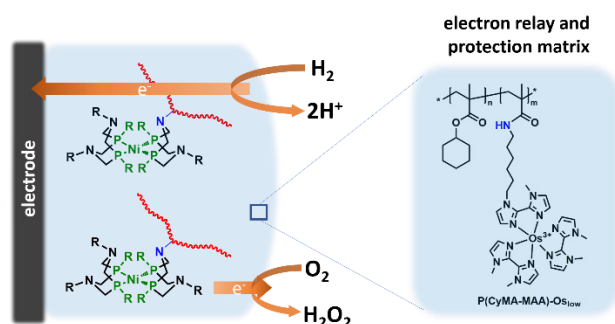
Tel.: ++49-(0)234-32-24208

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

Adrian Ruff*, Salome Janke, Julian Szczesny, Sabine Alsaoub, Ines Ruff, Wolfgang Lubitz, and Wolfgang Schuhmann*, *ACS Appl. Energy Mater.* **2019**, 2, 2921-2929.

Polymer-Bound DuBois-Type Molecular H₂ Oxidation Ni Catalysts Are Protected by Redox Polymer Matrices

Hydrogen powered fuel cells are promising alternatives for future energy technologies capable of overcoming problems arising from the use of fossil fuels. However, the active materials fuel cells are usually based on scarce and costly noble metals like platinum or iridium. Hydrogenase are redox proteins that can catalyze H₂ oxidation - the anodic reaction in a H₂ powered fuel cell - with activities similar to those observed for platinum. Their active centers are solely based on abundant materials like Ni and/or Fe. However, their limited large-scale accessibility and sensitivity towards O₂ hampers the use in technical applications. DuBois type Ni-complexes modeled after the active centers of the hydrogenases can be synthesized in high yields in a synthetic process with activities similar to those of their biological archetypes. Still, their O₂ sensitivity limits their application. In this contribution, we show that by incorporation of the active Ni-catalyst into low potential redox polymers that are capable to reduce incoming O₂, the sensitive complexes can be protected from O₂ damage while retaining their high activity towards H₂ oxidation.



Protection of a DuBois-Type Catalyst from O₂ via the Immobilization in a Redox Polymer for Stable High-Performance H₂ Oxidation Anodes.

Wasserstoff betriebene Brennstoffzellen stellen eine vielversprechende Alternative für zukünftige Energiesysteme dar, die in der Lage sind die bei der Verwendung von fossilen Brennstoffen auftretend Probleme zu umgehen. Jedoch bestehen die aktiven Materialien in diesen Systemen typischerweise aus kostspieligen und seltenen Edelmetallen (Pt oder Ir). Hydrogenasen sind Redoxproteine, die die H₂ Oxidation – die anodische Reaktion in einer Brennstoffzelle – katalysieren und das bei vergleichbaren Umsatzraten, wie sie für Pt beobachtet werden. Die aktiven Zentren dieser Biokatalysatoren bestehen aus den häufig vorkommenden Metallen Ni und/oder Fe. Ihre limitieren Verfügbarkeit und Empfindlichkeit gegenüber Sauerstoff erschwert jedoch einen Einsatz in technischen Anwendungen. DuBois Ni-Komplexe, die den aktiven Zentren der Hydrogenasen nachempfunden sind, können in großen Mengen hergestellt werden und zeigen zu den Hydrogenasen vergleichbare Aktivitäten. Jedoch sind auch diese aktiven Materialien sauerstoffempfindlich. In diesem Beitrag zeigen wir, dass durch die Einbettung dieser Ni-Komplexe in Niedrigpotentialpolymere, die in der Lage sind, O₂ zu reduzieren, der Katalysator effektiv gegen O₂ geschützt werden kann.

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann

Analytical Chemistry – Center of Electrochemical Sciences (CES)

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-322600; Fax.: ++49-(0)234-3214683

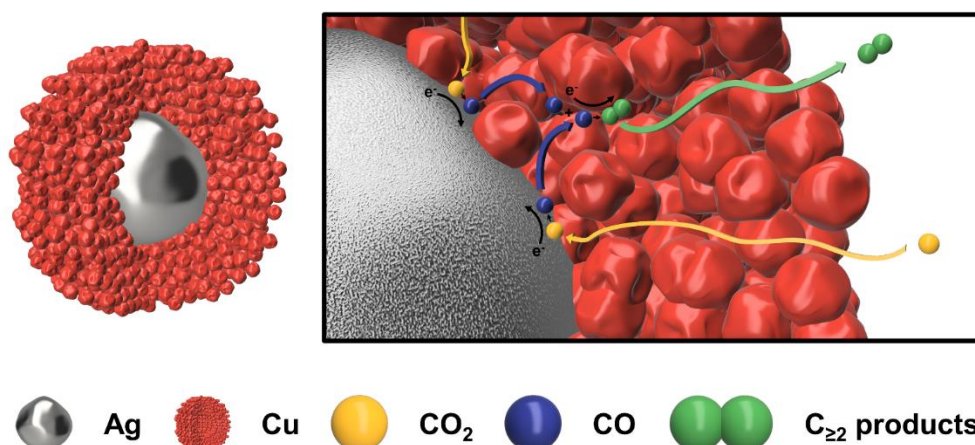
Email: wolfgang.schuhmann@rub.de; <https://www.ruhr-uni-bochum.de/elan>

P. B. O'Mara, P. Wilde, T. M. Benedetti, C. Andronesco, S. Cheong, J. J. Gooding, R. D. Tilley, W. Schuhmann, *Journal of the American Chemical Society*, **2019**, *141*, 14093-14097.

Cascade Reactions in Nanozymes: Spatial Confinement in Ag-Cu Bimetallic Nanoparticles for Carbon Dioxide Reduction.

The structure of enzymes is essential to their unprecedented selectivity and activity: an active site located at the end of a substrate channel gives control over the local solution environment. Their architecture allows enzymes to facilitate cascade reactions via substrate channelling of intermediates from one highly specific and catalytically active centre to another without diffusion into the bulk of the solution.

We now mimic this attractive structural feature in a bimetallic electrocatalytic nanoparticle, a so called nanozyme comprising an Ag core and a porous Cu shell. Electrocatalytic CO₂ reduction was chosen as a suitable model reaction to demonstrate the approach's viability. A cascade reaction mechanism is described, where CO₂ is initially reduced to CO at the Ag core, which creates a high local concentration of spatially confined CO that is further reduced to C₃-products on the Cu active sites of the channel walls. The specifically designed nanozymes facilitate the production of n-propanol at potentials as low as -0.6 V vs. RHE.



Cascade reaction mechanism on a Ag-Cu nanozyme for CO₂RR.

Die Struktur von Enzymen ist für ihre beispiellose Selektivität und Aktivität von entscheidender Bedeutung: Ein aktives Zentrum am Ende eines Substratkanals gibt die Kontrolle über die lokale Lösungsumgebung. Ihre Architektur ermöglicht es Enzymen, Kaskadenreaktionen durch Substratkanalisierung von Zwischenprodukten von einem hochspezifischen und katalytisch aktiven Zentrum zu einem anderen zu erleichtern, ohne dass diese zuvor in die Bulklösung diffundieren.

Wir ahmen dieses attraktive Strukturmerkmal nun in einem bimetallicen elektrokatalytischen Nanopartikel nach, einem so genannten Nanozym, das aus einem Ag-Kern und einer porösen Cu-Hülle besteht. Die elektrokatalytische CO₂ Reduktion wurde als geeignete Modellreaktion gewählt, um die Realisierbarkeit des Ansatzes zu demonstrieren. Es wird ein Kaskadenreaktionsmechanismus beschrieben, bei dem CO₂ zunächst am Ag-Kern zu CO reduziert wird, wodurch eine hohe lokale Konzentration von räumlich gebundenem CO entsteht, das an den Cu-aktiven Stellen der Kanalwände weiter zu C₃-Produkten reduziert wird. Die speziell entwickelten Nanozyme ermöglichen die Produktion von n-Propanol bei Potentialen von nur -0,6 V gegenüber RHE.

A. El Arrassi, Z. Liu, M. V. Evers, N. Blanc, G. Bendt, S. Saddeler, D. Tetzlaff, D. Pohl, C. Damm, S. Schulz, K. Tschulik, *Journal of the American Chemical Society* **2019**, *141*, 9197.

Intrinsic Activity of Oxygen Evolution Catalysts Probed at Single CoFe_2O_4 Nanoparticles

The identification of the intrinsic electrocatalytic properties of nano-electrocatalysts is challenging, since a mixture of the catalyst, a binder and further additives is usually employed. In this work, we use nano impact electrochemistry as an additive-free method to characterize single nanoparticles and overcome this problem. High-resolution bright-field transmission electron microscopy and selected area diffraction studies of the catalyst particles before and after the experiments provide additional insights in the transformation of the nanomaterials during harsh oxygen evolution reaction (OER) conditions. We demonstrate this for 4 nm sized CoFe_2O_4 spinel nanoparticles. It is revealed that these particles retain their size and crystal structure even after OER at current densities as high as several $\text{kA}\cdot\text{m}^{-2}$. The steady-state current scales with the particle size distribution and is limited by the diffusion of produced oxygen away from the particle.

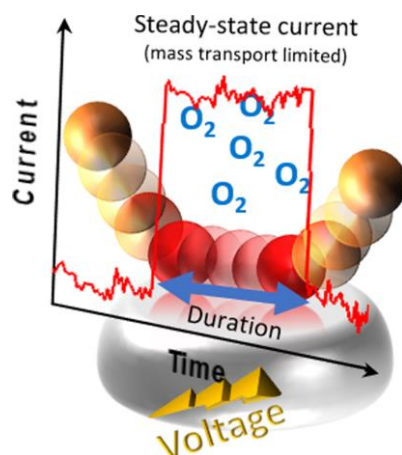
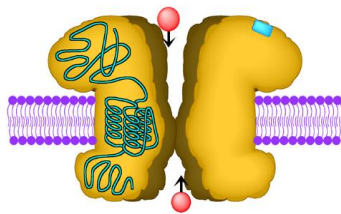


Figure 1. Nanoparticle OER impact illustration with steady-state current and duration.

Die Bestimmung der intrinsischen elektrokatalytischen Aktivität von Nanokatalysatoren ist äußerst schwierig, da zum Fixieren der Partikel auf eine Elektrode üblicherweise Binder und weitere Additive genutzt werden, die eine Analyse erschweren. In dieser Arbeit wird die „Nano-Impact“ Elektrochemie als eine additivfreie Methode zur Charakterisierung einzelner Partikel verwendet, um dieses Problem zu umgehen. Hochauflösende Hellfeld TEM- und SAED-Aufnahmen der Katalysatorpartikel vor und nach der Elektrokatalyse, gewähren Einsicht in die Transformation des Nanomaterials unter den harschen Bedingungen während der elektrochemischen Sauerstoffentwicklung. Wir zeigen, dass 4 nm große CoFe_2O_4 Spinell-Nanopartikel ihre Größe und Kristallstruktur selbst bei Stromdichten von mehreren $\text{kA}\cdot\text{m}^{-2}$ beibehalten. Der massentransportbedingte Gleichgewichtsstrom ist dabei durch die Diffusion des gebildeten Sauerstoffs in die Elektrolytlösung limitiert und ist proportional zur Größenverteilung der Partikel.



Prof. Dr. Michael Hollmann

Chair of 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

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1>

J.A. Schreiber, D. Schepmann, B. Frehland, S. Thum, M. Datunashvili, T. Budde, M. Hollmann, N. Strutz-Seebohm, B. Wünsch, and G. Seebohm, *Commun Biol* **2019**, 2, 420.

NMDA receptors of the glutamate receptor family underlie learning and memory formation in vertebrates and are associated with a number of neurodegenerative diseases. Therefore, specific inhibitors of the various heteromeric subunit combinations that constitute functionally divergent isoforms of these receptors are much sought after. Specifically, inhibitors of the variants formed with the glutamate-binding subunits GluN2A through GluN2D are of clinical interest. Ifenprodil has long been recognized as a GluN2B subtype-selective inhibitor, but unfortunately also interacts with serotonergic and adrenergic receptors, thus limiting its clinical usefulness. In this study the backbone of ifenprodil was successfully modified in an attempt to reduce such crossreactivities while retaining high affinity for GluN2B-containing NMDA receptors. Additionally, the binding pocket of ifenprodil as well as its inhibitory mechanism were characterized by *in silico* simulations.

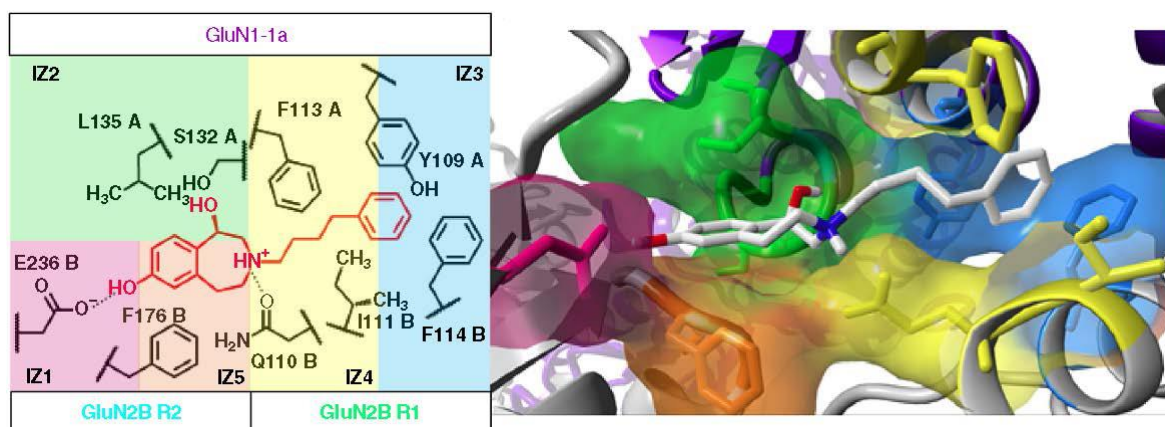


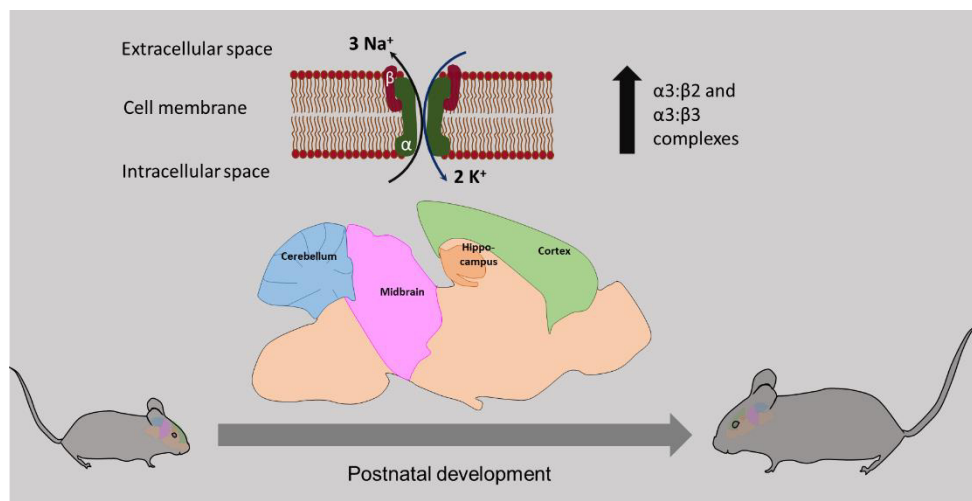
Figure 1: Ifenprodil docking to the GluN1-1a/GluN2B NMDA receptor subtype. Schematic view (left) and graphical view (right) of interactions in the 5 colored defined interaction zones.

Die NMDA-Rezeptoren aus der Glutamaterezeptorfamilie sind unerlässlich für Lernen und Gedächtnisbildung bei Vertebraten, und sind darüber hinaus mit einer Vielzahl von neurodegenerativen Erkrankungen assoziiert. Aus diesem Grund sind spezifische Inhibitoren für die verschiedenen heteromeren Untereinheitenkombinationen, die funktionell distinkte Isoformen darstellen, sehr gesucht. Insbesondere Inhibitoren für die Varianten, die eine der vier glutamatbindenden Untereinheiten GluN2A bis GluN2D enthalten, sind von großem klinischen Interesse. Ifenprodil ist seit langem als selektiver Inhibitor des GluN2B-Subtyps bekannt, hat aber unglücklicherweise Nebenwirkungen auf adrenerge und serotonerge Rezeptoren, was seine klinische Anwendbarkeit sehr einschränkt. In dieser Studie wurde nun das Rückgrat des Ifenprodil-Moleküls systematisch modifiziert mit dem Ziel, die Kreuzreaktivitäten zu beseitigen bei gleichzeitigem Erhalt der GluN2B-Untereinheitenselektivität. Zusätzlich wurde die Bindungstasche von Ifenprodil sowie der inhibitorische Mechanismus der Ifenprodilbindung durch *in silico*-Simulationen charakterisiert.

S.M. Sundaram, D. Safina, A. Ehrkamp, A. Faissner, R. Heumann, I.D. Dietzel,
Neurochem. Int. **2019**, 128, 163.

Differential expression patterns of sodium potassium ATPase alpha and beta subunit isoforms in mouse brain during postnatal development

The membrane spanning sodium potassium ATPase (Na^+/K^+ ATPase) maintains the cellular Na^+ concentration low by transporting 3 Na^+ out and 2 K^+ into the cells. It is composed of one catalytic alpha subunit and a glycosylated beta subunit. So far, three alpha ($\alpha 1$, $\alpha 2$, $\alpha 3$) and three beta isoforms ($\beta 1$, $\beta 2$, $\beta 3$) have been identified in the brain. Na^+/K^+ ATPase deficiency causes an abnormal neuronal depolarization and certain mutations may lead to Rapid-onset Dystonia Parkinsonism. To better understand the regulation of the Na^+/K^+ ATPases we studied the developmental expression patterns of both α and β subunits in different mouse brain regions. We observed an increase of all isoforms in a cell type and region-specific manner. Our results indicate an increase in $\alpha 3/\beta 2$ and $\alpha 3/\beta 3$ Na^+/K^+ ATPase complexes in a parallel with the increased neuronal network activity during brain maturation.



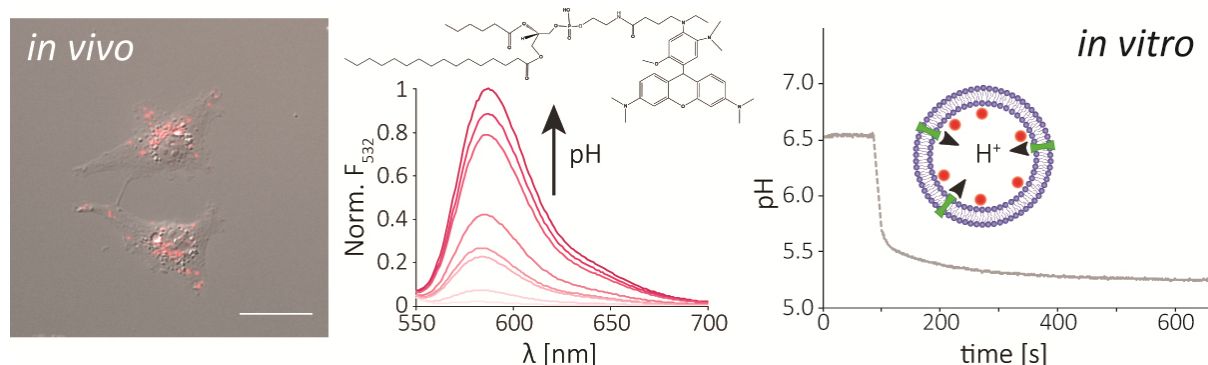
Schematic drawing showing increased amount of Na^+/K^+ ATPase $\alpha 3/\beta 2$ and $\alpha 3/\beta 3$ complexes normalized to the cytoskeletal protein β -tubulin. The increased density of Na^+/K^+ ATPases parallels neuronal network maturation during mouse brain development.

Die membranspannende Na^+/K^+ ATPase ist für die Aufrechterhaltung einer konstanten intrazellulären Na^+ -Konzentration verantwortlich. Sie setzt sich aus einer katalytischen α -Untereinheit sowie einer glykosylierten β -Untereinheit zusammen. Bisher sind drei alpha ($\alpha 1$, $\alpha 2$, $\alpha 3$) und drei beta Isoformen ($\beta 1$, $\beta 2$, $\beta 3$) im Gehirn bekannt. Ein partieller Funktionsverlust der Na^+/K^+ ATPase führt zu einer Abnahme des Ruhemembranpotenzials; bestimmte Mutationen können eine spezielle Form parkinsonartiger Bewegungsstörungen auslösen. Um die Regulation der Expression der Na^+/K^+ ATPase besser zu verstehen, untersuchten wir die Expression der unterschiedlichen α - und β - Untereinheiten in verschiedenen Regionen des Mäusegehirns. Wir beobachteten einen Anstieg der Expression aller Isoformen der Na^+/K^+ ATPase während der postnatalen Entwicklung in zelltyp- und regionenspezifischer Weise. Unsere Ergebnisse zeigen eine Zunahme der $\alpha 3/\beta 2$ und $\alpha 3/\beta 3$ Komplexe parallel zur Ausreifung neuronaler Netzwerke.

R.M. Kühnel, M.G. Junyent, I.L. Jørgensen, G.C. Kemmer, J. Schiller, M.B. Palmgren, B.H. Justesen, T. Günther-Pomorski, *Analyst* **2019**, *144*, 3030-3037.

Short-chain lipid-conjugated pH sensors for imaging of transporter activities in reconstituted systems and living cells

Proton concentration gradients across cellular membranes play a pivotal role in biological microcompartments by providing the driving force for essential processes like the uptake of nutrients or the generation of energy. These gradients can be monitored with the help of fluorescent proton nanosensors, which are localized to membranes through lipid-conjugation. The major features of these novel probes are strong fluorescence intensity under acidic conditions, efficient partitioning into membranes, and extractability by back exchange to albumin. We improved the synthesis of such a lipid-conjugated pH sensor, analyzed its photophysical properties and applied it to the visualization of pH gradients in reconstituted systems and living cells. Our results demonstrate the applicability of lipid-conjugated sensors for *in vivo* and *in vitro* studies and pave the way for the design of other lipid-conjugated fluorescent ion sensors, e.g. calcium and sodium sensors.



Short-chain lipid-conjugated pH sensors allow for the visualization of pH gradients through changes in their fluorescence emission. These sensors can be used for monitoring pH changes in living cells and selective labelling of the inner liposomal leaflet in reconstituted membrane systems.

Protonengradienten über zelluläre Membranen spielen eine wichtige Rolle in biologischen Mikrokompartmenten, da sie die treibende Kraft für essenzielle Vorgänge wie die Nährstoffaufnahme oder den Energiegewinn spielen. Diese Gradienten können visualisiert werden mit Hilfe von fluoreszenten Protonen-Nanosensoren, welche durch Lipid-Konjugierung an der Membran verankert sind. Die wesentlichen Besonderheiten dieser neuen Sonden sind ihre hohe Fluoreszenz-Intensität unter sauren Bedingungen, effiziente Einbettung in Membranen und Extrahierbarkeit durch die Rückgewinnung mittels Albumin. Wir haben die Synthesebedingungen für einen solchen lipid-gebundenen pH Sensor verbessert, die photophysikalischen Eigenschaften analysiert und die Anwendung für die Visualisierung von pH Gradienten in rekonstituierten Systemen und lebenden Zellen getestet. Unsere Ergebnisse demonstrieren die Anwendbarkeit von lipid-gebundenen Sensoren für *in vivo* und *in vitro* Experimenten und ebnen den Weg für die Entwicklung weiterer Lipid-gebundener fluoreszenter Ionen Sensoren, wie z.B. Calcium- oder Natrium-Sensoren.

Prof. Dr. Rolf Heumann

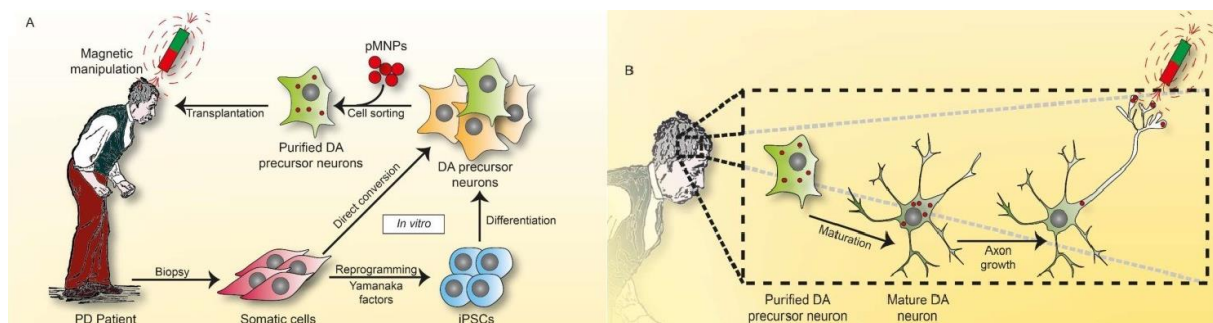
Biochemistry II – Molecular Neurobiochemistry
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3228230; Fax.: ++49-(0)234-3214105
Email: rolf.heumann@rub.de;

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

H. Schöneborn, F. Raudzus, E. Secret, N. Otten, A. Michel, J. Fresnais, C. Ménager, J. M. Siaugue, H. Zaehres, I. D. Dietzel, R. Heumann, *J Funct Biomater.* **2019**, 10, 32.

Novel Tools towards Magnetic Guidance of Neurite Growth: (I) Guidance of Magnetic Nanoparticles into Neurite Extensions of Induced Human Neurons and In Vitro Functionalization with RAS Regulating Proteins

Parkinson's disease is characterized by a slow and progressive degeneration of dopaminergic neurons causing the characteristic motor symptoms and cure is not available. As the available long-term pharmacological treatment with L-DOPA is associated with dyskinesia, other targets of research are needed to prolong the patients' quality of life. An emerging approach for treatment of Parkinson's disease is the replacement of lost dopaminergic neurons (part A of the figure). Unfortunately, neurons grafted into the degenerating brain region are unable to re-grow long distance projections into the disconnected brain regions. In order to overcome these problems, we show that magnetic nanoparticles are coated with Ras- regulating proteins promoting signals for neurite growth. Nanoparticles were micro-injected into the cytoplasm of human neurons generated in our laboratory. The induced dopaminergic neurons were characterized by immune-histochemical staining and by electrophysiological patch-clamp recordings of action potentials. We show magnetic translocation of cytoplasmic nanoparticles into the tip of growing neuronal projections (part B of figure). With these results we aim to contribute to concepts of remote control of neuronal network recovery in Parkinson's disease.



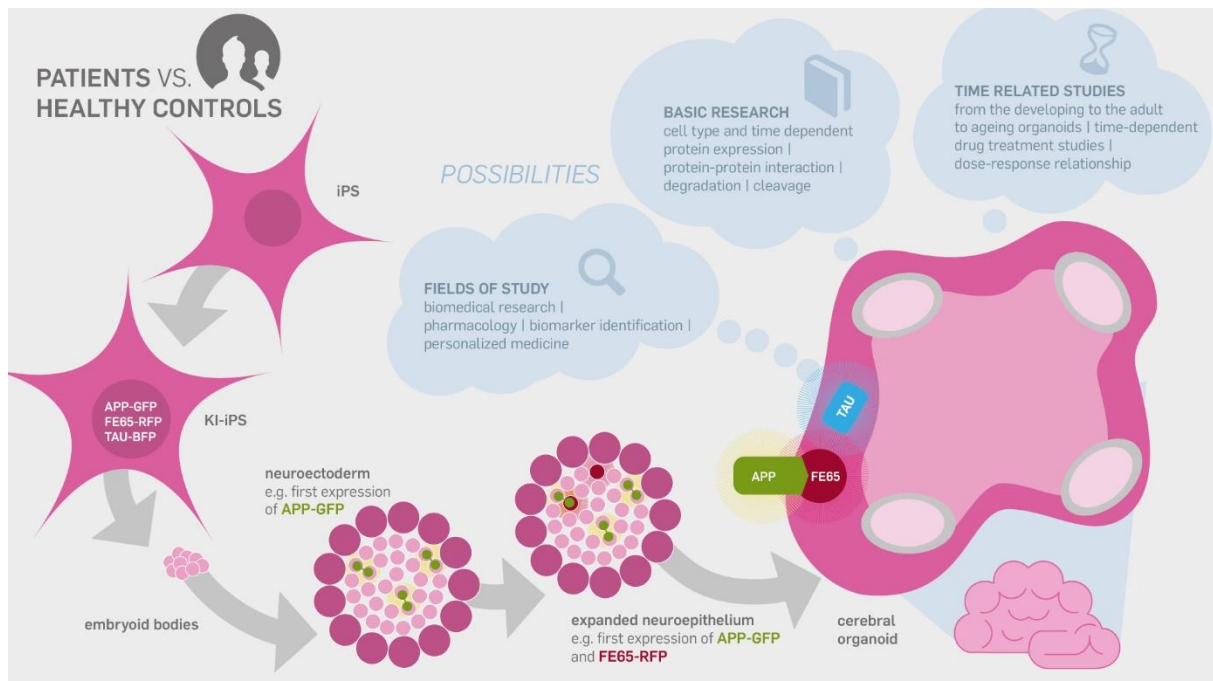
Approaches for the treatment of Parkinson's disease. A) Replacement of lost dopaminergic neurons as an approach for treatment of Parkinson's disease (source: doi: 10.3390/ijms19124052). B) Magnetic translocation of cytoplasmic nanoparticles into the tip of growing neuronal projections.

Parkinson ist eine unheilbare Erkrankung des Gehirns, die durch langsam fortschreitendes Absterben von dopaminergen Nervenzellen verursacht wird. Die derzeit angewendete L-DOPA Behandlung verursacht langfristig Dyskinesie. Hier beschreiben wir die Kopplung magnetischer Nanopartikel mit Ras-regulierenden Proteinen, die das Signal zum Wachstum von Nervenzellen aktivieren. Die hier aus humanen Stammzellen erzeugten dopaminergen Nervenzellen wurden immunhistochemisch und elektrophysiologisch durch Aktionspotentiale charakterisiert. Injizierte cytoplasmatische Nanopartikel wurden durch externe Magnete in die Spitze eines wachsenden Nervenfortsatzes gelenkt (Bild B). Unsere Ergebnisse zielen darauf ab, die bei Parkinson verlorengegangenen Nervenverbindungen nach Zellersatztherapie durch magnetische Steuerung der regenerierenden Nervenfasern wiederherzustellen (oberes Bild A).

H. Bukhari, T. Müller, *Trends Cell Biol* **2019**, 29, 912.

Endogenous Fluorescence Tagging by CRISPR

Fluorescent proteins are used for protein tagging, e.g. to study their function and subcellular localization under live conditions. Current methods allow the integration of such markers to endogenous genes of interest by the use of CRISPR technology. Our 2019 review article introduces the reader to the method of gene editing and defines the cellular repair machineries, which are used to integrate markers. We highlight the unique aspects of fluorescent protein knock-ins and pinpoint specific improvements and perspectives, like the combination of gene editing with stem cell derived organoid development.

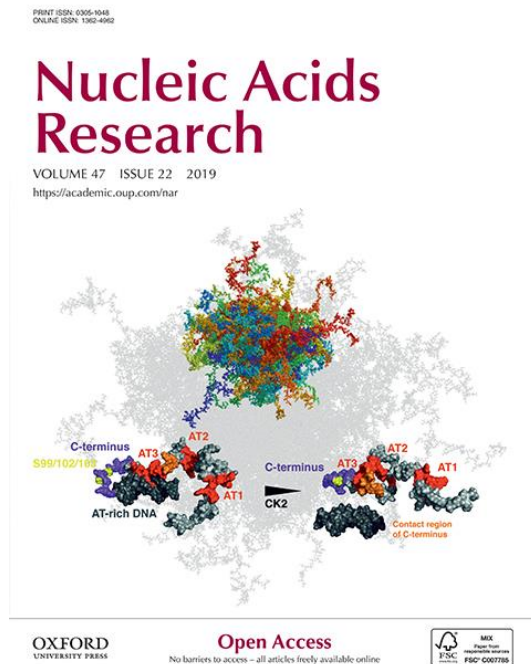


Gene editing is applied to iPSCs cells in order to label different proteins of interest (e.g., Amyloid Precursor Protein (APP, GFP, green), APP-binding protein FE65 (RFP, red), and microtubule-associated protein tau (BFP, blue)). Subsequently, embryonic bodies and organoids are generated to study protein function in detail by live imaging. Expression of the tagged proteins (e.g., beginning in the embryoid body) can lead to the characterization of subcellular localization, cleavage, and degradation of proteins. Upon further differentiation, cell-type-specific localization is detectable. Biomedical research and other studies can be performed, for example, to study effects of drug treatment on tagged proteins. Abbreviations: APP, amyloid precursor protein; iPSC, induced pluripotent stem cell.

Mittels fluoreszierender Proteine lassen sich “proteins of interest” markieren, um so deren Funktion in live zu untersuchen. Die Methode der CRISPR Gen-Editierung erlaubt es jetzt, auch endogen entsprechende Gene so zu verändern, dass Fusionsproteine ohne Überexpression untersucht werden können. In Verbindung mit der Stammzell-Technologie lassen sich so auch Gen-editierte Organoid generieren, also dreidimensionale Zellkulturmodelle, mit denen verschiedenste Proteinfunktionen analysiert werden können.

B. Kohl, X. Zhong, C. Herrmann, R. Stoll, *Nucleic Acids Research* **2019**, 47, 11906-11920.

Phosphorylation orchestrates the structural ensemble of the intrinsically disordered protein HMGA1a and modulates its DNA binding to the NFκB promoter



High Mobility Group Protein A1a (HMGA1a) is a highly abundant nuclear protein, which plays a crucial role during embryogenesis, cell differentiation, and neoplasia. Here, we present the first ever NMR-based structural ensemble of full length HMGA1a. Our results show that the protein is not completely random coil but adopts a compact structure consisting of transient long-range contacts, which is regulated by post-translational phosphorylation. The CK2-, cdc2- and cdc2/CK2-phosphorylated forms of HMGA1a each exhibit a different binding affinity towards the PRD2 element of the NFκB promoter. Our study identifies connected regions between phosphorylation sites in the wildtype ensemble that change considerably upon phosphorylation, indicating that these posttranslational modifications sites are part of an electrostatic contact network that alters the structural ensemble by shifting the conformational

equilibrium. Moreover, ITC data reveal that the CK2-phosphorylated HMGA1a exhibits a different DNA promoter binding affinity for the PRD2 element. Furthermore, we present the first structural model for AT-hook 1 of HMGA1a that can adopt a transient α -helical structure, which might serve as an additional regulatory mechanism in HMGA1a. Our findings will help to develop new therapeutic strategies against HMGA1a-associated cancers by taking posttranslational modifications into consideration.

Während die korrekte Funktion vieler Proteine von ihrer dreidimensionalen Struktur abhängt, scheinen einige zufällige Formen anzunehmen. Das Protein HMGA1a nimmt jedoch dynamische, kompaktere Strukturen an, die von seiner Phosphorylierung abhängen. Eine Fehlfunktion von HMGA1a kann zu Krebserkrankungen führen. Viele – aber nicht alle – Proteine in einer lebenden Zelle haben eine definierte dreidimensionale Struktur, die für ihre korrekte Aktivität absolut notwendig ist. Die wechselseitige Beziehung zwischen Struktur und Funktion von Proteinen steht im Fokus vieler Forschungsinitiativen, die bis zur Entwicklung neuartiger Medikamente reichen. Mindestens 30 Prozent aller Proteine in kernhaltigen Zellen sind jedoch teilweise oder sogar gänzlich unstrukturiert. Trotz oder gerade wegen dieser Besonderheit haben diese Proteine spezielle, teils entscheidende Funktionen sowohl bei gesunden als auch bei krankmachenden Prozessen. Dazu gehören zum Beispiel die Regulation des Zellzyklus, die Übertragung von biologischen Signalen, aber auch die Entwicklung von Krebs oder neurodegenerativer Krankheiten wie Alzheimer oder Parkinson. Eines dieser scheinbar ungeordneten Proteine ist das High Mobility Group Protein A1a (HMGA1a). Es ist in großer Stückzahl im Zellkern enthalten und wichtig für die Embryonalentwicklung, die Zelldifferenzierung, aber auch beteiligt an der Entstehung unkontrollierter Zellwucherungen, sogenannter Neoplasien.

Prof. Dr. Katrin Sommer

Chair of didactics of chemistry

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

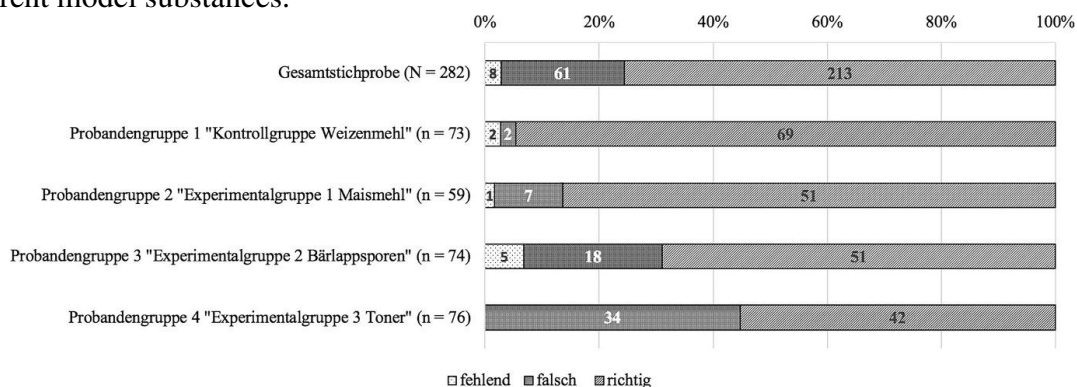
Tel.: ++49-(0)234-32-27522; Fax.: ++49-(0)234-32-14085

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

K. Sommer, C. Toschka, H. Steff, J. Wirth, *Zeitschrift für Didaktik der Naturwissenschaften* **2019**, 25, 259-272.

Oberflächenmerkmale von Modellsubstanzen und ihr Einfluss auf die Bildung von Analogien durch Lernende

Model experiments are used to illustrate scientific concepts as well as to conduct inquiries in the Chemistry classroom. The use of chemical substances is a core aspect of every model experiment. Original substances as well as different model substances can be used. However, it has so far not been investigated whether the use of different substances has an effect on students' learning from model experiments, for example on how they create analogies. This study investigates whether the degree of superficial similarities (e.g. colour) between the original and the model substance influences spontaneous recall and mapping. The study was conducted as a between-subject design including three experimental groups and one control group. The sample comprised $N=282$ high school students. Data collection included different validated questionnaires. The subject matter of the investigation was a flour dust explosion. Students' spontaneous recall and mapping (precisely for the category "flammable mixture") were more successful, when the degree of superficial similarities between original and model substance was higher. Therefore, it is suggested that a model substance with higher degrees of superficial similarities with the original substance should be chosen, if there is a choice between different model substances.



Deskriptive Ergebnisse zur Zuordnungsaufgabe.

Modellexperimente sind als Veranschaulichungsmedien und Medien zur Erkenntnisgewinnung ein fester Bestandteil des Chemieunterrichts. Herzstück des Modellexperiments ist die eingesetzte Substanz, welche die Umsetzung erst ermöglicht. Dabei kann entweder die Originalsubstanz oder eine Modellschubstanz zum Einsatz kommen. Es ist bislang ungeklärt, ob sich die Substanzen in ihren Effekten auf das Lernen, beispielsweise auf die Bildung von Analogien, unterscheiden. In dieser Studie wird untersucht, ob eine erhöhte Ähnlichkeit in den Oberflächenmerkmalen (z.B. Farbe) zwischen Originalsubstanz und Modellschubstanz den spontanen Abruf bzw. das Mapping begünstigen. Dazu werden schriftliche Befragungsinstrumente genutzt, die bei einer Interventionsstudie ($N=282$ Schülerinnen und Schüler) im between-subject design mit einer Kontrollgruppe und drei Experimentalgruppen zum Einsatz kommen. Thematisch erfolgt die Untersuchung am Beispiel der Mehlstaubexplosion. Es zeigt sich, dass sowohl der spontane Abruf als auch das Mapping (konkret für die Kategorie Brennbares Stoffgemisch) durch eine erhöhte Ähnlichkeit der Oberflächenmerkmale begünstigt werden. Stehen also verschiedene Modellschubstanzen zur Auswahl, sollte auch der Aspekt einer hohen Ähnlichkeit in Oberflächenmerkmalen zur Originalsubstanz berücksichtigt werden.

Prof. Dr. Enrica Bordignon

AG EPR Spektroskopie

Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum

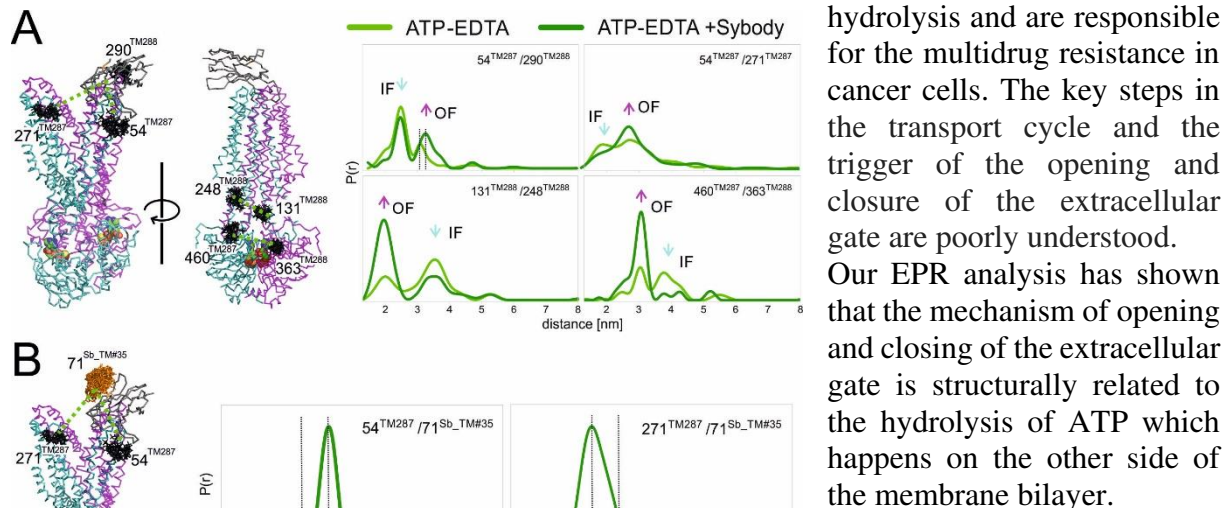
Tel.: ++49-(0)234-26239

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

C. A. J. Hutter, M. H. Timachi, L. M. Hürlimann, I. Zimmermann, P. Egloff, H. Göddeke, S. Kucher, S. Štefanić, M. Karttunen, L. V. Schäfer, E. Bordignon, M. A. Seeger, *Nature Communications* **2019**, *10*, 2260.

The extracellular gate shapes the energy profile of an ABC exporter

ABC transporters expel a variety of molecules across cell membranes, using the energy of ATP



Structure of the ABC exporter with the synthetic nanobody (sybody) bound to the extracellular region and the EPR spin probes attached. A) Changes in the conformational equilibrium of the transporter. B) Distances between the sybody and the transporter in the ATP state.

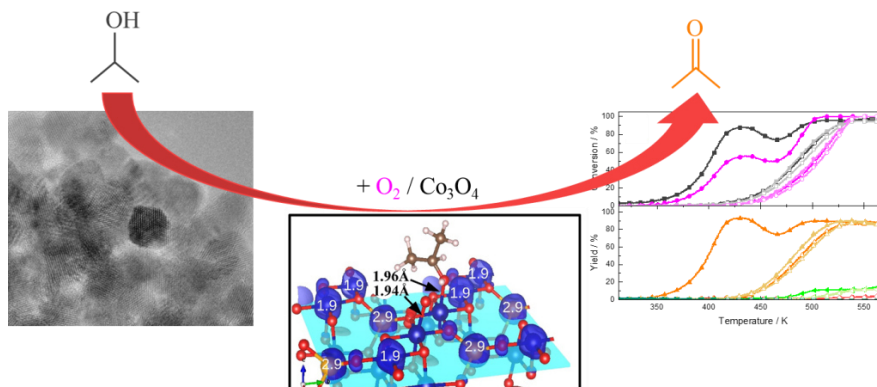
ABC Transporter stoßen eine Vielzahl von Molekülen über die Zellmembranen aus, wobei sie die Energie der ATP-Hydrolyse nutzen und sind für die Multidrug-Resistenz in Krebszellen verantwortlich. Die Schlüsselschritte im Transportzyklus und die Auslöser für das Öffnen und Schließen des extrazellulären Tors sind schlecht verstanden.

Unsere EPR Analysen haben gezeigt, dass der Mechanismus zum Öffnen und Schließen des extrazellulären Tors strukturell mit der Spaltung des Energielieferanten ATP auf der Innenseite zusammenhängt.

S. Anke, G. Bendt, I. Sinev, H. Hajiyani, H. Antoni, I. Zegkinoglou, H. Jeon, R. Pentcheva, B. Roldan Cuenya, S. Schulz, M. Muhler, *ACS Catalysis* **2019**, 9, 5974-5985.

Selective 2-Propanol Oxidation over Unsupported Co_3O_4 Spinel Nanoparticles: Mechanistic Insights into Aerobic Oxidation of Alcohols

Selective oxidation is a key technology in the chemical industry for the synthesis of important intermediates for pharmaceuticals and fine chemicals. Supported noble-metal catalysts are often applied in these processes, which, however, suffer from several problems including high costs and low thermal stabilities. This work aims at the development of highly stable non-noble metal oxide catalyst for selective oxidation. Phase-pure crystalline Co_3O_4 spinel nanoparticles were synthesized by the decomposition of cobalt acetylacetonate in oleylamine followed by calcination. The resulting unsupported Co_3O_4 was found to be highly active and selective for oxidative dehydrogenation of 2-propanol. Full conversion with 100% selectivity to acetone was recorded already at 430 K during the first oxidation run. Selectivity drops only slightly up to the maximal reaction temperature of 573 K due to the formation of the total oxidation product CO_2 . The low-temperature reaction pathway is reversibly inhibited but can be restored by an oxidative treatment. 5-fold coordinated surface Co^{3+} was identified as active site in close connection with reactive surface oxygen by XAS, XPS, TPO, O_2 TPD, and theoretical calculations.



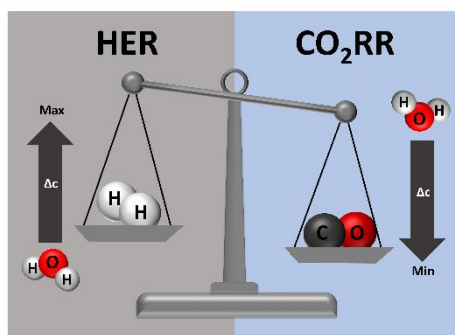
Co_3O_4 nanoparticles as catalyst for the oxidative dehydrogenation of 2-propanol to acetone.

Die Selektivoxidation ist in der chemischen Industrie eine Schlüsseltechnologie für die Synthese von wichtigen Zwischenprodukten für Arzneimittel und Feinchemikalien. In diesen Prozessen werden oft geträgerte Edelmetallkatalysatoren eingesetzt, welche eine Vielzahl von Problemen wie hohe Kosten und geringe thermische Stabilität aufweisen. Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung von stabilen unedlen Metalloxydkatalysatoren für die Selektivoxidation. Phasenreine kristalline Co_3O_4 -Spinellnanopartikel wurden mittels Zersetzung von Kobaltacetylacetonat in Oleylamin und anschließender Kalzinierung hergestellt. Das resultierende ungeträgerte Co_3O_4 erwies sich als hochaktiv und selektiv für die oxidative Dehydrierung von 2-Propanol. Schon bei 430 K konnte ein Vollumsatz mit 100% Selektivität zu Aceton während des ersten Oxidationsdurchlaufs gemessen werden. Die Selektivität nahm bis zur Maximaltemperatur von 573 K durch die Bildung des Totaloxidaionsprodukts CO_2 nur geringfügig ab. Der Tieftemperaturreaktionspfad wird dabei reversibel inhibiert, kann jedoch mittels oxidativer Behandlung regeneriert werden. Als aktives Zentrum wurde fünffachkoordiniertes oktaedrisches Oberflächen- Co^{3+} in engem Zusammenhang mit reaktivem Oberflächensauerstoff mittels XAS, XPS, TPO, O_2 TPD und theoretischen Berechnungen identifiziert.

S. Piontek, K. junge Puring, D. Siegmund, M. Smialkowski, I. Sinev, D. Tetzlaff, B. Roldan Cuenya, U.-P. Apfel, *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 1075.

Bio-inspired design: bulk iron-nickel sulfide allows for efficient solvent-dependent CO₂ reduction

The electrocatalytic reduction of CO₂ to industrially relevant bulk chemicals is becoming a key factor in avoiding environmental pollutions as well as the selective storage of sustainable energy. Inspired by structural analogies with the active center of the CO₂ converting CODH_{Ni} enzyme, we herein showed that Fe/Ni sulfides enable an efficient reduction of CO₂. By carefully adjusting the reaction conditions, we showed that Fe_{4.5}Ni_{4.5}S₈ electrodes allow for electrochemical CO₂ reduction with Faraday efficiencies of up to 87 % and 13 % respectively for the formation of CO and CH₄ at 3 mA cm⁻². The solvent and CO₂ solubility as well as amount of water/protons at the electrode have been identified as key properties to adjust the balance between hydrogen formation and CO₂ reduction in favor of the latter. The experiments shown can thus serve as model reactions to analyze the catalysts potential to operate in gas diffusion electrodes.



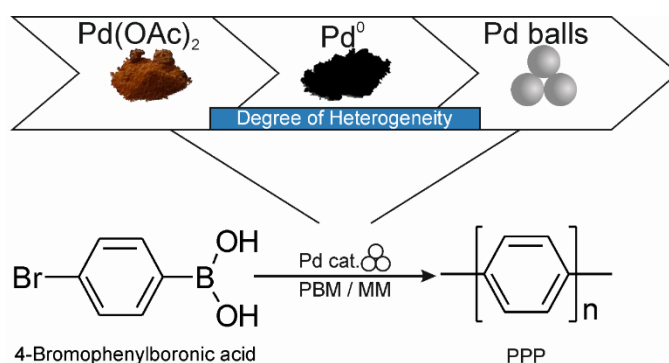
The electrochemical reduction of CO₂ is always accompanied by parasitic hydrogen development (HER). The ratio between both reactions can be regulated by the amount of water accessible to the catalyst. The lower the water concentration, the more facilitated the CO₂RR is.

Die elektrokatalytische Reduktion von CO₂ zu wertvollen Massenchemikalien wird zu einem wichtigen Faktor bei der Vermeidung von Umweltbelastungen und der selektiven Speicherung von nachhaltiger Energie. Inspiriert durch strukturelle Analogien mit dem aktiven Zentrum des Enzyms CODH_{Ni}, zeigten wir, dass Fe/Ni-Sulfide eine effiziente Reduktion von CO₂ ermöglichen. Durch sorgfältige Anpassung der Prozessbedingungen zeigten wir, dass Pentlandit (Fe_{4.5}Ni_{4.5}S₈)-Elektroden die elektrochemische CO₂ Reduktion mit Faraday Effizienzen von 87 % bzw. 13 % für die Bildung von CO und Methan bei 3 mA cm⁻² ermöglichen. Die Wahl des Lösungsmittels, die Anwesenheit von Wasser/Protonen und die CO₂-Löslichkeit wurden als Schlüsseleigenschaften identifiziert, um das Gleichgewicht zwischen Wasserstoffbildung und CO₂ Reduktion zugunsten des Letzteren einzustellen. Die gezeigten Experimente können somit als Modellreaktionen zur Aufklärung eines potentiellen Katalysators in Gasdiffusionselektroden dienen.

C.G. Vogt, S. Grätz, S. Lukin, I. Halasz, M. Etter, J.D. Evans, L. Borchardt,
Angew. Chem. Int. Ed. **2019**, 58, 18942.

Direct Mechanochemical Suzuki Polymerization: Palladium as Milling Media and Catalyst
in the Mechanochemical Suzuki Polymerization

In the recent past, mechanochemical reactions have climbed their way back into general chemistry. As a green and sustainable method, the future of this field is very promising since the use of toxic solvents can be avoided and selectivities and yields are generally high. Bypassing solubility issues and offering the perks of a solid-state reaction, mechanochemistry is a versatile method for material synthesis. A reaction of great importance in organic and polymer chemistry that has already been performed in ball mills is the palladium-catalyzed Suzuki coupling. We have recently demonstrated that a simple $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ salt is suitable as catalyst for a mechanochemical Suzuki polymerization. This approach with bifunctional monomers yielded poly(*para*-phenylene) faster and with higher degrees of polymerization (DP) than solution based and electrochemical processes. We now advanced this concept towards using the milling equipment itself as catalysts. This novel type of catalysis offers the advantage of directly using solid educts that do not require any solubility. Catalyst recycling and separation is most facile, as the macroscopic milling ball simply has to be taken out of the vessel.



*Mechanochemical Suzuki polymerization reaction of 4-bromophenylboronic acid towards poly(*para*-phenylene) – advancing the catalyst from Pd salt to Pd milling balls.*

D. D. Enkelmann, J. Handelsmann, C. Schauertec, K. Merz *CrystEngComm* **2019**, 21, 2130.

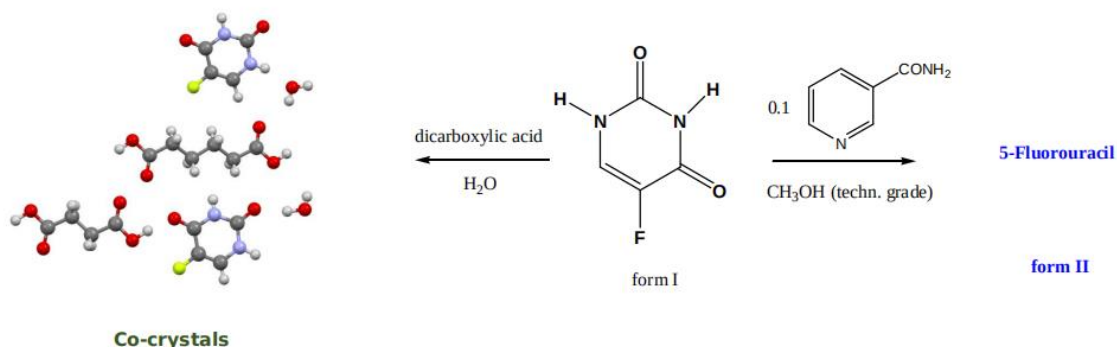
Co-crystallization and polymorphic behavior of 5-fluorouracil

How can we improve the properties of drugs - so called active pharmaceutical ingredients (APIs)?

One way is the synthesis of alternative or new polymorphic forms of the selected API. An additional approach is the synthesis of co-crystalline APIs.

In this study both approaches were used in the case of the API 5-fluorouracil (5-fluoro-1H-pyrimidine-2,4-dione). The selected drug is an antineoplastic API, administered orally and as an injection to treat skin colorectal, breast, gastrointestinal, and ovarian cancers.

The results of the investigations are based on the simultaneous presence of hydrogen donors and acceptors of 5-fluorouracil. This units allow the syntheses and single-crystal characterization of co-crystalline 5-fluorouracil compounds with nontoxic co-formers of the GRAS list - a list of compounds that are generally recognized as safe candidates - and an alternative simple access to the polymorphic form II of 5-fluorouracil are presented.



Wie können wir die Eigenschaften von Medikamenten - so genannten aktiven pharmazeutischen Wirkstoffen (APIs) - verbessern?

Ein Weg ist die Synthese alternativer oder neuer polymorpher Formen des ausgewählten Wirkstoffs. Ein weiterer Ansatz ist die Synthese von co-kristallinen APIs.

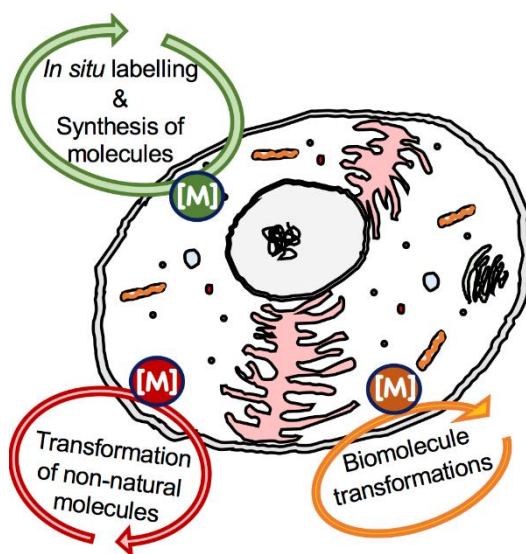
In dieser Studie wurden beide Ansätze im Falle des Wirkstoffs 5-Fluorouracil (5-Fluor-1H-Pyrimidin-2,4-dion) verwendet. Bei dem ausgewählten Arzneimittel handelt es sich um einen antineoplastischen Wirkstoff, der oral und als Injektion zur Behandlung von Kolorektal-, Brust-, Magen-Darm- und Eierstockkrebs der Haut verabreicht wird.

Die Ergebnisse der Untersuchungen basieren auf dem gleichzeitigen Vorhandensein von Wasserstoffbrücken-Donoren und Akzeptoren in 5-Fluorouracil. Diese Einheiten ermöglichen die Synthese und Charakterisierung von co-kristallinen 5-Fluorouracil-Verbindungen mit nicht-toxischen Co-Formern der GRAS-Liste - einer Liste von Verbindungen, die allgemein als sichere Kandidaten anerkannt sind - und für einen alternativen einfachen Zugang zur polymorphen Form II von 5-Fluorouracil.

J. Soldevila Barreda, N. Metzler-Nolte, *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 829.

Intracellular Catalysis with Selected Metal Complexes and Metallic Nanoparticles:
Advances toward the Development of Catalytic Metallodrugs.

Platinum-containing drugs such as Cisplatin are among the most frequently used chemotherapeutic agents. Their tremendous success has spurred research and development of other metal-based drugs, with notable achievements. There is recent interest on developing transition-metal based catalytic systems that are capable of performing transformations inside cells, with the aim of inducing medically relevant cellular changes. There is promise in catalytically active compounds to achieve a desired pharmacologic effect with only a very small amount of the catalyst, and therefore, toxicity and side reactions are reduced. However, there is also an art to the choice of catalysts and reactions which have to be compatible with biological conditions, namely an aqueous, oxygen-containing environment. In this review, we describe new developments that bring together the far-distant worlds of transition-metal based catalysis and metal-based drugs, in what is termed “catalytic metallodrugs”.



Different tasks and potential applications of intracellular catalysis with metal complexes and metallic nanoparticles in the newly emerging field of “catalytic metallodrugs”.

Platin-haltige Wirkstoffe, wie z.B. Cisplatin, zählen zu den am häufigsten eingesetzten Chemotherapeutika in der Behandlung von Krebserkrankungen. Diese Erfolge geben Bestrebungen Auftrieb, metallkatalysierte Transformationen zu entwickeln, die innerhalb von lebenden Zellen eingesetzt werden können, mit dem Ziel medizinisch relevante Veränderungen herbeizuführen. Da die Metallverbindungen eben nur als Katalysator wirkt, sollte es möglich sein, den pharmakologisch erwünschten Effekt bereits mit einer sehr kleinen Menge der Metallverbindung erreichen zu können, wodurch Nebenwirkungen verringert würden. Andererseits ist die Auswahl des katalytischen Systems schwierig, da das System mit biologischen Bedingungen in Wasser und unter Sauerstoff kompatibel sein muss. In diesem Übersichtsartikel beschreiben wir neue Entwicklungen, die die scheinbar weit entfernten Welten der Übergangsmetall-Katalyse und der metallbasierten Wirkstoffe zu dem neuen Forschungsfeld „katalytische Metallodrugs“ verschmelzen.

C. Mohapatra, L. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, K.-S. Feichtner, C. Schwarz, V. H. Gessner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 7489.

Isolation of a Diylide-Stabilized Stannylene and Germylene: Enhanced Donor Strength through Coplanar Lone Pair Alignment

Carbenes and their heavier group 14 analogs are usually highly reactive species. However, their properties can be tuned by the substituents at the low valent element center, thus also allowing for a fine-tuning of the donor properties and their ability to activate small molecules or strong bonds. In this publication, we reported on the isolation of the first stable stannylene and germylene with two ylide-substituents (**Y₂E**, with E = Ge, Sn, and Y = [PPh₃-C-SO₂Tol][−]). The synthesis was accomplished in one step from the metallized ylide **YNa** and the corresponding ECl₂ precursors. **Y₂Ge** and **Y₂Sn** exhibit unusual structures, in which the three adjacent lone pairs in the C-E-C linkage are co-planarly arranged to each other. This bonding situation is preferred over the typical π -donation from the ligands into the empty p-orbital at the metal due to the strong anion-stabilizing ability of the sulfonyl groups in the ylide backbone and their additional coordination to the metal. The alignment of the three lone pairs leads to a remarkable boost of the HOMO energy and donor strength, thus making **Y₂Ge** and **Y₂Sn** the germylene and stannylene with the strongest donor properties known until today.

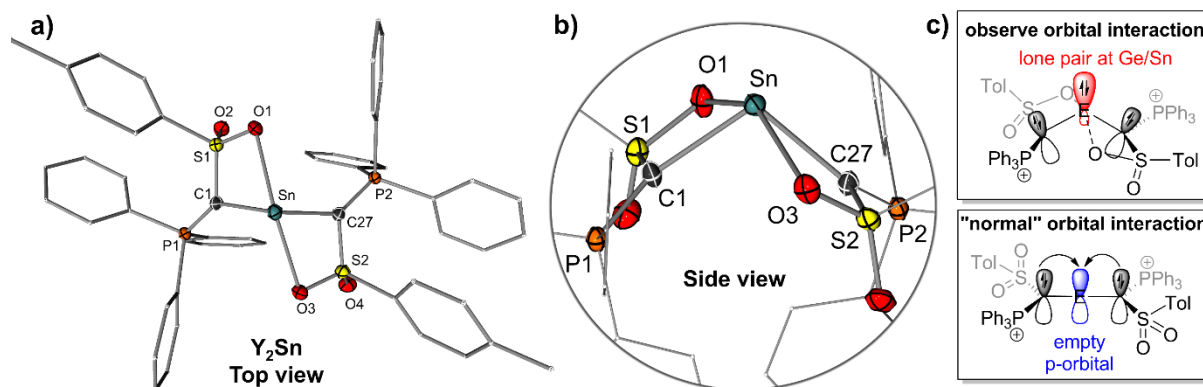


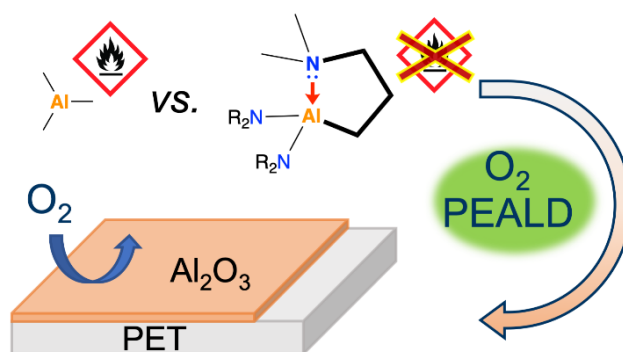
Figure. a) top view and b) side view of **Y₂Sn**, c) orbital interactions in **Y₂Sn** and **Y₂Ge**.

Carbene und ihre schweren Gruppe-14-Analoga sind in der Regel hochreaktive Verbindungen. Ihre Eigenschaften können jedoch entscheidend durch die Substituenten am niedervalenten Zentralatom beeinflusst werden, was bspw. ein Einstellen ihrer Donorstärke oder ihren Einsatz in der Aktivierung kleiner Moleküle ermöglicht. In dieser Publikation berichten wir die Isolierung des ersten stabilen Stannylen und Germylen mit zwei Ylid-Substituenten (**Y₂E**, mit E = Ge, Sn und Y = [PPh₃-C-SO₂Tol][−]). Die Synthese gelingt in einem Schritt ausgehend vom metallierten Ylid **YNa**. **Y₂Ge** und **Y₂Sn** zeigen ungewöhnliche Strukturen, in denen sich die drei freien Elektronenpaare in der E-C-E-Einheit coplanar zueinander anordnen. Diese Bindungssituation ist gegenüber der gewöhnlichen π -Donierung vom Substituenten zum Metall aufgrund der Anionen-stabilisierenden Wirkung der Sulfonylgruppe im Ylid-Rückgrat und ihrer Koordination ans Metall bevorzugt. Die Aneinanderreihung der freien Elektronenpaare resultiert in einer bemerkenswerten Anhebung der HOMO-Energie und Verstärkung der Donorfähigkeit, so dass **Y₂Ge** und **Y₂Sn** das Germylen und Stannylene mit der größten Donorstärke sind.

L. Mai, N. Boysen, D. Zanders, T. de los Arcos, F. Mitschker, B. Mallick, G. Grundmeier, P. Awakowicz, A. Devi, *Chem. Eur. J.*, **2019**, 25, 7489-7500.

Potential Precursor Alternatives to the Pyrophoric Trimethyl Aluminum for the Atomic Layer Deposition of Aluminum Oxide

Gas barrier layers (GBLs) of Al_2O_3 are used on polymers to protect degradable compounds or goods from air. With atomic layer deposition (ALD) it is possible to fabricate such thin films. For the ALD of Al_2O_3 , trimethylaluminum ($[\text{AlMe}_3]$, TMA) is the most commonly used precursor. However, it is pyrophoric, making it hazardous to handle. Here, we present the synthesis of the 3-(dimethylamino)propyl (DMP) substituted aluminum complexes $[\text{AlMe}_2(\text{DMP})]$ (**1**, DMAD) and $[\text{Al}(\text{NR}_2)_2(\text{DMP})]$ [$R = \text{Me}$ (**2**), Et (**3**), $i\text{Pr}$ (**4**)] as an alternative class of precursors for ALD of Al_2O_3 . The complexes are thermally stable, volatile and non-pyrophoric. Thus, for compounds **1** and **3**, new plasma enhanced (PE)ALD processes were developed. The Al_2O_3 films were tested as GBL by depositing thin films of various thicknesses on PET substrates and measuring the oxygen transmission rate. Improvement of the gas barrier performance by a factor of 90 for a 15 nm thin film using **1** and a factor of 25 for an only 5 nm thin film using **3** were observed. Other thin film properties and the overall qualities match those reported for layers obtained from TMA, rendering the new precursors to be a promising and safe alternative for ALD of Al_2O_3 coatings.



Al_2O_3 as gas barrier layer deposited by PEALD from new Al precursors.

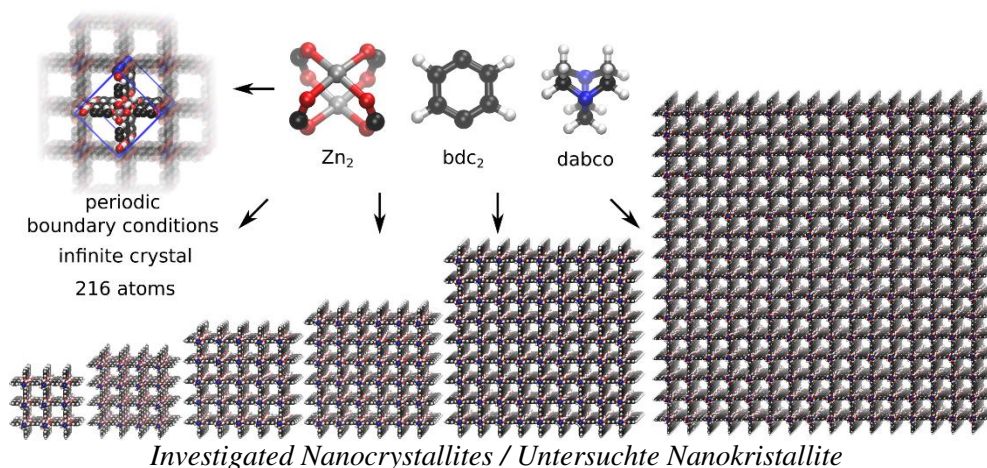
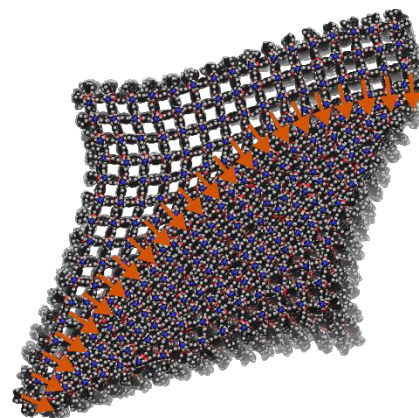
Gasbarriereschichten (GBLs) auf Polymeren aus Al_2O_3 werden genutzt, um luftempfindliche Stoffe oder Waren zu schützen. Mit der Atomlagenabscheidung (ALD) sind solche Schichten herstellbar. Für die ALD von Al_2O_3 , ist Trimethylaluminium (TMA) der meistgenutzte Präkursor. Allerdings ist TMA hochgradig pyrophor, was den Umgang mit diesem Stoff gefährlich macht. Hier präsentieren wir die Synthese von 3-(dimethylamino)propyl (DMP) substituierten Aluminiumkomplexen, $[\text{AlMe}_2(\text{DMP})]$ (**1**, DMAD) und $[\text{Al}(\text{NR}_2)_2(\text{DMP})]$ [$R = \text{Me}$ (**2**), Et (**3**), $i\text{Pr}$ (**4**)], als alternative ALD-Präkursoren. Die Komplexe sind thermisch stabil, volatil und nicht pyrophor. Daher wurde für die Verbindungen **1** und **3** ein plasmagestützter (PE)ALD Prozess entwickelt und die resultierenden Schichten als GBL getestet, indem verschiedene Schichtdicken von Al_2O_3 auf PET abgeschieden und die Sauerstofftransmissionsraten bestimmt wurden. Für eine 15 nm dicke Schicht, die mit **1** abgeschieden wurde, konnte ein Verbesserungsfaktor von 90 beobachtet werden, während eine nur 5 nm dicke Schicht, die mit **3** abgeschieden wurde, bereits einen Verbesserungsfaktor von 25 aufweist. Da die Dünnschichten eine vergleichbar gute Qualität gegenüber denen besitzen, die mittels TMA abgeschieden wurden, sind die neuen Präkursoren eine vielversprechende und sichere Alternative für die Atomlagenabscheidung von Al_2O_3 -Beschichtungen.

J. Keupp, R. Schmid, *Adv. Theory Simul.* **2019**, 2, 1900117.

Molecular Dynamics Simulations of the “Breathing” Phase Transformation of MOF Nanocrystallites

Metal-organic frameworks (MOFs) are also called soft porous crystals, because of their unique property to be ordered and crystalline on one side and soft and flexible on the other. Some MOFs undergo a “breathing” type phase transformation with a large change in the volume, which is triggered by guest adsorption, pressure, or temperature. This behavior, which is of high importance for the application of MOFs for example in gas separation, is usually studied in the constraint of periodic boundary conditions (and small unit cells), leading to a concerted motion of the total system. In this contribution,

we have used our accurate first-principles parameterized force field MOF-FF to investigate the “breathing” transformation for the first time for nanocrystallites without this constraint. We could show that a first-order phase transitions, with an interface between a closed and an open pore domain traveling through the system, is observed.

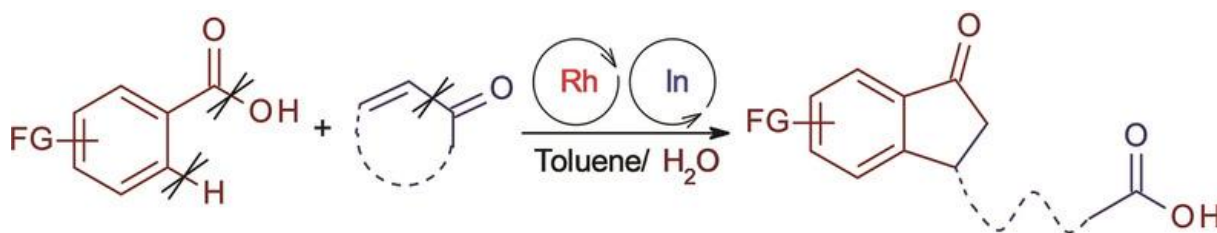


Metal-organische Netzwerke (MOFs) werden auch als weiche poröse Kristalle bezeichnet, da sie die einzigartige Eigenschaft besitzen, zugleich geordnet und kristallin sowie weich und flexibel zu sein. Einige MOFs unterliegen einer „Atmungs“-artigen Phasenumwandlung, die mit einer großen Volumenänderung einhergeht und durch Gastmoleküladsorption, Druck oder Temperatur ausgelöst wird. Dieses Verhalten, welches von hoher Bedeutung für die Anwendung von MOFs zum Beispiel in der Gastrennung ist, wird üblicherweise in der Näherung von periodischen Randbedingungen (und kleinen Einheitszellen) untersucht, was zu einer konzertierten Bewegung des Gesamtsystems führt. In dieser Arbeit haben wir unser genaues *ab-initio* parametrisiertes Kraftfeld MOF-FF benutzt, um erstmals diese Phasenumwandlung für Nanokristallite ohne diese Einschränkung zu studieren. Wir konnten zeigen, dass eine Umwandlung erster Ordnung beobachtet wird, bei der eine Grenzfläche zwischen Bereichen mit geschlossener und offener Pore durch das System wandert.

G. Zhang, Z. Hu, F. Belitz, Y. Ou, N. Pirkel, L. J. Goossen,
Angew. Chem. Int. Ed. **2019**, 58, 6435-6439.

Rhodium-Catalyzed Annelation of Benzoic Acids with α,β -Unsaturated Ketones with
Cleavage of C–H, CO–OH, and C–C Bonds.

A versatile annelation process is described, that comprises of the formation of two new C–C bonds and the selective cleavage of non-activated C–H, CO–OH, and C–COR bonds. In this reaction, a mixture of $[\text{Cp}^*\text{RhCl}_2]_2$, the Lewis acid $\text{In}(\text{OTf})_3$, and the mild base Na_2CO_3 induces a unique hydroarylation/Claisen/retro-Claisen process, transforming aromatic carboxylic acids with α,β -unsaturated ketones into the corresponding indanones. During this carboxylate-directed *ortho*-C–H annelation, the C–COR bond of the ketone and the CO–OH group of the aromatic carboxylate are cleaved, and the hydroxyl group is transferred from the aromatic to the aliphatic acyl residue. This waste free reaction greatly increases the molecular complexity in a single step, especially, when starting from cyclic ketones that are converted into indanones with aliphatic carboxylate side chains.



● broad scope ● waste-free

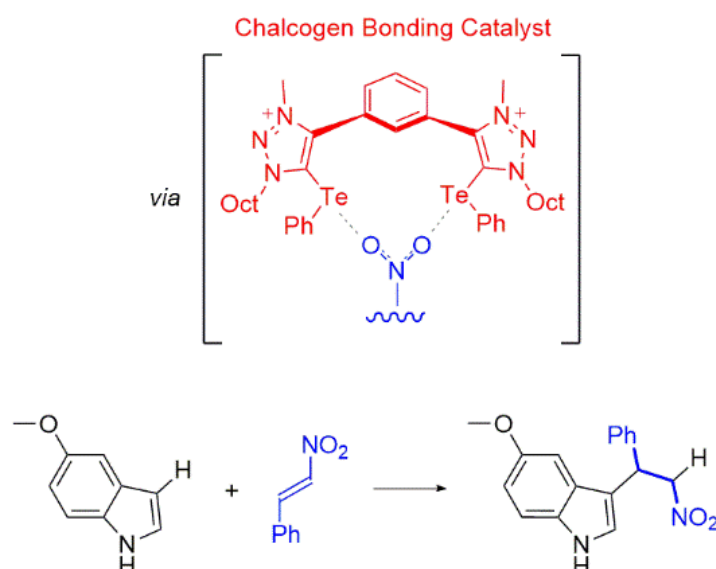
A unique hydroarylation/Claisen/retro-Claisen process transforms aromatic carboxylic acids and α,β -unsaturated ketones into functionalized indanones.

In einer vielseitigen Annelierungsreaktion werden zwei neue CC-Bindungen geknüpft und die nicht aktivierten CH-, CO-OH- und COR-Bindungen selektiv gespalten. Bei dieser Reaktion induziert ein Gemisch aus $[\text{Cp}^*\text{RhCl}_2]_2$, der Lewis-Säure $\text{In}(\text{OTf})_3$ und der milden Base Na_2CO_3 einen einzigartigen Hydroarylierungs-/Claisen-/Retro-Claisen-Prozess der aromatische Carbonsäuren mit α, β -ungesättigten Ketonen zu den entsprechenden Indanonen umsetzt. Während dieser Carboxylat-gerichteten *ortho*-CH-Verknüpfung werden die COR-Bindung des Ketons und die CO-OH-Gruppe des aromatischen Carboxylats gespalten und die Hydroxylgruppe vom aromatischen auf den aliphatischen Acylrest übertragen. Diese abfallfreie Reaktion erhöht die molekulare Komplexität in einem einzigen Schritt erheblich, insbesondere wenn von cyclischen Ketonen ausgegangen wird, die in Indanone mit aliphatischen Carboxylatseitenketten umgewandelt werden.

P. Wonner, A. Dreger, L. Vogel, E. Engelage, S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 16923-16927.

Chalcogen Bonding Catalysis of a Nitro-Michael Reaction

Chalcogen bonding is the non-covalent interaction between Lewis acidic chalcogen substituents and Lewis bases. Herein, we present the first application of di-cationic tellurium-based chalcogen bond donors in the nitro-Michael reaction between trans- β -nitrostyrene and indoles. This also constitutes the first activation of nitro derivatives by chalcogen bonding (and halogen bonding). The catalysts showed rate accelerations of more than 300-fold compared to strongly Lewis acidic hydrogen bond donors. Several comparison experiments, titrations, and DFT calculations support a chalcogen-bonding-based mode of activation of β -nitrostyrene.



Catalysis of a nitro-Michael reaction by a bidentate chalcogen bond donor.

Chalkogenbrücken sind nicht-kovalente Wechselwirkungen zwischen Lewis-aziden Chalkogensubstituenten und Lewis-Basen. Hierin präsentieren wir die erste Anwendung dikationischer, Tellur-basierter Chalkogenbrückendonoren als Katalysatoren in einer Nitro-Michael-Reaktion zwischen trans- β -Nitrostyrol und Indolen. Dies ist außerdem die erste Aktivierung einer Nitro-Gruppe durch Chalkogenbrücken (und Halogenbrücken). Die Katalysatoren zeigten eine mehr als 300-fache Beschleunigung der Reaktionsgeschwindigkeit im Vergleich zu stark Lewis-sauren Wasserstoffbrückendonoren. Durch mehrere Vergleichsexperimente, Titrations und DFT-Rechnungen konnte die Aktivierung des Nitrostyrols durch Chalkogenbrücken nachgewiesen werden.

Marius Grote, Susanna Kushnir, Niclas Pryk, David Möller, Julian Erver, Ahmed Ismail-Ali, Frank Schulz, *Organic & Biomolecular Chemistry* **2019**, *17*, 6374-6385.

Identification of Crucial Bottlenecks in Engineered Polyketide Biosynthesis Using the Monensin Gene Cluster as a Model System

The concept of combinatorial biosynthesis has promised access to substance libraries based on natural products. Ever since the identification of the biosynthesis of the antibiotic erythromycin A in 1990, the predictable manipulation of giant type I polyketide synthases was investigated. However, this goal was rarely reached beyond simplified model systems. In this study, we identify the intermediates in the biosynthesis of the polyether monensin and numerous mutated variants using a targeted metabolomics approach. We investigate the biosynthetic flow of intermediates and use the experimental setup to reveal the presence of selectivity filters in polyketide synthases to identify the enzymological basis for the concept of combinatorial biosynthesis. We identify selectivity filters within the polyketide synthase which obstruct the processing of non-native intermediates on the enzymatic assembly line. Thereby we question the established concept of a modular organization of polyketide synthases and highlight obstacles in substrate channeling along the cascade. In the search for the molecular origin of a selectivity filter, we investigate the role of different thioesterases in the monensin gene cluster and the connection between ketosynthase sequence motifs and incoming substrate structures. Furthermore, we demonstrate that the selectivity filters do not apply to new-to-nature side-chains in nascent polyketides, showing that the acceptance of these is not generally limited by downstream modules.

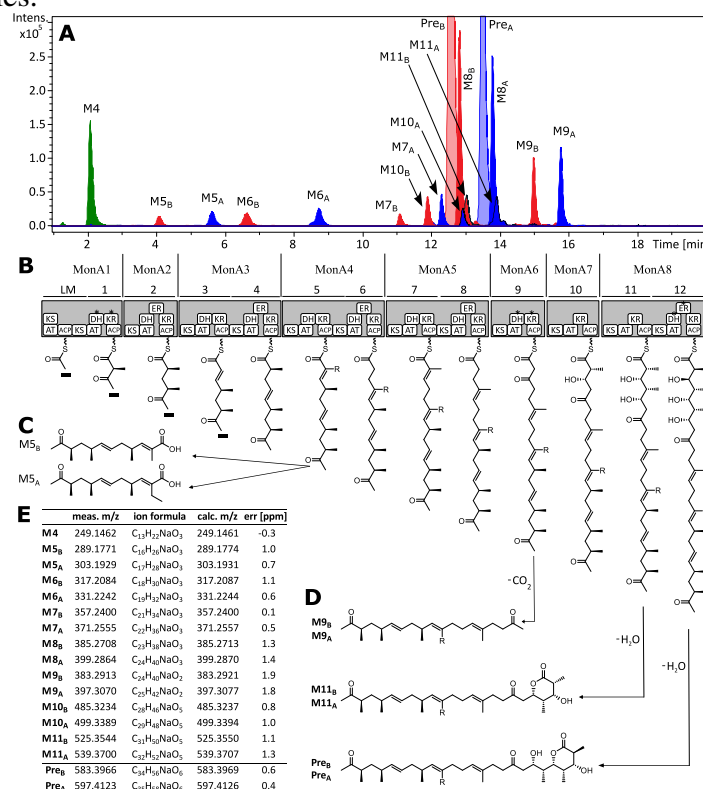
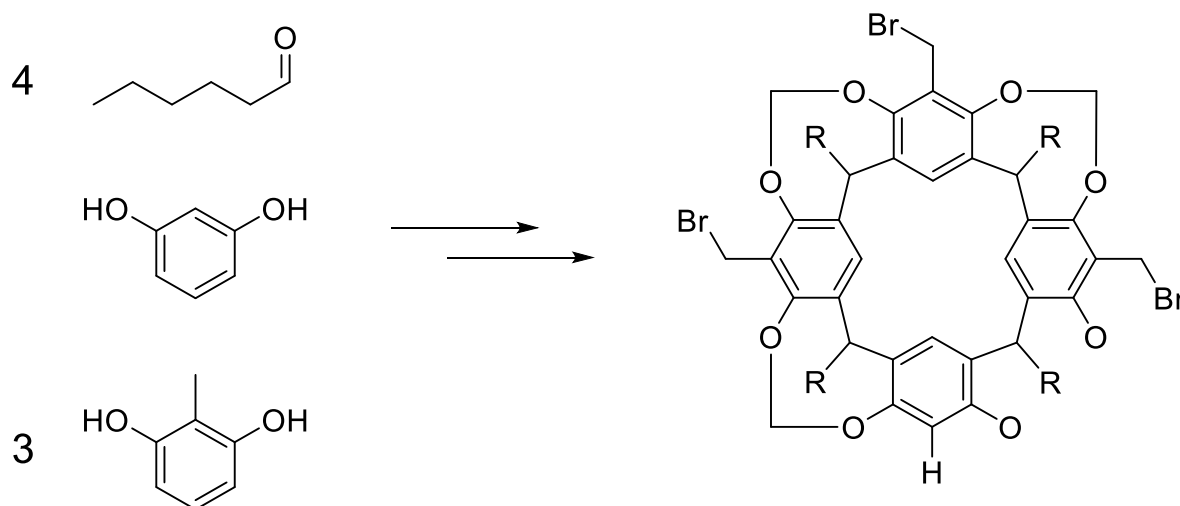


Figure 2: A. Extracted ion chromatograms indicating the hop off products released from the monensin biosynthetic pathway. B. Modular assembly line of the monensin gene cluster. C. Intermediates from module 5 upwards arise as A (red)- and B (blue)-derivatives, exemplarily shown for the M5 intermediate. D. The β -ketone hop off product M9 was only detected in its decarboxylated form (M9A/B). Intermediates released from module 11 were detected in the form of the corresponding lactones. E. HRMS data from the main adduct $[M+Na]^+$ of each intermediate.

D. Loose, A. Aniol, M. Feigel, S. Röhling, G. Dyker
European Journal of Organic Chemistry **2020**, 35-40.

Mono- and Tri-Functionalization of Trimethylresorcin[4]arenes

A short and efficient synthesis of trimethylresorcin[4]arene was developed based on the co-condensation of resorcinol and 2-methylresorcinol with an aliphatic aldehyde. Key to the successful isolation was a selective precipitation of a binary product mixture and subsequent derivatization for an easy separation by column chromatography. Further functionalization is setting the stage for the synthesis of hemicarcerands.



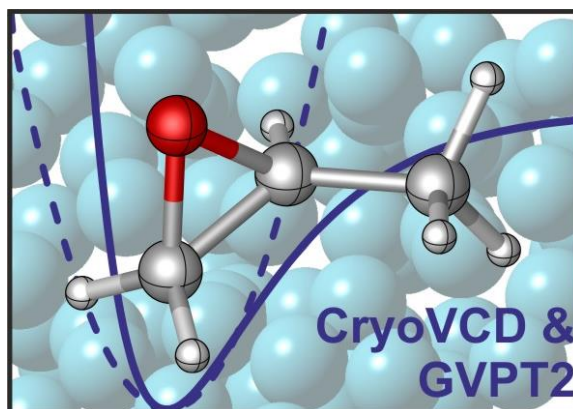
Co-condensation of resorcinol and 2-methylresorcinol to functionalized resorcinarenes.

Eine kurze und effiziente Synthese von Trimethylresorcin[4]arenen wurde basierend auf der Co-condensation von Resorcinol und 2-Methylresorcinol mit einem aliphatischen Aldehyd entwickelt. Schlüsselschritte zur erfolgreichen Isolierung war das selektive Ausfällen eines binären Gemisches, das nach Derivatisierung einfach per Chromatographie aufgetrennt werden konnte. Weitere Funktionalisierung bereitet die Synthese von Hemicarceranden vor.

Nora M. Kreienborg, Julien Bloino, Tobias Osowski, Corina H. Pollok, Christian Merten
Phys. Chem. Chem. Phys. **2019**, *21*, 6582.

The vibrational CD spectra of propylene oxide in liquid xenon: a proof-of-principle
CryoVCD study that challenges theory.

Propylene oxide (PO) is one of the smallest chiral molecules and therefore the ideal candidate to verify new experimental and theoretical approaches in the field of vibrational circular dichroism (VCD) spectroscopy. In previous work we have been able to show that the at that time latest methods for the calculation of anharmonic IR and VCD spectra of PO could reproduce the experimental spectra obtained under matrix isolation conditions well. Only for bands that are influenced by Fermi resonances, no good match between experiment and theory was found. In the highlighted paper we present a new experiment that allows us to record IR and VCD spectra in liquid noble gases. Under these completely inert conditions, packing effects, as they can occur in the matrix, can be neglected. Comparison with the latest VPT2 methods shows that the characteristics of the Fermi resonances, which have been difficult to obtain so far, depend strongly on the environment.



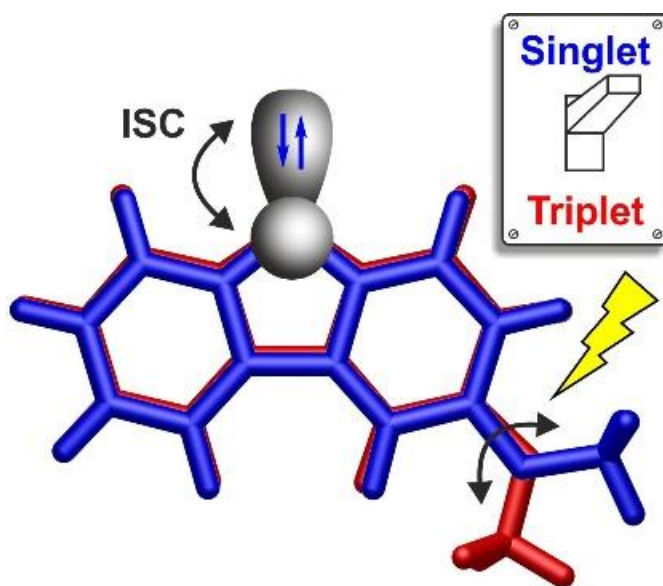
Schematic drawing of propylene oxide embedded in a cryogenic matrix with indicated harmonic (dashed) and anharmonic (continuous) vibrational potentials

Propylenoxid (PO) ist eines der kleinsten chiralen Moleküle und damit der ideale Kandidat um sowohl neue experimentelle als auch theoretische Ansätze im Bereich der VCD Spektroskopie (engl. *vibrational circular dichroism*) zu verifizieren. So haben wir in früheren Arbeiten zeigen können, dass die zu diesem Zeitpunkt aktuellen Methoden zur Berechnung von anharmonischen IR- und VCD-Spektren von PO die unter Matrix-Isolationsbedingungen erhaltenen experimentellen Spektren gut reproduzieren konnten. Einzige für Banden, die durch Fermi-Resonanzen beeinflusst werden können, wurde keine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie gefunden. In der hervorgehobenen Arbeit stellen wir ein neues Experiment vor, dass es uns erlaubt, IR- und VCD-Spektren in flüssigen Edelgasen aufzunehmen. Unter diesen völlig inerten Bedingungen können somit Packungseffekte, wie sie in der Matrix auftreten können, vernachlässigt werden. Vergleich mit den neuesten VPT2-Methoden zeigt, dass die Ausprägung der bisher Schwierigkeiten bereitenden Fermi-Resonanzen stark von der Umgebung abhängt.

I. Trosien, E. Mendez-Vega, T. Thomanek, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 14855-14859.

Conformational Spin Switching and Spin-Selective Hydrogenation of a Magnetically Bistable Carbene

Molecular systems with bistable magnetic properties are interesting for the design of novel functional materials for molecular electronic devices, chemical sensors, and for information recording. 3-Methoxy-9-fluorenylidene is a carbene that can be generated in cryogenic matrices at 4 K both in its lowest energy singlet and triplet states. The nearly degenerate spin states can be switched by irradiating the carbene with light of different wavelengths. The interconversion of the spin states is induced by a conformational change of the methoxy group: switching the methoxy group into the “up” position results in the singlet state and switching into the “down” position in the triplet state. This spin switching by switching the conformation of a remote functional group is a novel phenomenon and makes this carbene unique for the study of spin-specific reactions, which is demonstrated for the hydrogenation reactions

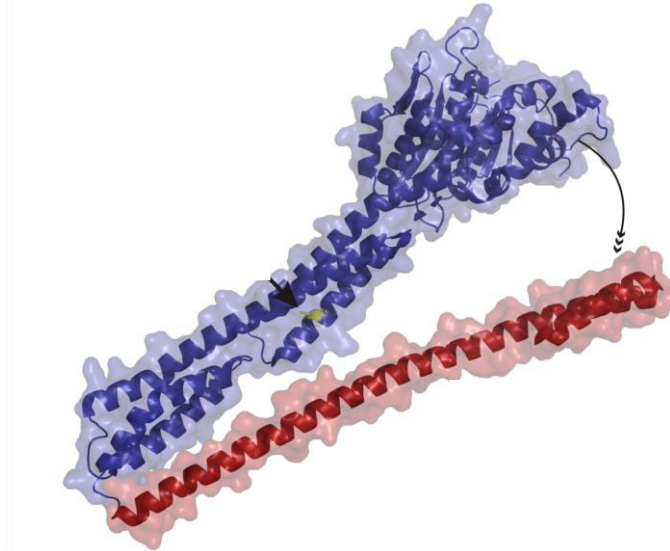


Molekulare Systeme mit bistabilen magnetischen Eigenschaften sind interessant für das Design von neuen funktionellen Materialien, für molekulare elektronische Anwendungen, chemische Sensoren und für die Speicherung von Informationen. 3-Methoxy-9-fluorenylidene ist ein Carben, das in kryogenen Matrices bei 4 K in seinen energetisch niedrigsten Singulett- und Triplett-Zuständen erzeugt werden kann. Die fast entarteten Spinzustände können durch Bestrahlung des Carbens mit Licht unterschiedlicher Wellenlängen umgeschaltet werden. Die Umschaltung des Spinzustandes wird eingeleitet durch einen Wechsel der Konformation der Methoxygruppe: Umschalten der Methoxygruppe in die “up” Position ergibt den Singulett Zustand, Umschalten in die “down” Position den Triplett Zustand. Dieses Umschalten des Spinzustandes durch Umschalten der Konformation einer entfernten funktionellen Gruppe ist ein neues Phänomen und macht dieses Carben einmalig bei der Untersuchung von spin-spezifischen Reaktionen, was für die Hydrierungsreaktion gezeigt wird.

C. Lorenz, S. Ince, T. Zhang, A. Cousin, R. Batra-Safferling, L. Nagel-Steger, C. Herrmann,
A.M. Stadler, *FEBS J.* **2019**, 285, 496-514.

Farnesylation of human guanylate-binding protein 1 as safety mechanism preventing
structural rearrangements and uninduced dimerization

This paper reports on dynamic, structural changes of human Guanylate Binding Protein 1 (hGBP1) in solution as studied by small angle X-ray scattering. These structures help to understand the mechanism of hGBP1 polymer formation which plays an essential role in fighting intracellular pathogens. Especially highlighted is the conclusion that the farnesyl group is pulled out of a protein pocket in a nucleotide dependent manner which eventually enables the enzyme to polymerize and to attach to lipid membranes.



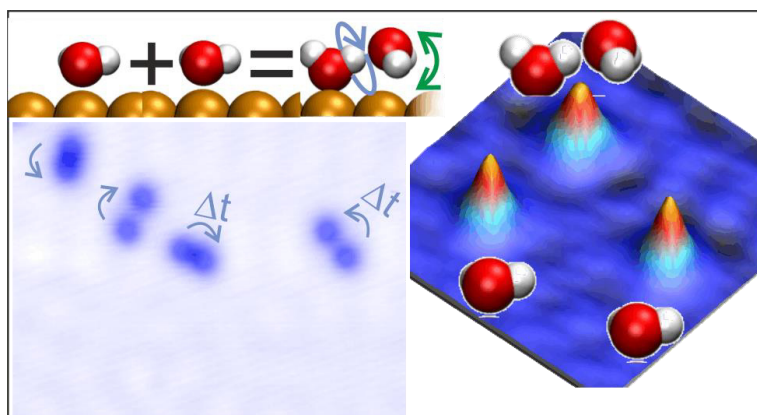
The ribbon plot of the hGBP1 structure shows how the two major domains could separate from each other in a nucleotide dependent manner.

In der Veröffentlichung von Frau Lorenz wird die Untersuchung der Struktur des humanen Guanylat bindenden Proteins 1 (hGBP1) in Lösung beschrieben – die wichtigste experimentelle Methode stellt in dieser Studie die Kleinwinkel-Röntgenstreuung (SAXS) an der Forschungsanlage Jülich dar. Für hGBP1 konnte kürzlich eine antimikrobielle Aktivität nachgewiesen werden, zuvor in Endothelzellen aber auch eine Rolle bei der Proliferationskontrolle und Zelladhäsion. Über direkte Interaktionspartner ist bisher nur wenig bekannt, allerdings sind die Interaktionen des hGBP1 bei Ausbildung der homo-dimeren Formen in Lösung und bei der Ausbildung eines Polymers bereits nachgewiesen worden. In der Publikation geht es um die möglichen Strukturen dieses Enzyms in Lösung, die in einem dynamischen Gleichgewicht nebeneinander vorliegen und die Bildung der Dimere und Polymere ermöglichen. Die dramatische Erhöhung der zellulären Konzentrationen von hGBP1 nach Interferon-Stimulation der Zelle hat offensichtlich mit der Aktivierung dieses Proteins zu tun, die auch zur Verschiebung des Gleichgewichts zugunsten dimerer und oligomerer Formen des Proteins führt. Vor allem der Mechanismus der Oligomerbildung kann mit Hilfe der verschiedenen Konformationen des Proteins in Lösung besser verstanden werden und die Assemblierung oligomerer Spezies kann auf molekularer Ebene nachvollzogen werden.

Cord Bertram, Wei Fang, Phillipp Pedevilla, Angelos Michaelides, and Karina Morgenstern
Nano Lett. **2019**, *19*, 3049-3056.

Anomalous Low Barrier for Water Dimer Diffusion on Cu(111)

We reported water diffusion, dimer formation, and dimer diffusion on Cu(111). Copper is chosen as a substrate because of its importance as a catalyst for reactions including water (e.g., in water splitting and water–gas shift reactions, further processes for which the kinetics of water is very important). To reveal the microscopic diffusion mechanism of the monomer and the hydrogen-bonded dimer, we investigated the diffusion of D₂O monomers and dimers on Cu(111) between 23 and 29 K by time-lapse scanning tunneling microscopy (STM). Both species diffuse between on-top sites of the substrate with an almost negligible difference in the diffusion barrier as shown by both experiment and density functional theory (DFT) calculations. Our combined study reveals that despite very different monomer and dimer adsorption energies the diffusion barriers are equivalent because of the role played by the hydrogen bond in the dimer diffusion process. The dominant dimer diffusion mechanism is different from what was previously suggested on Pd(111) and does not require quantum tunneling for rapid dimer diffusion. Thus, fast dimer diffusion should also be valid at higher temperatures, in particular, those relevant to ice formation and the above-mentioned reactions.

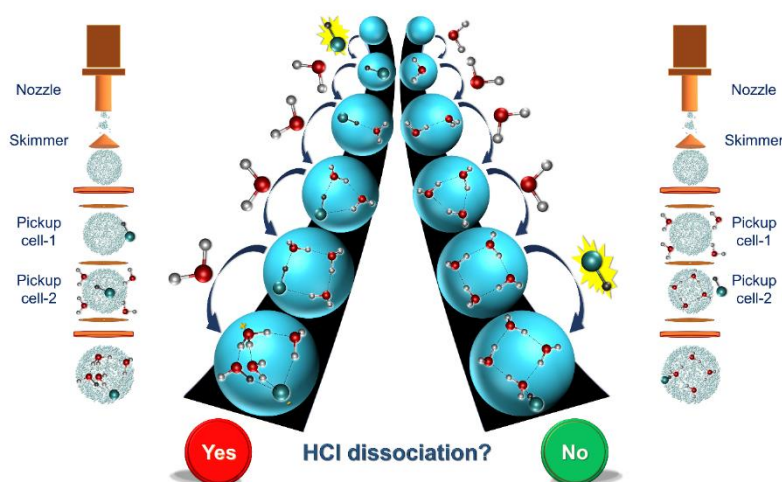


Wir berichteten über Wasserdiffusion, Dimerbildung und Dimerdiffusion auf Cu (111). Kupfer wird wegen seiner Bedeutung als Katalysator für Reaktionen einschließlich Wasser als Substrat gewählt (z. B. bei Wasserspalt- und Wassergas-Shift-Reaktionen, für die die Kinetik von Wasser von großer Bedeutung ist). Um den mikroskopischen Diffusionsmechanismus des Monomers und des wasserstoffgebundenen Dimers aufzudecken, untersuchten wir die Diffusion von D₂O-Monomeren und -Dimeren auf Cu (111) zwischen 23 und 29 K mittels Zeitraffer-Rastertunnelmikroskopie (STM). Beide Spezies diffundierten zwischen den oberen Stellen des Substrats mit einem fast vernachlässigbaren Unterschied in der Diffusionsbarriere, wie sowohl durch experimentelle als auch durch Dichtefunktionaltheorie (DFT) -Berechnungen gezeigt wurde. Unsere kombinierte Studie zeigt, dass trotz sehr unterschiedlicher Monomer- und Dimeradsorptionsenergien die Diffusionsbarrieren aufgrund der Rolle der Wasserstoffbindung im Dimerdiffusionsprozess gleichwertig sind. Der dominante Dimerdiffusionsmechanismus unterscheidet sich von dem, was zuvor für Pd (111) vorgeschlagen wurde, und erfordert kein Quantentunneln für eine schnelle Dimerdiffusion. Daher sollte eine schnelle Dimerdiffusion auch bei höheren Temperaturen gelten, insbesondere solchen, die für die Eisbildung und die oben genannten Reaktionen relevant sind.

D. Mani, R. Pérez de Tudela, R. Schwan, N. Pal, S. Körning, H. Forbert, B. Redlich, A. F. G. van der Meer, G. Schwaab, D. Marx, M. Havenith, *Science Advances* **2019**, 5, eaav8179.

Acid solvation versus dissociation at “stardust conditions”: Reaction sequence matters

Chemical reactions at “stardust conditions” are of fundamental importance to primordial molecular evolution. We studied reactions in ultracold helium nanodroplets (near the absolute zero) to mimic these conditions in the laboratory. Our joint experimental/theoretical study showed that HCl dissociation is highly sensitive to the sequence in which molecular aggregation takes place. The dissociation of HCl occurs readily upon stepwise microsolvation with water molecules, whereas no dissociation is found when HCl interacts with preexisting water clusters. These findings unveil that the fundamental question of whether acid dissociation and any subsequent acid/base chemistry can take place at ultralow temperatures does not have a simple “yes” or “no” answer. It is expected that this discovery is also a general feature of chemical reactions at ultracold conditions: Sequence matters!



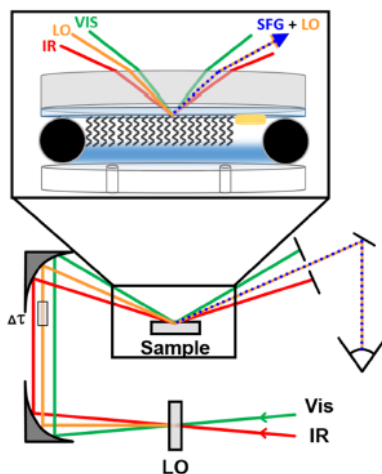
Two different pathways for the aggregation of $\text{HCl}(\text{H}_2\text{O})_4$ clusters in helium nanodroplets at ultracold temperatures: (Left) The first HCl and, subsequently, four water molecules are picked up, yielding aggregation-induced dissociation of HCl to form the smallest droplet of acid; (Right) The first four water molecules aggregate to form a cyclic water tetramer, and upon subsequent addition of one HCl molecule, the HCl is found to remain undissociated.

Chemische Reaktionen unter “Sternenstaub-Bedingungen” sind für die ursprüngliche molekulare Evolution von grundlegender Bedeutung. Wir untersuchten Reaktionen in ultrakalten Helium-Nanotropfchen (nahe dem absoluten Nullpunkt), um diese Bedingungen im Labor nachzuahmen. Unsere gemeinsame experimentelle/theoretische Studie zeigte, dass die HCl-Dissoziation sehr empfindlich auf die Reihenfolge ist, in der die Molekülaggregation stattfindet. Die Dissoziation von HCl tritt leicht bei schrittweiser Mikrosolvatisierung mit Wassermolekülen auf, wohingegen keine Dissoziation gefunden wird, wenn HCl mit bereits vorhandenen Wasserclustern in Wechselwirkung tritt. Diese Ergebnisse zeigen, dass die grundlegende Frage, ob die Säuredissoziation und die anschließende Säure-Base-Chemie bei ultrakalten Temperaturen stattfinden können, nicht einfach mit “ja” oder “nein” beantwortet werden kann. Es wird erwartet, dass diese Entdeckung auch ein allgemeines Merkmal chemischer Reaktionen unter ultrakalten Bedingungen ist: Auf die Reihenfolge kommt es an!

S. Sanders, P. B. Petersen, *Journal of Chemical Physics* **2019**, 150, 204708.

Heterodyne-detected sum frequency generation of water at surfaces with varying hydrophobicity

Most chemical processes in nature and technical applications take place at an aqueous interface. Here the properties of water are changed due to the restriction of the hydrogen-bonded network. But the properties of interfacial water and how this depend on the surface chemistry is not well understood. This paper initiates a systematical investigation of the hydrogen-bonded structure of interfacial water at the buried solid-water interface as a function of the surface chemistry. Self-assembled monolayers are used to make hydrophobic, hydrophilic, and mixed surfaces and the corresponding hydrogen-bonded structure of water in contact with these surfaces is characterized with surface-specific nonlinear infrared spectroscopy.



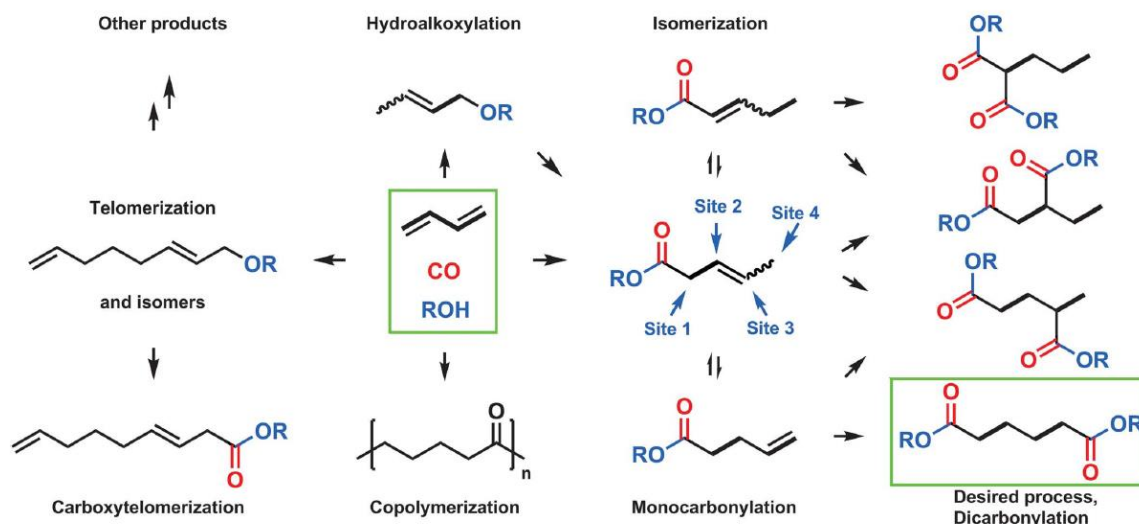
Surface-specific nonlinear infrared spectroscopy is used to characterize the structure of interfacial water as a function of the surface chemistry.

Die meisten chemischen Prozesse in der Natur und in technischen Anwendungen finden an einer wässrigen Grenzfläche statt. Hier werden die Eigenschaften des Wassers durch die Einschränkung des wasserstoffgebundenen Netzwerks verändert. Jedoch sind die Eigenschaften von Wasser an der Grenzfläche und wie diese von der Oberflächenchemie abhängen nicht gut verstanden. Diese Arbeit leitet eine systematische Untersuchung der wasserstoffgebundenen Struktur von Grenzflächenwasser an der vergrabenen Fest-Wasser-Grenzfläche in Abhängigkeit von der Oberflächenchemie ein. Selbstorganisierte Monoschichten werden zur Herstellung hydrophober, hydrophiler und gemischter Oberflächen verwendet, und die entsprechende wasserstoffgebundene Struktur von Wasser in Kontakt mit diesen Oberflächen wird mit oberflächenspezifischer nichtlinearer Infrarotspektroskopie charakterisiert.

J. Yang, J. Liu, H. Neumann, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Science* **2019**, 366, 1514.

Direct synthesis of adipic acid esters via palladium catalyzed carbonylation of 1,3-dienes

The direct carbonylation of 1,3-butadiene is one of the major challenges in industrial organic chemistry. In this work, a successful direct synthesis of diesters of adipic acid from butadiene is reported for the first time. Adipates are produced annually on a scale of several million tonnes and serve as starting materials for the manufacture of numerous products such as plasticisers, perfumes, lubricants, solvents, various active pharmaceutical ingredients and, above all, nylon. The key was the development of a bidentate phosphine ligand that enabled the palladium-based catalyzed reaction.



Reaction network involved in synthesis of adipates from 1,3-butadiene.

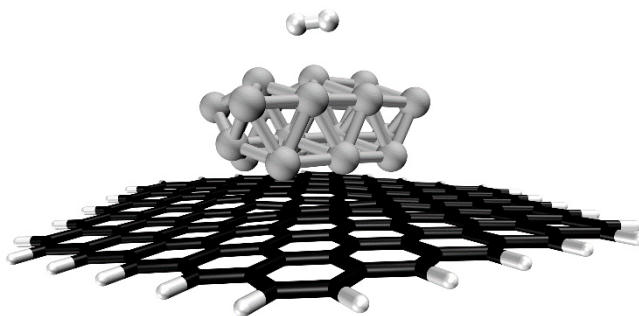
Die direkte Carbonylierung von 1,3-Butadien gehört zu den großen Herausforderungen der industriellen organischen Chemie. In dieser Arbeit wird erstmalig über eine erfolgreiche direkte Synthese von Diestern der Adipinsäure aus Butadien berichtet. Adipate werden jährlich im Maßstab von mehreren Millionen Tonnen produziert und dienen als Ausgangsstoffe für die Herstellung zahlreicher Produkte wie Weichmacher, Parfüms, Schmierstoffe, Lösungsmittel, verschiedene pharmazeutische Wirkstoffe und vor allem Nylon. Der Schlüssel war die Entwicklung eines bidentaten Phosphinliganden, der die Palladium-basierte katalytische Reaktion ermöglichte.

Prof. Dr. Christof Hättig
Chair of Theoretical Chemistry
Ruhr-Universität Bochum; D 44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-32-28082; Fax.: ++49-(0)234-3214045
Email: christof.haettig@ruhr-uni-bochum.de; <https://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/~christof.haettig/webpage/home.html>

L. Warczinski, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 21577-21587.

A quantum chemical study of hydrogen adsorption on carbon-supported palladium clusters

Hydrogenation is one of the industrial catalytic processes with the longest history and is among the most important processes in petrochemical and fine chemical industries. In spite of its long history and its high importance, the details of hydrogenation are still not fully understood. A key step for achieving better insight into catalytic hydrogenation reactions is to understand the process of hydrogen adsorption on the catalyst. Our article reports on a computational study of hydrogen adsorption on carbon-supported palladium clusters, which are nowadays one of the most common catalysts in industrial applications. We are able to provide an in-depth insight into metal-support interactions and to contribute to a deeper understanding of hydrogenation reactions.



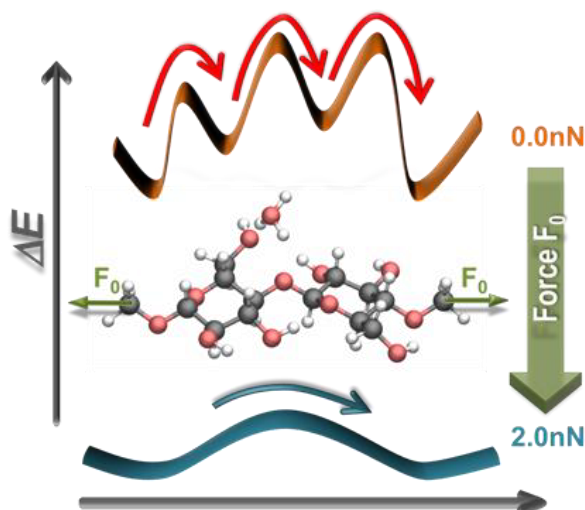
Molecular adsorbed hydrogen on a carbon-supported Pd₂₁ cluster.

Die Hydrierung ist einer der industriellen katalytischen Prozesse mit der längsten Historie und einer der wichtigsten Prozesse in der petrochemischen und Feinchemikalien-Industrie. Trotz ihrer langen Historie und ihrer großen Bedeutung sind die Details der Hydrierung immer noch nicht vollends verstanden. Ein entscheidender Schritt hin zu einem besseren Verständnis katalytischer Hydrierungsreaktionen ist die Aufklärung der Wasserstoff-Adsorption auf dem Katalysator. Unser Artikel zeigt eine Computerstudie der Wasserstoff-Adsorption auf Kohlenstoff-geträgerten Palladium Clustern, welche heutzutage unter den am häufigsten gebrauchten Katalysatoren in der Industrie zu finden sind. Es ist uns möglich einen detaillierten Eindruck in Metall-Träger-Wechselwirkungen zu gewähren und zu einem tieferen Verständnis von Hydrierungsreaktionen beizutragen.

S. Amirjalayer, H. Fuchs, and D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 5232-5235.

Understanding the Mechano-catalytic Conversion of Biomass:
A Low-Energy One-Step Reaction Mechanism by Applying Mechanical Force

On the way to establish biomass as a renewable and environmentally friendly source to cover the ever-increasing global demand on energy and chemicals, one great challenge is the efficient depolymerization of cellulose. Using ball-milling experiments, enhanced conversion rates have been discovered, thus opening a mechano-catalytic approach. Yet, understanding the impact of mechanical forces on acid-catalyzed cleavage of glycosidic bonds at the molecular level is still missing. We contribute such fundamental insights based on atomistic modeling and discovered that mechanically stressing the macromolecular backbone radically changes the depolymerization pathway from a complex high-barrier reaction upon thermal activation to a low-energy single-step mechano-catalytic process.



Die Depolymerisation von Cellulose ist eine große Herausforderung um Biomasse als Quelle für Energie und Chemikalien zu etablieren. In Kugelmühlenexperimenten wurden bereits erhöhte Konversionsraten und damit ein mechanochemischer Zugang entdeckt. Allerdings ist ein molekulares Verständnis des Einflusses mechanischer Kräfte auf die säurekatalysierte Zerlegung glykosidischer Bindungen nicht vorhanden. Wir liefern solche fundamentalen Erkenntnisse basierend auf atomistischer Modellierung und finden, dass mechanische Kräfte den Depolymerisationsweg von einem komplexen Prozess mit hohen Reaktionsbarrieren zu einem niederenergetischen mechanokatalytischen Einschnittprozess ändern.

A. Khedkar, M. Roemelt *Journal of Chemical Theory and Computation* **2019**, *15*, 3522-3536.

Active Space Selection Based on Natural Orbital Occupation Numbers From N-Electron Valence Perturbation Theory

Multireference electronic structure methods allow for an accurate description of molecular systems with a complex electronic structure on a physically sound basis. A key feature of these methods is the active orbital space that ideally comprises all strongly correlated electrons. However, in many cases it is difficult to decide *a priori* what orbitals are suitable candidates. In this work we present a robust and reliable active space selection scheme based on first order n-electron valence perturbation theory named ASS1ST. It provides a means to determine strongly correlated electrons *a priori* at a reasonable computational cost. Initial test calculations demonstrate the capabilities of the method for a variety of molecules including transition metal clusters and organic chromophores.

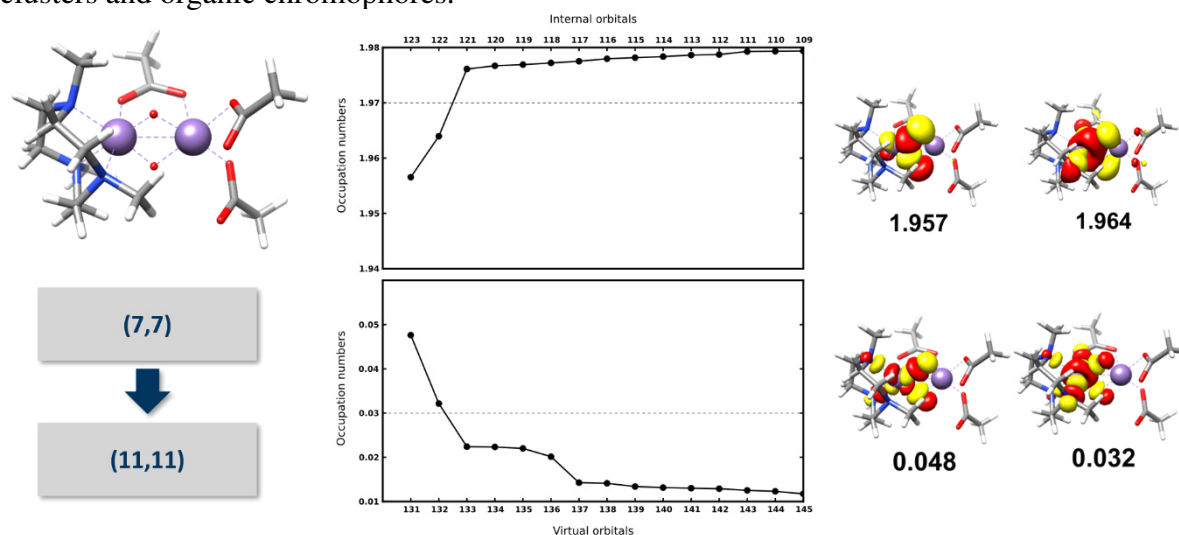


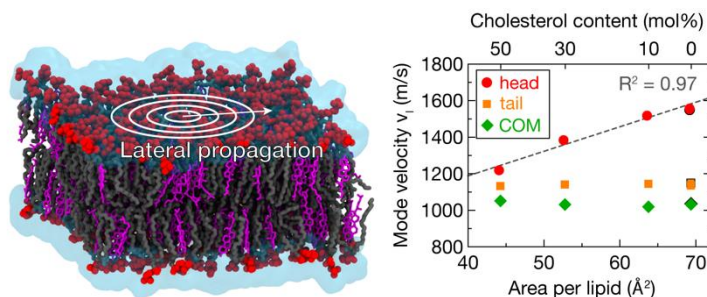
Figure 1. Active space evolution according to ASS1ST for a biomimetic mixed-valence Mn dimer (top left). All quasi-natural orbitals with a natural orbital occupation number between user-defined thresholds are assigned to the active orbital space (middle).

Multireferenz-Methoden in der Elektronenstrukturtheorie erlauben eine genaue Beschreibung molekularer Systeme mit komplexer Elektronenstruktur auf einer fundierten physikalischen Basis. Eine zentrale Eigenschaft dieser Methoden ist der Raum der aktiven Orbitale, der idealerweise alle stark korrelierten Elektronen enthält. Allerdings ist es in vielen Fällen ohne den Einsatz von viel Rechenkapazität schwierig *a priori* zu entscheiden welche Elektronen diese Eigenschaft tatsächlich besitzen. Im Rahmen dieser Arbeit stellen wir mit ASS1ST eine robuste und verlässliche Methode zur Auswahl aktiver Orbitale vor, welche auf der ersten Ordnung der N-Elektronen Valenz Störungstheorie basiert. ASS1ST bietet die Möglichkeit, stark korrelierte Elektronen mit moderatem Aufwand zu bestimmen. Erste Testergebnisse demonstrieren die Anwendbarkeit der Methode für eine Reihe von verschiedenen Molekülen einschließlich Übergangsmetall-Clustern und organischen Chromophoren.

C. Päslock, J. C. Smith, M. Heyden, L. Schäfer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 10370-10376.

Hydration-mediated stiffening of collective membrane dynamics by cholesterol

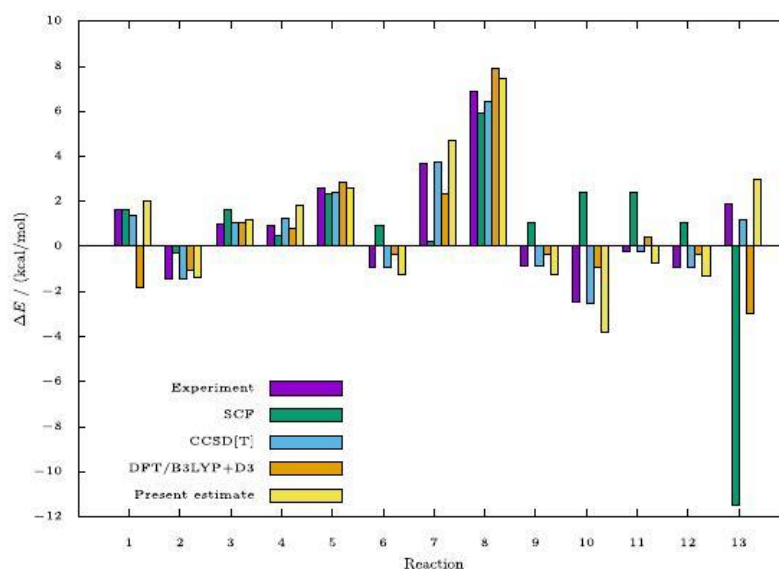
The collective behaviour of individual lipid molecules determines the properties of phospholipid membranes. However, the collective molecular motions often remain challenging to characterise at the desired spatial and temporal resolution. We studied collective vibrational motion on picosecond time scales in dioleoylphosphatidylcholine (DOPC) lipid bilayers with varying cholesterol content using all-atom molecular dynamics (MD) simulations. Cholesterol is found to not only laterally compact the lipid bilayer, but also to change the velocity of longitudinal density fluctuations propagating in the plane of the membrane. Cholesterol-induced reduction of the area per lipid alters the collective dynamics of the lipid headgroups, but not of the lipid tails. The introduction of cholesterol reduces the number of water molecules interacting with the lipid headgroups, leading to a decrease in the velocity of the laterally-propagating sound mode. Thus, the stiffening effect of cholesterol is found to be indirect: decreasing the area per lipid weakens the interactions between the lipid headgroups and water. The collective modes characterised in this work can enable the membrane to dissipate excess energy and thus maintain its structural integrity, e.g., under mechanical stress.



L. Warczinski, R. Franke, V. Staemmler, *Journal of Computational Chemistry* **2019**, *40*, 2491-2500.

ESCAPE: A Novel Approach for a Fast Estimation of Dynamic Correlation Energies:
Application to Large Organic Molecules

Accurate values for relative energies of different isomers or conformers as well as for reaction enthalpies are frequently needed in industrial research. Very often, they are not available from experimental sources, and the calculation with highly accurate traditional quantum chemical methods, for instance with CCSD(T), is too expensive. We have developed a fast and reliable estimate based on carefully calculated pair correlation energies of localized molecular orbitals for a test set of 41 aliphatic organic molecules. They are then parametrized to reasonable functional forms. The application to a medium-large test set, to 13 isomerization energies, to the three lowest isomers of C₆₀ and several alcohols shows that we can reproduce experimental as well as accurate theoretical results within chemical accuracy, that means with a mean absolute error (MAE) of less than 1.0 kcal/mol.



Energy differences for 13 isomerization reactions, calculated with different methods.

Genaue Werte für relative Energien unterschiedlicher Isomere oder Konformere und auch für Reaktionsenthalpien werden häufig in der industriellen Forschung benötigt. Sehr oft sind sie experimentell nicht zugänglich und die Berechnung mit sehr genauen traditionellen quantenchemischen Methoden, etwa mit CCSD(T), ist zu aufwändig. Wir haben eine schnelle und sehr genaue Methode zur Energieabschätzung entwickelt, die Paarkorrelationsenergien lokalisierter Molekülorbitale verwendet, die für einen Testsatz von 41 aliphatischen Kohlenwasserstoffen sorgfältig berechnet und dann geeignet parametrisiert wurden. Die Anwendung auf einen mittelgroßen Testsatz, auf 13 Isomerisierungsenergien, auf die drei tiefsten Isomere von C₆₀ und auf einige Alkohole zeigt, dass wir experimentelle Werte und genaue theoretische Resultate mit chemischer Genauigkeit reproduzieren können, also mit einem mittleren absoluten Fehler (MAE) von weniger als 1,0 kcal/mol.

List of Publications 2019

Analytical Chemistry I

- H. B. Aiyappa, J. Masa, C. Andronesu, M. Muhler, R. A. Fischer, W. Schuhmann, *Small Methods* **2019**, 3, 1800415.
- H. B. Aiyappa, P. Wilde, T. Quast, J. Masa, C. Andronesu, Y.-T. Chen, M. Muhler, R. A. Fischer, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie International Edition* **2019**, 58, 8927–8931.
- A. Alinezhad, L. Gloag, T. M. Benedetti, S. Cheong, R. F. Webster, M. Roelsgaard, B. Iversen, W. Schuhmann, J. J. Gooding, R. D. Tilley, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 16202–16207.
- B. Alkan, S. Cychy, S. Varhade, M. Muhler, C. Schulz, W. Schuhmann, H. Wiggers, C. Andronesu, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 4266–4274.
- S. Alsaoub, F. Conzuelo, S. Gounel, N. Mano, W. Schuhmann, A. Ruff, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 2080–2087.
- H. Antoni, D. M. Morales, J. Bitzer, Q. Fu, Y.-T. Chen, J. Masa, W. Kleist, W. Schuhmann, M. Muhler, *Journal of Catalysis* **2019**, 374, 335–344.
- S. Barwe, C. Andronesu, R. Engels, F. Conzuelo, S. Seisel, P. Wilde, Y.-T. Chen, J. Masa, W. Schuhmann, *Electrochimica Acta* **2019**, 297, 1042–1051.
- D. Buesen, T. Hoefer, H. Zhang, N. Plumeré, *Faraday discussions* **2019**, 215, 39.
- S. Chu, S. Hong, J. Masa, X. Li, Z. Sun, *Chemical communications (Cambridge, England)* **2019**, 55, 12380
- S. Cychy, D. Hiltrop, C. Andronesu, M. Muhler, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **2019**, 91, 14323–14331.
- N. Diab, D. M. Morales, C. Andronesu, M. Masoud, W. Schuhmann, *Sensors and Actuators B: Chemical* **2019**, 285, 17–23.
- B. Gleede, T. Yamamoto, K. Nakahara, A. Botz, T. Graßl, R. Neuber, T. Matthée, Y. Einaga, W. Schuhmann, S. R. Waldvogel, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 2771–2776.
- R. Gutkowski, J. Masa, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **2019**, 31, 1500–1506.
- Jambrec, Y. U. Kayran, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **2019**, 31, 1943–1951.
- J. R. C. Junqueira, T. Bobrowski, O. A. Krysiak, R. Gutkowski, W. Schuhmann, *ChemCatChem* **2019**, 11, 6417–6424.
- M. A. Kazakova, D. M. Morales, C. Andronesu, K. Elumeeva, A. G. Selyutin, A. V. Ishchenko, G. V. Golubtsov, S. Dieckhöfer, W. Schuhmann, J. Masa, *Catalysis Today* **2019**.

- O. A. Krysiak, G. Cichowicz, F. Conzuelo, M. K. Cyranski, J. Augustynski, *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, **2020**, 234, 633.
- H. Li, D. Buesen, S. Dementin, C. Léger, V. Fourmond, N. Plumeré, *Journal of the American Chemical Society* **2019**, 141, 16734.
- J. Lin, D. Weixler, S. Daboss, G. M. Seibold, C. Andronescu, W. Schuhmann, C. Kranz, *Talanta* **2019**, 205, 120083.
- H. Liu, J. Cheng, Z. Lu, X. Huang, Y. Zhu, X. Zhao, T. Wang, J. Masa, X. Chen, *Electrochimica Acta* **2019**, 312, 22.
- T. Löffler, J. Clausmeyer, P. Wilde, K. Tschulik, W. Schuhmann, E. Ventosa, *Nano Energy* **2019**, 57, 827–834.
- T. Löffler, A. Savan, A. Garzón-Manjón, M. Meischein, C. Scheu, A. Ludwig, W. Schuhmann, *ACS Energy Lett.* **2019**, 4, 1206–1214.
- F. Madzharova, D. Öhl, J. Junqueira, W. Schuhmann, J. Kneipp, *Advanced Optical Materials* **2019**, 7, 1900650.
- F. Mariani, F. Conzuelo, T. Cramer, I. Gualandi, L. Possanzini, M. Tessarolo, B. Fraboni, W. Schuhmann, E. Scavetta, *Small* **2019**, 15, 1902534.
- N. Marković, F. Conzuelo, J. Szczesny, M. Begoña González García, D. Hernández Santos, A. Ruff, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **2019**, 31, 217–221.
- J. Masa, C. Andronescu, H. Antoni, I. Sinev, S. Seisel, K. Elumeeva, S. Barwe, S. Marti-Sanchez, J. Arbiol, B. Roldan Cuenya, M. Muhler, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 235–240.
- J. Masa, S. Barwe, C. Andronescu, W. Schuhmann, *Chemistry – A European Journal* **2019**, 25, 158–166.
- J. Masa, S. Piontek, P. Wilde, H. Antoni, T. Eckhard, Y.-T. Chen, M. Muhler, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Advanced Energy Materials* **2019**, 9, 1900796.
- J. Masa, W. Schuhmann, *ChemCatChem* **2019**, 11, 5842–5854.
- D. Medina, S. Barwe, J. Masa, S. Seisel, W. Schuhmann, C. Andronescu, *Electrochimica Acta* **2019**, 318, 281–289.
- D. M. Morales, S. Barwe, E. Vasile, C. Andronescu, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **2019**, 20, 3030–3036.
- D. M. Morales, M. A. Kazakova, S. Dieckhöfer, A. G. Selyutin, G. V. Golubtsov, W. Schuhmann, J. Masa, *Adv. Funct. Mater.* **2020**, 30, 1905992.
- R.-E. Munteanu, R. Ye, C. Polonschii, A. Ruff, M. Gheorghiu, E. Gheorghiu, R. Boukherroub, W. Schuhmann, S. Melinte, S. Gáspár, *Scientific Reports* **2019**, 9, 15196.
- P. B. O'Mara, P. Wilde, T. M. Benedetti, C. Andronescu, S. Cheong, J. J. Gooding, R. D. Tilley, W. Schuhmann, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 14093–14097.

- D. Öhl, D. Franzen, M. Paulisch, S. Dieckhöfer, S. Barwe, C. Andronesu, I. Manke, T. Turek, W. Schuhmann, *ChemSusChem* **2019**, 12, 2732–2739.
- H. Pan, D. Wu, X. Huang, K. Xie, B. He, Z. Lu, P. Liu, J. Cheng, X. Zhao, J. Masa et al., *J. Electrochem. Soc.* **2019**, 166, F479–F486.
- M. Riedel, J. Wersig, A. Ruff, W. Schuhmann, A. Zouni, F. Lisdat, *Angewandte Chemie International Edition* **2019**, 58, 801–805.
- M. Röhe, A. Botz, D. Franzen, F. Kubannek, B. Ellendorff, D. Öhl, W. Schuhmann, T. Turek, U. Krewer, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 5671–5681.
- A. Ruff, F. Conzuelo, W. Schuhmann, *Nature Catalysis* **2020**, 3, 214–224.
- A. Ruff, S. Janke, J. Szczesny, S. Alsaoub, I. Ruff, W. Lubitz, W. Schuhmann, *ACS Appl. Energy Mater.* **2019**, 2, 4, 2921–2929.
- S. Santos, F. Conzuelo, V. Eßmann, M. Bertotti, W. Schuhmann, *Analytica Chimica Acta* **2019**, 1087, 36–43.
- S. J. Sung, J. H. Kim, S. H. Gihm, J. Park, Y. S. Cho, S. J. Yang, C. R. Park, *ACS Appl. Energy Mater.* **2019**, 2, 8826.
- T. Tarnev, H. B. Aiyappa, A. Botz, T. Erichsen, A. Ernst, C. Andronesu, W. Schuhmann, *Angewandte Chemie International Edition* **2019**, 58, 14265–14269.
- S. Teanphonkrang, A. Ernst, S. Janke, P. Chaiyen, J. Sucharitakul, W. Suginta, P. Khunkaewla, W. Schuhmann, A. Schult, A. Ruff, *ACS Sens.*, **2019**, 4, 5, 1270–1278.
- Y. Temerk, H. Ibrahim, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **2019**, 31, 1095–1103.
- D. Wintrich, D. Öhl, S. Barwe, A. Ganassin, S. Möller, T. Tarnev, A. Botz, A. Ruff, J. Clausmeyer, J. Masa, W. Schuhmann, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 3108–3112.
- A. Wolf, J.-J. Cid, E. Moulin, F. Niess, G. Du, A. Goujon, E. Busseron, A. Ruff, S. Ludwigs, N. Giuseppone, *Eur. J. Org. Chem.*, **2019**, 3421–3432.
- A. Wütscher, T. Eckhard, D. Hiltrop, K. Lotz, W. Schuhmann, C. Andronesu, M. Muhler, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 514–521.
- M. Zhang, T.-S. Wu, S. Hong, Q. Fan, Y.-L. Soo, J. Masa, J. Qiu, Z. Sun, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2019**, 7, 15030.
- M. Zhang, H. Tao, Y. Liu, C. Yan, S. Hong, J. Masa, A. W. Robertson, S. Liu, J. Qiu, Z. Sun, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2019**, 7, 3434.
- F. Zhao, T. Bobrowski, A. Ruff, V. Hartmann, M. M. Nowaczyk, M. Rögner, F. Conzuelo, W. Schuhmann, *Electrochimica Acta* **2019**, 306, 660–666.
- F. Zhao, A. Ruff, M. Rögner, W. Schuhmann, F. Conzuelo, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 13, 5102–5106.
- F. Zhao, P. Wang, A. Ruff, V. Hartmann, S. Zacarias, I. A. C. Pereira, M. M. Nowaczyk, M. Rögner, F. Conzuelo, W. Schuhmann, *Energy Environ. Sci.* **2019**, 12, 3133–3143.

Analytical Chemistry II

- A. Abuayyash *et al.*, *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine* **2020**, *24*, 102126.
- M. Breisch, K. Loza, K. Pappert, A. Rostek, C. Rurainsky, K. Tschulik, M. Heggen, M. Epple, J. C. Tiller, T. A. Schildhauer, *Nanotechnology* **2020**, *31*, 055703.
- A. El Arrassi, Z. Liu, M. V. Evers, N. Blanc, G. Bendt, S. Saddeler, D. Tetzlaff, D. Pohl, C. Damm, S. Schulz, K. Tschulik, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*(23), 9197-9201.
- M. V. Evers, M. Bernal, B. Roldan Cuenya, K. Tschulik, *Angewandte Chemie* **2019**, *131*(24), 8305-8309.
- M. V. Evers, M. Bernal, B. Roldan Cuenya, K. Tschulik, *Angewandte Chemie Int. Ed.* **2019**, *58*(24), 8221-8225.
- K. Wonner, M. V. Evers, K. Tschulik, *Electrochimica Acta* **2019**, *301*, 458-464.
- K. Wonner, C. Rurainsky, K. Tschulik, *Front. Chem.* **2020**, *7*, 912.

Biochemistry I

- E. P. Barykin, A. I. Garifulina, E. V. Kravkova, E. N. Spirova, A. A. Anashkina, A. A. Adzhubei, I. V. Shelukhina, I. E. Kasheverov, V. A. Mitkevich, S. A. Kozin, M. Hollmann, V. I. Tsetlin, A. A. Makarov, *Cells* **2019**, *8*, 771.
- A. Bliznyuk, M. Hollmann, Y. Grossman, *Front. Physiol.* **2019**, *10*, 1234.
- A. Holz, F. Mülsch, M. K. Schwarz, M. Hollmann, M. D. Döbrösy, V. A. Coenen, M. Bartos, C. Normann, K. Biber, D. van Calker, T. Serchov, *Neuron* **2019**, *104*, 338-352.e7.
- E. Jones, K. R. Tovar, A. Goehring, F. Jalali-Yazdi, N. J. Okada, E. Gouaux, G. L. Westbrook, *Science Translational Medicine* **2019**, *11*, eaaw0044.
- J. A. Schreiber, D. Schepmann, B. Frehland, S. Thum, M. Datunashvili, T. Budde, M. Hollmann, N. Strutz-Seebohm, B. Wunsch, G. Seebohm, *Communications Biology* **2019**, *2*, 1–14.
- J. B. H. Wilke, H. Ehrenreich, M. Hollmann, *Neuroforum* **2019**, *25*, 89–98.

Biochemistry II

- N. Berger, L. J. B. Wollny, P. Sokkar, S. Mittal, J. Mieres-Perez, R. Stoll, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, *Chemphyschem* **2019**, *20*, 1664–1670.
- H. Bukhari, T. Müller, *Trends Cell Biol.* **2019**, *29*, 912.
- M. Dicks, G. Kock, B. Kohl, X. Zhong, S. Pütz, R. Heumann, K. S. Erdmann, R. Stoll, *BMC Mol Cell Biol* **2019**, *20*, 23.

- P. G. Dingeldein, M. J. Lindberg, J. Ådén, X. Zhong, R. Stoll, G. Gröbner, *Protein Expr. Purif.* **2019**, *158*, 20–26.
- A. Dreger, P. Wonner, E. Engelage, S. M. Walter, R. Stoll, S. M. Huber, *Chem. Commun.* **2019**, *55*, 8262–8265.
- T. Günther-Pomorski, A. Herrmann, *Encyclopedia of Biophysics*, **2019**.
- B. Kohl, V. Granitzka, A. Singh, P. Quintas, E. Xiromeriti, F. Mörtel, P. E. Wright, G. Kroon, H. J. Dyson, R. Stoll, *Protein Sci.* **2019**, *28*, 2064–2072.
- R. M. Kühnel, M. G. Junyent, I. L. Jørgensen, G. C. Kemmer, J. Schiller, M. B. Palmgren, B. H. Justesen, T. Günther-Pomorski, *Analyst*, **2019**, *144*, 3030–3037.
- X. Liu, T. Günther-Pomorski, J. Liesche, *Bio-Protocol*, **2019**, *9*, 16.
- X. Liu, J. Li, H. Zhao, B. Liu, T. Günther-Pomorski, S. Chen, J. Liesche, *The Journal of Cell Biology*, **2019**, *218*, 4, 1407–1420.
- S. Maric, T. K. Lind, M. R. Raida, E. Bengtsson, G. N. Fredrikson, S. Rogers, M. Moulin, M. Haertlein, V. T. Forsyth, M. R. Wenk, T. Günther-Pomorski, T. Arnebrant, Reidar, L. Cárdenas, M. Cárdenas, *Sci Rep*, **2019**, *9*, 7591.
- M. S. Nissen, T. A. Langan, R. Reeves, *J. Biol. Chem.* **1991**, *266*, 19945–19952.
- D. Paliga, F. Raudzus, S.H. Leppla *et al.*, *Mol Neurobiol*, **2019**, *56*, 3393–3403.
- J. Rizzo, L.D. Stanchev, V. K. A. da Silva, L. Nimrichter, T. Günther-Pomorski, M. L. Rodrigues, *Computational and Structural Biotechnology Journal*, **2019**, *17*, 1278–1289.
- H. Schöneborn, F. Raudzus, E. Secret, N. Otten, A. Michel, J. Fresnais, C. Ménager, J.-M. Siaugue, H. Zaehres, I. D. Dietzel, R. Heumann, *Journal of Functional Biomaterials*, **2019**, *10*, 3, 32.
- J. Scott, D. Hidalgo-Mazzei, R. Strawbridge *et al.*, *Int. J. Bipolar Disord.* **2019**, *7*, 20.
- M. Sørensen, H. W. Holen, J. T. Pedersen, H. J. Martens, D. Silvestro, L. D. Stanchev, S. R. Costa, T. Günther-Pomorski, R. L. L. Marqués, M. Palmgren, *Molecular Biology of the Cell*, **2019**, *30*, 9, 1069–1084.
- S. M. Sundaram, D. Safina, A. Ehrkamp, A. Faissner, R. Heumann and I. D. Dietzel, *Neurochemistry International*, **2019**, *128*, 163–174.
- S. M. Sundaram, P. Garg, *Mov Disord*, **2019**, *34*, 1479.
- L. Theorin, K. Faxen, D. M. Sørensen, R. Migotti, G. Dittmar, J. Schiller, D. L. Daleke, M. Palmgren, R. L. L. Marqués, T. Günther-Pomorski, *Biochemical Journal*, **2019**, *476* (5), 783–794.

Didactics of Chemistry

- M. Emden, M. Ropohl, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **2019**, 30 (171), 7-11.
- K. Kremer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **2019**, 30 (172), 14-18.
- K. Sommer, et al., *Unterricht Chemie* **2019**, 30 (170), 20-31.
- K. Sommer, C. Toschka, H. Steff, J. Wirth, *ZfDN* **2019**, 25, 259-272.
- K. Sommer, S. Zellmer, B. Schlüter, *Unterricht Chemie* **2019**, 30 (171), 24-27.
- C. Toschka, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **2019**, 30 (171), 16-23.

EPR Spectroscopy

- E. Bordignon, S. Kucher, Y. Polyhach, *Methods Mol Biol.* **2019**, 2003, 493-528.
- S. Bleicken, T. E. Assafa, H. Zhang, C. Elsner, I. Ritsch, M. Pink, S. Rajca, G. Jeschke, A. Rajca, E. Bordignon, *ChemistryOpen* **2019**, 8, 1057.
- A. J. Hutter, M. H. Timachi, L. M. Hürlimann *et al.*, *Nat Commun* **2019**, 10, 2260.
- M. Teucher, H. Zhang, V. Bader *et al.*, *Sci Rep* **2019**, 9, 13013.

Industrial Chemistry

- H. B. Aiyappa, B. Harshitha, P. Wilde, T. Quast, J. Masa, C. Andronescu, Y.-T. Chen, M. Muhler, R. A. Fischer, W. Schuhmann, *Journal of Catalysis*, **2019**, 374, 335-344.
- H. B. Aiyappa, P. Wilde, T. Quast, J. Masa, C. Andronescu, Y.-T. Chen, M. Muhler, R. A. Fischer, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 8927.
- B. Alkan, S. Cychy, S. Varhade, M. Muhler, C. Schulz, W. Schuhmann, H. Wiggers, C. Andronescu, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 4266.
- S. Anke, G. Bendt, I. Sinev, H. Hajiyani, H. Antoni, I. Zegkinoglou, H. Jeon, R. Pentcheva, B.R. Cuenya, S. Schulz, M. Muhler, *ACS Catal.* **2019**, 9, 7, 5974–5985.
- B. Apicella, C. Russo, A. Ciajolo, L. Cortese, F. Cerciello, F. Stanzione, A. Wuetscher, M. Muhler, O. Senneca, *Fuel*, **2019**, 241, 264-272.
- S. Cychy, D. Hiltrop, C. Andronescu, M. Muhler, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **2019**, 91 (22), 14323–14331.
- P. Guo, Q. Fu, C. Yildiz, Y. Chen, K. Ollegott, C. Froese, W. Kleist, R. A. Fischer, Y. Wang, M. Muhler, B. Peng, *Catal. Sci. Technol.*, **2019**, 9, 3703-3710.
- Y. Hu, G. Zhao, Q. Pan, H. Wang, Z. Shen, B. Peng, G. W. Busser, X. Wang, M. Muhler, *ChemCatChem* **2019**, 11, 5139.
- K. Lotz, C. M. Berger, M. Muhler, *Energy Procedia*, **2019**, 158, 694-699.
- K. Lotz, A. Wütscher, H. Düdler, C.M. Berger, C. Russo, K. Mukherjee, G. Schwaab, M. Havenith, and M. Muhler, *ACS Omega*, **2019**, 4, 2, 4448–4460.

- J. Masa, S. Piontek, P. Wilde, H. Antoni, T. Eckhard, Y.-T. Chen, M. Muhler, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Adv. Energy Mater.* **2019**, 9, 1900796.
- J. Nebel, S. Schmidt, Q. Pan, K. Lotz, S. Kaluza, M. Muhler, *Chinese Journal of Catalysis*, **2019**, 40, 11, 1731-1740.
- K. Ollegott, N. Peters, H. Antoni, M. Muhler, *Control Sci. Technol.*, **2019**, 5, 378–391.
- T. Rath, A. Uhrich, A. Lüken, G. Zhao, A. Rittermeier, M. Muhler, *ChemSusChem* **2019**, 12, 2725.
- S. Reichenberger, G. Marzun, M. Muhler, S. Barcikowski, *ChemCatChem* **2019**, 11, 4489.
- O. Senneca, N. Vorobiev, A. Wütscher, F. Cerciello, S. Heuer, C. Wedler, R. Span, M. Schiemann, M. Muhler, V. Scherer, *Fuel*, **2019**, 238, 173-185.
- L. Shui, G. Zhang, B. Hu, X. Chen, M. Jin, G. Zhou, N. Li, M. Muhler, B. Peng, *Journal of Energy Chemistry*, **2019**, 36, 37-46.
- M. Smialkowski, D. Siegmund, K. Pellumbi, L. Hensgen, H. Antoni, M. Muhler, U.P. Apfel, *Chem. Commun.*, **2019**, 55, 8792-8795.
- Waffel, B. Alkan, Q. Fu, Y.-T. Chen, S. Schmidt, C. Schulz, H. Wiggers, M. Muhler, B. Peng, *ChemPlusChem* **2019**, 84, 1155.
- Hu, Yezi, G. Zhao, Q. Pan, H. Wang, Z. Shen, B. Peng, W. Busser, X. Wang, und M. Muhler, *Applied Catalysis A: General*, **2019**, 576, 47-53.
- G. Zhao, G. W. Busser, C. Froese, B. Hu, S.A. Bonke, A. Schnegg, Y. Ai, D. Wei, X. Wang, B. Peng, M. Muhler, *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, 10, 9, 2075–2080.
- G. Zhao, B. Hu, G.W. Busser, B. Peng, M. Muhler, *ChemSusChem* **2019**, 12, 2795.

Inorganic Chemistry I

- U.-P. Apfel, K. Suntharalingam, *Dalton Trans.* **2019**, 48, 5859.
- F. Battistin, D. Siegmund, G. Balducci, N. Metzler-Nolte, E. Alessio, *Dalton Trans.* **2019**, 48, 400.
- M. E. Casco, S. Kirchhoff, D. Leistenschneider, M. Rauche, E. Brunner, L. Borchardt, *Nanoscale* **2019**, 11, 4712–4718.
- M. E. Casco, E. Zhang, S. Grätz, S. Krause, V. Bon, D. Wallacher, N. Grimm, D. M. Többens, T. Hauß, L. Borchardt, *The Journal of Physical Chemistry C* **2019**, 123 (39), 24071-24079.
- I. M. Daubit, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* **2019**, 48, 13662.
- J. Duan, S. Mebs, K. Laun, F. Wittkamp, J. Heberle, T. Happe, E. Hofmann, U.-P. Apfel, M. Winkler, M. Senger, M. Haumann, S. T. Stripp, *ACS Catal.* **2019**, 9, 9140.

- D. D. Enkelmann, J. Handelsmann, C. Schauertec, K. Merz, *CrystEngComm*, **2019**, *21*, 2130-2134.
- J. Esselborn, L. Kertess, U.-P. Apfel, E. Hofmann, T. Happe, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 17721.
- K. J. Franz, N. Metzler-Nolte, *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 727.
- P. Gerschel, K. Warm, E. R. Farquhar, U. Englert, M. L. Reback, D. Siegmund, K. Ray, U.-P. Apfel, *Dalton Trans.* **2019**, *48*, 5923.
- S. Gonglach, S. Paul, M. Haas *et al.*, *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 3864.
- M. Graf, D. Siegmund, N. Metzler-Nolte, K. Sünkel, *Z. Anorg. Allg. Chemie* **2019**, *645*, 1068.
- M. Graf, D. Siegmund, N. Metzler-Nolte, K. Sünkel, H.-C. Böttcher, *Inorg. Chim. Acta* **2019**, *487*, 9.
- C. Huettner, D. Hagemann, E. Troschke, F. Hippauf, L. Borchardt, S. Oswald, T. Henle, S. Kaskel, *Langmuir* **2019**, *35*, 9721–9731.
- L. Iffland, A. Khedkar, A. Petuker, M. Lieb, F. Wittkamp, M. van Gastel, M. Roemelt, U.-P. Apfel, *Organometallics* **2019**, *38*, 289.
- D. Leistenschneider, K. Wegner, C. Eßbach, M. Sander, C. Schneidermann, L. Borchardt, *Carbon* **2019**, *147*, 43–50.
- A. Łoczechin, K. Seron, A. Barras, E. Giovanelli, S. Belouzard, Y.-T. Chen, N. Metzler-Nolte, R. Boukherroub, J. Dubuisson, S. Szunerits, *ACS Appl. Mat. & Interfaces* **2019**, *11*, 42964.
- R. Malishev, S. Nandi, D. Śmiłowicz, S. Bakavayev, S. Engel, N. Bujanover, R. Gazit, N. Metzler-Nolte, R. Jelinek, *ACS Chem. Neurosci.* **2019**, *10*, 3555.
- J. Masa, S. Piontek, P. Wilde, H. Antoni, T. Eckhard, Y.-T. Chen, M. Muhler, U.-P. Apfel, W. Schuhmann, *Adv. Energy Mater.* **2019**, *9*, 1900796.
- S. Mebs, J. Duan, F. Wittkamp, S. T. Stripp, T. Happe, U.-P. Apfel, M. Winkler, M. Haumann, *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 4000.
- R. G. Miller, M. Vázquez-Hernández, P. Prochnow, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 9404.
- I. C. Orué, R. Boese, C. Schauerte, K. Merz, *Cryst. Growth Des.* **2019**, *19*, 3, 1616–1620.
- S. Piontek, K. junge Puring, D. Siegmund, M. Smialkowski, I. Sinev, D. Tetzlaff, B. Roldan Cuenya, U.-P. Apfel, *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 1075.
- C. Prehal, S. Grätz, B. Krüner, M. Thommes, L. Borchardt, V. Presser, O. Paris, *Carbon* **2019**, *152*, 416–423.
- C. Schneidermann, C. Kensy, P. Otto, S. Oswald, L. Giebeler, D. Leistenschneider, S. Grätz, S. Dörfler, S. Kaskel, L. Borchardt, *ChemSusChem* **2019**, *12*, 310–319.

- C. Schneidermann, P. Otto, D. Leistenschneider, S. Grätz, C. Eßbach, L. Borchardt, *Beilstein J. Nanotechnol.* **2019**, *10*, 1618–1627.
- M. Senger, V. Eichmann, K. Laun, J. Duan, F. Wittkamp, G. Knör, U.-P. Apfel, T. Happe, M. Winkler, J. Heberle, S. T. Stripp, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 17394.
- M. Smialkowski, D. Siegmund, K. Pellumbi, L. Hensgen, H. Antoni, M. Muhler, U.-P. Apfel, *Chem. Commun.* **2019**, *55*, 8792.
- Śmiłowicz, J. Slootweg, N. Metzler-Nolte, *Mol. Pharmaceutics* **2019**, *16*, 4572.
- J. Soldevila Barreda, N. Metzler-Nolte, *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 829.
- D. Tetzlaff, C. Simon, D. S. Achilleos, M. Smialkowski, K. junge Puring, A. Bloesser, S. Piontek, H. Kasap, D. Siegmund, E. Reisner, R. Marschall, U.-P. Apfel, *Faraday Discuss.* **2019**, *215*, 216.
- F. Wittkamp, N. Mishra, H. Wang, H.-C. Wille, R. Steinbrügge, M. Kaupp, S. P. Cramer, U.-P. Apfel, V. Pelmeshnikov *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 7535.
- E. Zhang, N. Fulik, G.-P. Hao, H.-Y. Zhang, K. Kaneko, L. Borchardt, E. Brunner, S. Kaskel, *Angewandte Chemie International Edition* **2019**, *58*, 13060–13065.
- E. Zhang, N. Fulik, S. Paasch, L. Borchardt, S. Kaskel, E. Brunner, *Energy Storage Materials* **2019**, *19*, 432–438.

Inorganic Chemistry II

- A. Castañeda Medina, R. Schmid, *Journal of chemical theory and computation* **2019**, *15*, 1293.
- S. Cwik, S. M. J. Beer, M. Schmidt, N. C. Gerhardt, T. de Los Arcos, D. Rogalla, J. Weßing, I. Giner, M. Hofmann, G. Grundmeier et al., *Dalton transactions (Cambridge, England : 2003)* **2019**, *48*, 2926.
- J. P. Dürholt, G. Fraux, F.-X. Coudert, R. Schmid, *Journal of chemical theory and computation* **2019**, *15*, 2420.
- J. P. Dürholt, B. F. Jahromi, R. Schmid, *ACS central science* **2019**, *5*, 1440.
- J. P. Dürholt, R. Schmid, *Phys. Rev. Materials* **2019**, *3*, 094408.
- J. D. Evans, J. P. Dürholt, S. Kaskel, R. Schmid, *J. Mater. Chem. A* **2019**, *7*, 24019.
- X.-Q. Hu, D. Lichte, I. Rodstein, P. Weber, A.-K. Seitz, T. Scherpf, V. H. Gessner, L. J. Gooßen, *Organic letters* **2019**, *21*, 7558.
- J. Keupp, R. Schmid, *Adv. Theory Simul.* **2019**, *2*, 1900117.
- L. Mai, N. Boysen, D. Zanders, T. de los Arcos, F. Mitschker, B. Mallick, G. Grundmeier, P. Awakowicz, A. Devi, *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 7406.
- L. Mai, N. Boysen, D. Zanders, T. de Los Arcos, F. Mitschker, B. Mallick, G. Grundmeier, P. Awakowicz, A. Devi, *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 7489.

- L. Mai, D. Zanders, E. Subaşı, E. Ciftiyurek, C. Hoppe, D. Rogalla, W. Gilbert, T. d. L. Arcos, K. Schierbaum, G. Grundmeier et al., *ACS applied materials & interfaces* **2019**, *11*, 3169.
- C. Mohapatra, L. T. Scharf, T. Scherpf, B. Mallick, K.-S. Feichtner, C. Schwarz, V. H. Gessner, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, *58*, 7459.
- A. Sadlo, D. Peeters, R. Albert, D. Rogalla, H.-W. Becker, R. Schmechel, A. Devi, *Journal of nanoscience and nanotechnology* **2019**, *19*, 867.
- L. T. Scharf, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2019**, *2019*, 2990.
- L. T. Scharf, A. Kowsari, T. Scherpf, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *Organometallics* **2019**, *38*, 4093.
- T. Scherpf, I. Rodstein, M. Paaßen, V. H. Gessner, *Inorganic chemistry* **2019**, *58*, 8151.
- S. J. Schlegel, S. Hosseinpour, M. Gebhard, A. Devi, M. Bonn, E. H. G. Backus, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, *21*, 8956.
- C. Schneider, D. Bodesheim, J. Keupp, R. Schmid, G. Kieslich, *Nature communications* **2019**, *10*, 4921.
- S. J. Schlegel, S. Hosseinpour, M. Gebhard, A. Devi, M. Bonn, E. H. G. Backus, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, *21*, 8956.
- C. Schwarz, J. Handelsmann, D. M. Baier, A. Ouissa, V. H. Gessner, *Catal. Sci. Technol.* **2019**, *9*, 6808.
- C. Schwarz, T. Scherpf, I. Rodstein, J. Weismann, K.-S. Feichtner, V. H. Gessner, *ChemistryOpen* **2019**, *8*, 621.
- C. Schwarz, L. T. Scharf, T. Scherpf, J. Weismann, V. H. Gessner, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2019**, *25*, 2793.
- S. Siwaipram, P. A. Bopp, J.-C. Soetens, R. Schmid, S. Bureekaew, *Journal of Molecular Liquids* **2019**, *285*, 526.
- M. Tuomisto, Z. Giedraityte, L. Mai, A. Devi, V. Boiko, K. Grzeszkiewicz, D. Hreniak, M. Karppinen, M. Lastusaari, *Journal of Luminescence* **2019**, *213*, 310.
- P. Weber, C. K. Rank, E. Yalcinkaya, M. Dyga, T. van Lingen, R. Schmid, F. W. Patureau, L. J. Gooßen, *Adv. Synth. Catal.* **2019**, *361*, 3925.
- P. Weber, T. Scherpf, I. Rodstein, D. Lichte, L. T. Scharf, L. J. Gooßen, V. H. Gessner, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, *58*, 3203.
- D. Zanders, E. Ciftiyurek, C. Hoppe, T. de Los Arcos, A. Kostka, D. Rogalla, G. Grundmeier, K. D. Schierbaum, A. Devi, *Adv. Mater. Interfaces* **2019**, *6*, 1801540.
- D. Zanders, E. Ciftiyurek, E. Subaşı, N. Huster, C. Bock, A. Kostka, D. Rogalla, K. Schierbaum, A. Devi, *ACS applied materials & interfaces* **2019**, *11*, 28407.

Organic Chemistry I

- M. S. Andrä, L. Schifferer, C. Pollok, C. Merten, L. J. Goossen, J-Q. Yu, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 8503-8507.
- A. Dreger, P. Wonner, E. Engelage, S. M. Walter, R. Stoll, S. M. Huber, *Chemical communications (Cambridge, England)* **2019**, 55, 8262.
- M. Dyga, D. Hayrapetyan, R. K. Rit, L. J. Gooßen, *Adv. Synth. Catal.* **2019**, 361, 3548-3553.
- Y. Gao, Y. Ou, L. J. Goossen, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 8709-8712.
- M Grote, S Kushnir, N Pryk, D Möller, J Erver, A. Ismail-Ali, F Schulz, *Organic & biomolecular chemistry* **2019**, 17, 6374.
- M. Grote, F. Schulz, *ChemBioChem* **2019**, 20, 1183.
- J. M. Holthoff, E. Engelage, A. B. Kowsari, S. M. Huber, R. Weiss, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2019**, 25, 7480.
- X.-Q. Hu, D. Lichte, I. Rodstein, P. Weber, A.-K. Seitz, T. Scherpf, V. H. Gessner, L. J. Gooßen, *Org. Lett.* **2019**, 21 (18), 7558-7562.
- Z. Hu, X.-Q. Hu, G. Zhang, L. J. Gooßen, *Org. Lett.* **2019**, 21(17), 6770-6773.
- M. Pichette Drapeau, J. Bahri, D. Lichte, L. J. Gooßen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 892-896.
- M. Pichette Drapeau, J. Bahri, D. Lichte, L. J. Gooßen, *Angew. Chem.* **2019**, 131, 902-906.
- N. Pirkel, A. Del Grosso, B. Mallick, A. Doppiu, L. J. Gooßen, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 5275-5278.
- J. Pollini, W. M. Pankau, L. J. Gooßen, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 7416-7425.
- R. L. Sutar, S. M. Huber, *ACS Catal.* **2019**, 9, 9622.
- P. Weber, A. Biafora, A. Doppiu, H.-J. Bongard, H. Kelm, L. J. Gooßen, *Org. Process Res. Dev.* **2019**, 23, 1462-1470
- P. Weber, C. K. Rank, E. Yalcinkaya, M. Dyga, T. van Lingen, R. Schmid, F. W. Patureau, L. J. Goossen, *Adv. Synth. Catal.* **2019**, 361, 3925-3929.
- P. Weber, T. Scherpf, I. Rodstein, D. Lichte, L. T. Scharf, L. J. Gooßen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 3203-3207.
- P. Weber, T. Scherpf, I. Rodstein, D. Lichte, L. T. Scharf, L. J. Gooßen, V. H. Gessner, *Angew. Chem.* **2019**, 131, 3235-3239.
- P. Wonner, A. Dreger, L. Vogel, E. Engelage, S. M. Huber, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 16923.
- P. Wonner, A. Dreger, L. Vogel, E. Engelage, S. M. Huber, *Angew. Chem.* **2019**, 131, 17079.

- P. Wonner, T. Steinke, S. M. Huber, *Synlett* **2019**, 30, 1673.
- G. Zhang, Z. Hu, F. Belitz, Y. Ou, N. Pirkel, L. J. Gooßen, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 6435-6439.
- G. Zhang, Z. Hu, F. Belitz, Y. Ou, N. Pirkel, L. J. Gooßen, *Angew. Chem.* **2019**, 131, 6501-6505.
- G. Zhang, Z. Hu, G. Bertoli, L. J. Gooßen, *ACS Catal.* **2019**, 9, 8153-8158.

Organic Chemistry II

- M. S. Andrä, L. Schifferer, C. H. Pollok, C. Merten, L. J. Gooßen, J.-Q. Yu, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 8503.
- N. Berger, L. J. B. Wollny, P. Sokkar, S. Mittal, J. Mieres-Perez, R. Stoll, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, *ChemPhysChem* **2019**, 20, 1663.
- S. V. Chapyshev, D. V. Korchagin, P. Costa, W. Sander, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* **2019**, 377, 207.
- S. V. Chapyshev, D. V. Korchagin, D. Grote, W. Sander, *Magn Reson Chem* **2019**, 57, 472.
- M.-L. Delcourt, S. Felder, S. Turcaud, C. H. Pollok, C. Merten, L. Micouin, E. Benedetti, *J. Org. Chem.* **2019**, 84, 5369.
- J. Knorr, P. Sokkar, P. Costa, W. Sander, E. Sanchez-Garcia, P. Nuernberger, *The Journal of organic chemistry* **2019**, 84, 11450.
- M. Kohlhaas, M. Zähres, C. Mayer, M. Engeser, C. Merten, J. Niemeyer, *Chem. Commun.* **2019**, 55, 3298.
- N. M. Kreienborg, J. Bloino, T. Osowski, C. H. Pollok, C. Merten, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, 21, 6582.
- H. Li, R. Gontla, J. Flegel, C. Merten, S. Ziegler, A. P. Antonchick, H. Waldmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 307.
- D. Loose, A. Aniol, M. Feigel, S. Röhling, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2020**, 2020, 35.
- E. Mendez-Vega, J. Mieres-Perez, S. V. Chapyshev, W. Sander, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 12994.
- C. Merten, T. P. Golub, N. M. Kreienborg, *J. Org. Chem.* **2019**, 84, 8797.
- T. Schleif, J. Mieres-Perez, S. Henkel, E. Mendez-Vega, H. Inui, R. J. McMahon, W. Sander, *The Journal of organic chemistry* **2019**, 84, 16013.
- Trosien, E. Mendez-Vega, T. Thomanek, W. Sander, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 14855.
- L. Weiricha, C. Merten, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, 21, 13494.

Physical Chemistry I

- C. Bertram, W. Fang, P. Pedevilla, A. Michaelides, K. Morgenstern, *Nano letters* **2019**, *19*, 3049.
- B. Kohl, X. Zhong, C. Herrmann, R. Stoll, *Nucleic Acids Research*, **2019**, *47*, 22, 11906–11920.
- C. Lorenz, S. Ince, T. Zhang, A. Cousin, R. Batra-Safferling, L. Nagel-Steger, C. Herrmann, A. M. Stadler, *FEBS J*, **2019**, *287*, 496-514.
- C. Sprodowski, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 9846.
- C. Sprodowski, K. Morgenstern, *Nanomaterials (Basel, Switzerland)* **2019**, *9*, 710.
- C. Sprodowski, K. Morgenstern, *Nanoscale* **2019**, *11*, 10314.
- C. Sprodowski, K. Morgenstern, *Phys. Rev. B* **2019**, *100*, 045402.
- M. Vyshnepolsky, K. Morgenstern, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2020**, *22*, 497.
- I. Weber, N. Gerrard, A. Hodgson, K. Morgenstern, *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 6861.

Physical Chemistry II

- S. Alfarano, H. Vondracek, F. Sebastiani, F. Novelli, C. Hoberg, I. Kolling, J.-B. Brubach, P. Roy, G. Schwaab, M. Havenith, *Biophysical chemistry* **2019**, *253*, 106215.
- S. Funke, F. Sebastiani, G. Schwaab, M. Havenith, *The journal of chemical physics* **2019**, *150*, 224505_1–224505_8.
- C. Hoberg, P. Balzerowski, M. Havenith, *AIP Advances / American Institute of Physics* **2019**, *9* (3), 035348_1–035348_5.
- K. Lotz, A. Wütscher, H. Düdler, C. M. Berger, C. Russo, K. Mukherjee, G. Schwaab, M. Havenith, M. Muhler, *ACS omega* **2019**, *4* (2), 4448–4460.
- D. Mani, N. Pal, C. Beakovic, M. Smialkowski, G. Schwaab, M. Havenith, *Physical chemistry, chemical physics* **2019**, *21*, 20582–20587.
- D. Mani, R. Pérez de Tudela Ortega, R. Schwan, N. Pal, S. Körning, H. Forbert, B. Redlich, A. F. G. van der Meer, G. Schwaab, D. Marx, et al. *Science advances* **2019**, *5* (6), eaav8179_1–eaav8179_7.
- F. Novelli, M. Bernal Lopez, G. Schwaab, B. Roldán Cuenya, M. Havenith, *The journal of physical chemistry / B* **2019**, *123* (30), 6521–6528.
- S. E. Sanders, P. B. Petersen, *J. Chem. Phys.*, **2019**, *150*, 204708
- Schwaab, F. Sebastiani, M. Havenith, *Angewandte Chemie* **2019**, *131* (10), 3030–3044.
- R. Schwan, C. Qu, D. Mani, N. Pal, L. van der Meer, B. Redlich, C. LeForestier, J. Bowman, G. Schwaab, M. Havenith, *Angewandte Chemie / International edition* **2019**, *58*, 13119–13126.

- H. Vondracek, S. Alfarano, C. Hoberg, I. Kolling, F. Novelli, F. Sebastiani, J.-B. Brubach, P. Roy, G. Schwaab, M. Havenith, *Biophysical chemistry* **2019**, 254, 106240.
- H. Vondracek, S. Imoto, L. Knake, G. Schwaab, D. Marx, M. Havenith, *The journal of physical chemistry / B* **2019**, 123 (36), 7748–7753.

Theoretical Chemistry

- F. Alscher, F. Nadolny, H. Frenzel, J. Knossalla, S. Peitz, E. Borovinskaya, C. Breitkopf, R. Franke, W. Reschetilowski, *Catal. Sci. Technol.* **2019**, 9, 2456.
- S. Amirjalayer, H. Fuchs, D. Marx, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 5232.
- M. Blech, S. Hörer, A. B. Kuhn, S. Kube, H. Göddeke, H. Kiefer, Y. Zang, Y. Alber, S. M. Kast, M. Westermann et al., *Biophysical journal* **2019**, 116, 1637.
- M. Böckers, R. Franke, V. Staemmler, *Theor Chem Acc* **2019**, 138, 42.
- R. Costantini, R. Faber, A. Cossaro, L. Floreano, A. Verdini, C. Hättig, A. Morgante, S. Coriani, M. Dell’Angela, *Communications Physics* **2019**, 2, 1–6.
- J. Daru, P. K. Gupta, D. Marx, *The journal of physical chemistry letters* **2019**, 10, 831.
- M. Dörr, S. Lips, C. A. Martínez-Huitle, D. Schollmeyer, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2019**, 25, 7835.
- P. K. Gupta, A. Esser, H. Forbert, D. Marx, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, 21, 4975.
- P. K. Gupta, P. Schienbein, J. Daru, D. Marx, *The journal of physical chemistry letters* **2019**, 10, 393.
- C. Hölzl, P. Kibies, S. Imoto, J. Noetzel, M. Knierbein, P. Salmen, M. Paulus, J. Nase, C. Held, G. Sadowski et al., *Biophysical chemistry* **2019**, 254, 106260.
- C. A. J. Hutter, M. H. Timachi, L. M. Hürlimann, I. Zimmermann, P. Egloff, H. Göddeke, S. Kucher, S. Štefanić, M. Karttunen, L. V. Schäfer et al., *Nature communications* **2019**, 10, 2260.
- L. Iffland, A. Khedkar, A. Petuker, M. Lieb, F. Wittkamp, M. van Gastel, M. Roemelt, U.-P. Apfel, *Organometallics* **2019**, 38, 289.
- S. Imoto, D. Marx, *The Journal of chemical physics* **2019**, 150, 84502.
- S. K. Khani, R. Faber, F. Santoro, C. Hättig, S. Coriani, *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, 15, 1242–1254.
- A. Khedkar, M. Roemelt, *Journal of chemical theory and computation* **2019**, 15, 3522
- S. Kloß, D. Selent, A. Spannenberg, R. Franke, A. Börner, M. Sharif, *Catalysts* **2019**, 9, 1036.
- N. Kumar, D. Marx, *Biophysical chemistry* **2019**, 252, 106192.

- B. N. Leidecker, C. Kubis, A. Spannenberg, R. Franke, A. Börner, *IUCrData* **2019**, 4.
- S. Lips, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Synlett* **2019**, 30, 1174.
- D. Mani, R. P. de Tudela, R. Schwan, N. Pal, S. Körning, H. Forbert, B. Redlich, A. F. G. van der Meer, G. Schwaab, D. Marx et al., *Science advances* **2019**, 5, eaav8179.
- J. M. Marinkovic, A. Riisager, R. Franke, P. Wasserscheid, M. Haumann, *Ind. Eng. Chem. Res.* **2019**, 58, 2409.
- D. Marx, *The journal of physical chemistry. A* **2019**, 123, 9240.
- J. Nikl, S. Lips, D. Schollmeyer, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 6849.
- J. Nikl, S. Lips, D. Schollmeyer, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 6891.
- 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.
- C. Päslock, L. V. Schäfer, M. Heyden, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, 21, 15958.
- C. Päslock, J. C. Smith, M. Heyden, L. V. Schäfer, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, 21, 10370.
- M. F. Pill, A. L. L. East, D. Marx, M. K. Beyer, H. Clausen-Schaumann, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 9787.
- J. L. Röckl, Y. Imada, K. Chiba, R. Franke, S. R. Waldvogel, *ChemElectroChem* **2019**, 6, 4184.
- M. Roemelt, D. A. Pantazis, *Adv. Theory Simul.* **2019**, 2, 1800201.
- S. Ruiz-Barragan, D. Muñoz-Santiburcio, D. Marx, *The journal of physical chemistry letters* **2019**, 10, 329.
- R. Sang, P. Kucmierczyk, R. Dühren, R. Razzaq, K. Dong, J. Liu, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Angewandte Chemie (International ed. in English)* **2019**, 58, 14365.
- C. Schran, D. Marx, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, 21, 24967.
- M. Selt, S. Mentizi, D. Schollmeyer, R. Franke, S. R. Waldvogel, *Synlett* **2019**, 30, 2062.
- H. Singh, S. K. Vasa, H. Jangra, P. Rovó, C. Päslock, C. K. Das, H. Zipse, L. V. Schäfer, R. Linser, *Journal of the American Chemical Society* **2019**, 141, 19276.
- D. P. Tew, C. Hättig, N. K. Graf, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, 21, 14063–14072.
- R. Tripathi, J. Noetzel, D. Marx, *Physical chemistry chemical physics : PCCP* **2019**, 21, 859.
- F. Uhl, D. Marx, *Physical review letters* **2019**, 123, 123002.

- F. Uhl, V. Staemmler, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **2019**, 233, 90.
- H. Vondracek, S. Imoto, L. Knake, G. Schwaab, D. Marx, M. Havenith, *The journal of physical chemistry. B* **2019**, 123, 7748.
- L. Warczinski, R. Franke, V. Staemmler, *Journal of computational chemistry* **2019**, 40, 2491.
- L. Warczinski, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, 21, 21577–21587.
- S. Wingbermühle, L. V. Schäfer, *Journal of chemical theory and computation* **2019**, 15, 2774.
- J. Yang, J. Liu, H. Neumann, R. Franke, R. Jackstell, M. Beller, *Science (New York, N.Y.)* **2019**, 366, 1514.
- Ö. Yönder, C. Hättig, *Fuel* **2019**, 241, 851–860.
- S.-H. Yoo, N. Siemer, M. Todorova, D. Marx, J. Neugebauer, *J. Phys. Chem. C* **2019**, 123, 5495.
- M. E. Zoloff Michoff, J. Ribas-Arino, D. Marx, *Physical review letters* **2019**, 122, 86801.