

**Fakultät für Chemie
Ruhr-Universität Bochum**

Forschung 2001

Research 2001

**Faculty of Chemistry
Ruhr-Universität Bochum**

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

Prof. Dr. Matthias Epple (Festkörperchemie).....4

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials).....5

PD Dr. Jens Müller (Hauptgruppenmolekülchemie)6

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander.....7

PD Dr. Götz Bucher.....8

Dr. Holger Bettinger9

Prof. Dr. Gerald Dyker (Organische/Metallorganische Chemie)10

Prof. Dr. Dieter Hasselmann (Radikalchemie)11

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christof Wöll (Oberflächenchemie)12

Dr. Uwe Burghaus13

Dr. Gregor Witte14

Prof. Dr. Friedrich Stuhl (Laser & Luftchemie)15

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen (Hochauflösende Laserspektroskopie).....16

Prof. Dr. Hermann Weingärtner (Physikalische Chemie der Flüssigkeiten).....17

Prof. Dr. Albert Würflinger (Hochdruckuntersuchungen).....18

Prof. (em.) Dr. Gerhard Schneider.....19

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. William Sheldrick (Analytik & Strukturchemie)20

Dr. Iris Müller21

Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)22

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx (Ab-initio Simulationen).....23

Prof. Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie)24

Prof. (em.) Dr. Werner Kutzelnigg25

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler (Heterogene Redoxkatalyse)26

Dr. Kai-Olaf Hinrichsen27

Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)28

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)29

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)30

Dr. Kai Sven Erdmann.....31

Dr. Volkmar Lessmann.....32

PD Dr. Irmgard Dietzel-Meyer (Elektrochemie neuraler Zellen).....33

Prof. Dr. Bernhard Hovemann (Molekulare Zellbiochemie).....34

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	35
Anorganische Chemie 2	36
Organische Chemie 2	37
Physikalische Chemie 1	39
Physikalische Chemie 2	40
Analytische Chemie	42
Theoretische Chemie	45
Technische Chemie	46
Biochemie 1	47
Biochemie 2	47
Dissertationen an der Fakultät für Chemie	49

Matthias Epple

Anorganische Chemie – Festkörperchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

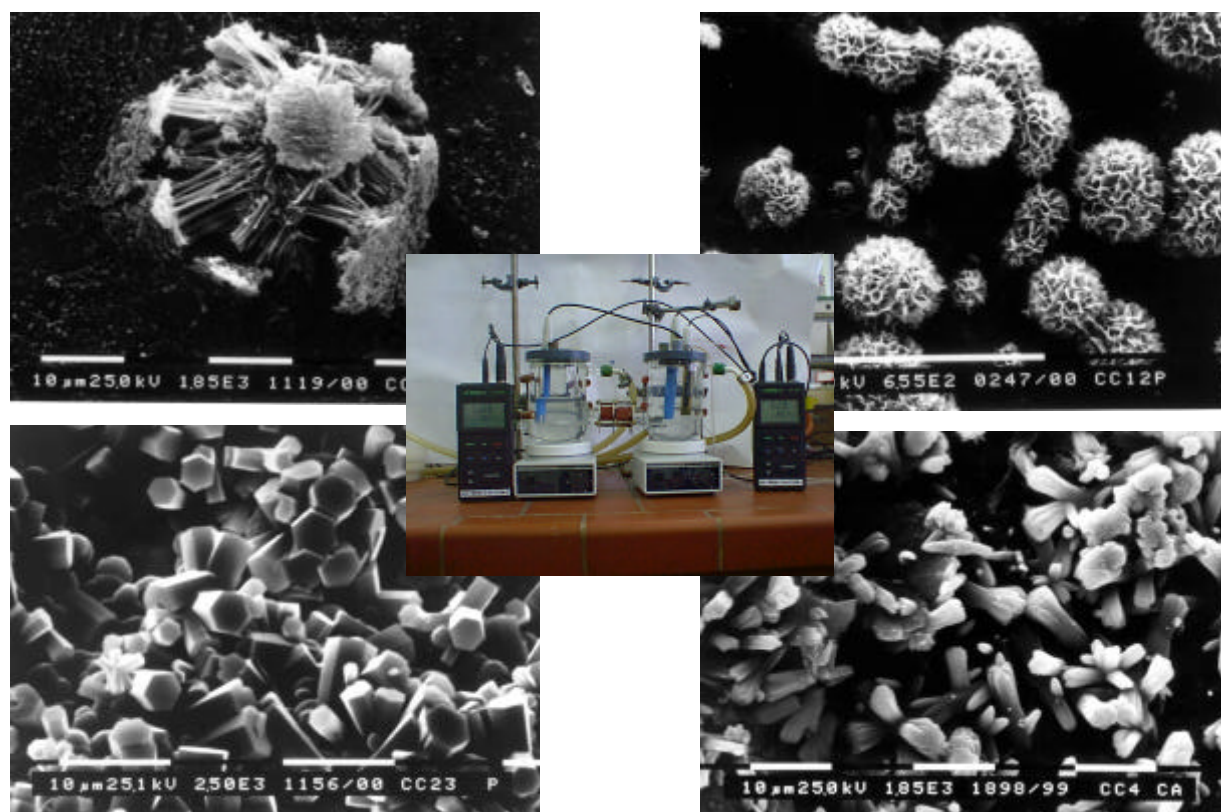
Tel.: ++49-(0)234-3224151; FAX: ++49-(0)234-3214558

email: Matthias.epple@ruhr-uni-bochum.de

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

F. Peters, M. Epple, *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions* (2001) 3585-3592. Crystallization of calcium phosphates under constant conditions with a double-diffusion setup.

Die Kristallisation von Calciumphosphaten (Apatit) wurde unter konstanten Bedingungen mit einer computergesteuerten Doppeldiffusionsanlage durchgeführt. Hierbei wurden sowohl die pH-Werte in beiden Kompartimenten als auch die Konzentrationen von Calcium, Phosphat und Fluorid kontrolliert und konstant gehalten. Der Einfluss von Fluorid-Konzentration, pH-Wert, Gesamtkonzentration (Übersättigung) und Additiven (Cholesterin, Magnesium) auf die Morphologie der gebildeten Kristalle wurde untersucht. Die beobachteten Kristallformen fielen in zwei Klassen: Kugeln und hexagonale Prismen, je nach Übersättigung. Mit diesem Versuchsaufbau können biologische Kristallisationsprozesse *in vitro* simuliert werden.



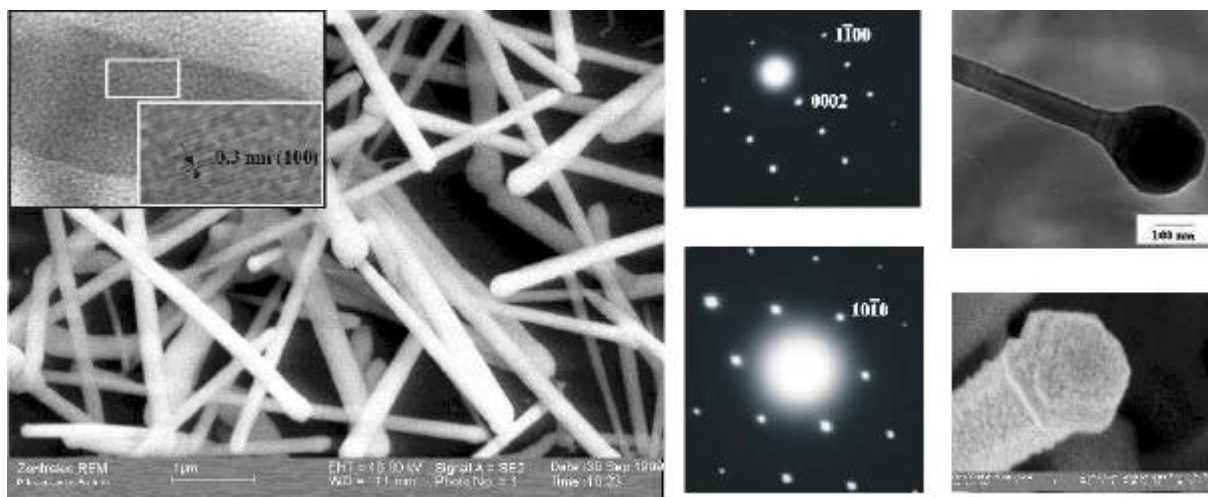
The crystallisation of calcium phosphate (apatite) was studied under computer-controlled conditions using a double-diffusion set-up: constant pH in both compartments and constant concentrations of calcium, phosphate and fluoride. The influence of fluoride concentration, pH, overall concentration and of additives (cholesterol, magnesium) on the crystal morphology was investigated. The crystallite shapes fell into two main categories: spheres and hexagonal prisms, depending on the supersaturation. This set-up provides a suitable way to simulate biologic crystallisation processes *in vitro*.

Roland A. Fischer

Anorganische Chemie II – *Organometallics & Materials*;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3224174; FAX: ++49-(0)234-3214174
E-mail: rfischer@aci.ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2>

H. Parala, A. Devi, F. Hipler, E. Maile, A. Birkner, H. W. Becker, R. A. Fischer, *J. Cryst. Growth*, **231** (2001) 68-74. Investigations on InN whiskers grown by chemical vapour deposition

Frei tragende Nanodrähte von Halbleitermaterialien eignen sich für Nano-Laser (ZnO), Nano-LEDs (InP) oder Nano-FETs (GaN). Eine typische Methode für das orientierte, größen- und formselektive Wachstum dieser Nanostrukturen ist die metallkatalysierte Chemische Gasphasenabscheidung (CVD). Nach dem sogenannten vapour-liquid-solid (VLS) Mechanismus initiieren dabei flüssige, nanodimensionierte Metalltröpfchen an der Substratoberfläche ein vorzugsorientiertes Wachstum der Nanokristallite aus den in der Gasphase vorliegenden Komponenten. Aus der Einkomponenten-Vorstufe $[(\text{N}_3)\text{In}\{(\text{CH}_2)_3\text{NMe}_2\}]_2$ wurden infolge eines autokatalytischen VLS Mechanismus bei 500°C auf (0001)Al₂O₃ erstmals nanodimensionierte InN Whisker gewachsen



Free standing nanowires of semiconducting materials hold much promise for quite unique applications as nano-lasers (ZnO), nano-LEDs (InP) and nano-FETs (GaN). Nanowires are typically synthesised by metal-catalysed chemical vapour deposition (CVD) and taking advantage of the so-called vapour-liquid-solid (VLS) growth mode. CVD of nanoscale InN whiskers on (0001)Al₂O₃ at 500°C was demonstrated for the first time using the single molecule precursor [(N₃)In{(CH₂)₃NMe₂)}₂] which compound delivers traces of indium metal besides InN upon thermal decomposition, thus initiating an autocatalytic VLS growth of InN whiskers.

Jens Müller

Anorganische Chemie II – Organometallics & Materials Chemistry;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3228641; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: Jens.Müller@aci.ruhr-uni-bochum.de

<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/jens.mueller/>

J. Müller, S. Bendix, *Chem. Commun.* **2001**, 911–912. Insights into the Chemical Vapor Deposition of GaN using the Single-Source Precursor $\text{Me}_2\text{N}(\text{CH}_2)_3\text{Ga}(\text{N}_3)_2$. Matrix Isolation of $\text{Ga}(\text{N}_3)$.

Galliumnitride ist ein Halbleiter, der zunehmend an Bedeutung gewinnt. Das intramolekular koordinierte Gallan $\text{Me}_2\text{N}(\text{CH}_2)_3\text{Ga}(\text{N}_3)_2$ findet als Single-Source-Precursor zur Chemischen Dampfabcheidung von GaN-Schichten Verwendung. Mit Hilfe der Matrixisolations-Technik konnten wir Gallium(I)-azid, GaN_3 , als Zerfallsprodukt auf dem Weg vom Molekül zum abgeschiedenen Material nachweisen. Es könnte durchaus sein, dass dieses ungewöhnliche Molekül das Schlüsselintermediat der GaN-Abscheidung aus $\text{Me}_2\text{N}(\text{CH}_2)_3\text{Ga}(\text{N}_3)_2$ darstellt. In der Abbildung sieht man ein IR-Spektrum der in festem Argon matrixisolierten Thermolyseprodukte (Spektrum A). Durch photochemische Zersetzung konnte das GaN_3 identifiziert werden (Spektrum B).

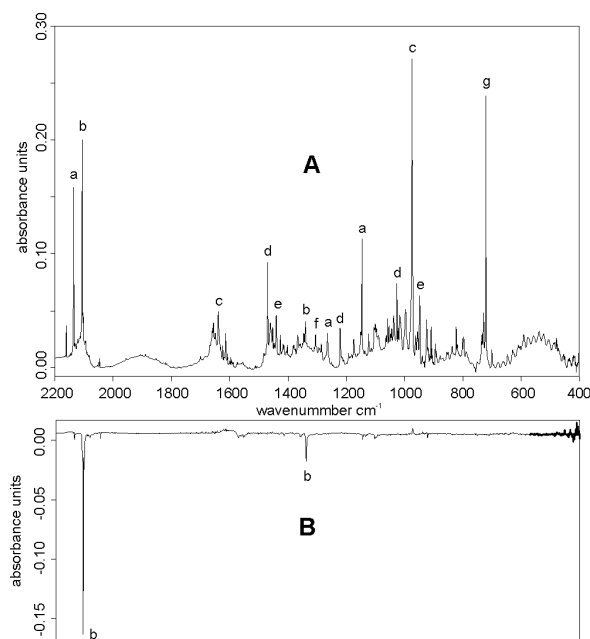
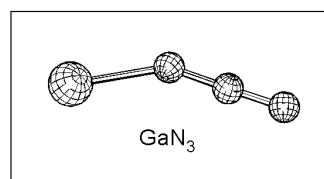


Figure.1 spectrum **A**: products of thermolysis of **1** at 520°C trapped in excess of argon at 15 K; a: HN_3 , b: GaN_3 , c: NH_3 , d: $\text{H}_2\text{C}=\text{NCH}_3$, e: $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$, f: CH_4 , g: HCN . spectrum **B**: difference IR spectrum obtained by photolysis of the product matrix **A**; negative IR bands indicate disappearing species.



Calculated geometry of GaN_3 at the B3LYP/6-311+G(2d,p) level (indication b in figure 1)

Gallium nitride is a semiconductor material of increasing importance. The intramolecular coordinated gallane $\text{Me}_2\text{N}(\text{CH}_2)_3\text{Ga}(\text{N}_3)_2$ can be used as a single-source precursor for the Chemical Vapor Deposition of GaN films. We identified gallium(I) azide, GaN_3 , as a pyrolysis product on the way of the starting molecule to the deposited material using matrix-isolation techniques. It is quite possible that this unusual molecule is the key intermediate of the GaN deposition from $\text{Me}_2\text{N}(\text{CH}_2)_3\text{Ga}(\text{N}_3)_2$.

Weitere Informationen unter: <http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/jens.mueller/>

Wolfram Sander

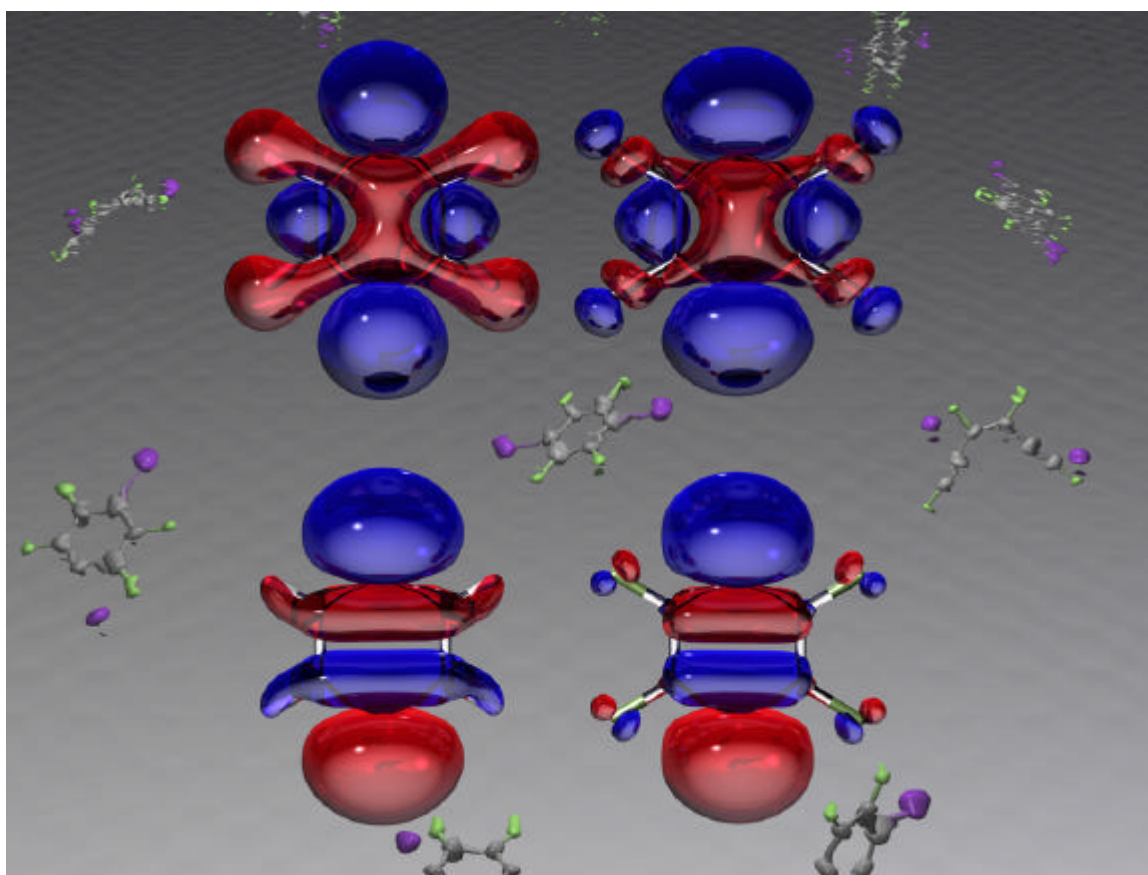
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224593; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: wolfram.sander@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/aksander>

H. H. Wenk, A. Balster W. Sander, D. A. Hrovat, and W. T. Borden, *Angew. Chem.* **113** (2001) 2356 – 2359. *Matrix Isolation of the Perfluorinated *p*-Benzyne*.

Das *p*-Didehydrobenzol ist ein hochreaktives Molekül, das für den Wirkmechanismus einiger biologisch wirksamer Substanzen (Endiin-Cytostatika) von zentraler Bedeutung ist. Durch Abkühlen in einer inerten Edelgasmatrix auf Temperaturen nahe dem absoluten Nullpunkt (2.7 K) konnte nun erstmals ein Derivat dieser Intermediate synthetisiert und isoliert werden. Die Abbildung zeigt die elektronische Struktur des *p*-Didehydrobenzols in einer Computeranimation. Neben dem grundlegenden Interesse an der Struktur, der Reaktivität und den elektronischen Eigenschaften dieser Verbindungen soll durch unsere Arbeiten die Grundlage für die Entwicklung neuer biologisch wirksamer Verbindungen gelegt werden.



p-Didehydrobenzene (*p*-Benzyne) is a highly reactive molecule which is of central importance for the mechanism of a class of biologically active compounds (enediynes antitumor agents). For the first time a derivative of these intermediates could be synthesized and isolated by cooling in an inert gas matrix at cryogenic temperatures (2.7 K). The Figure shows a computer animation of the electronic structure of *p*-benzyne. We are not only interested in the basic understanding of the structure, reactivity, and electronic properties of these compounds but also hope to contribute to the development of new biologically active compounds.

Götz Bucher

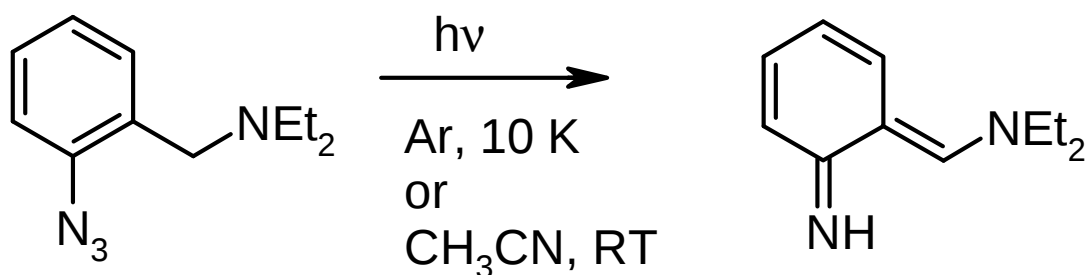
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; 44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224421; FAX: ++49-(0)234-3214353

e-mail: goetz.bucher@ruhr-uni-bochum.de

G. Bucher, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 2447-2462. Photochemical Generation of Iminoquinone Methides by 1,4-Hydrogen Migration in Derivatives of *o*-Tolylnitrene. *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 2463-2475. Laser Flash Photolysis Study on *N,N*-Diethyl-2-azidobenzylamine: The Reactivity of Iminoquinonemethides in Solution.

Die Artikel beschreiben die photochemische Darstellung stereoisomerer Iminochinonmethide aus Derivaten des 2-Azidotoluols und ihre Charakterisierung mittels Matrixisolation, Dichtefunktionaltheorie, und zeitaufgelöster Laser-Blitzlichtspektroskopie. *EuJOC* (2001) 2447-2462 beschreibt die Matrixisolation von Nitrenen, Didehydroazepinen, und Iminochinonmethiden, die photochemisch aus verschiedenen benzylich substituierten Derivaten des 2-Azidotoluols erhalten wurden. Die Bildung von Iminochinonmethiden wird durch π -Donor-Substituenten in benzylicher Stellung erleichtert, was auch durch DFT-Rechnungen bestätigt wird. *EuJOC* (2001) 2463-2475 beschreibt die Charakterisierung reaktiver Iminochinonmethide mittels zeitaufgelöster Laser-Blitzlichtspektroskopie. Diese Intermediate zeigen hohe Reaktivität gegenüber Nucleophilen wie Alkoholen oder Aminen, und extrem hohe Reaktivität gegenüber Polyhydroxyverbindungen (Glykole, Zucker), Thiolen, und DNA-Basen wie Cytosin oder Adenin.



The articles describe the photochemical generation of stereoisomeric iminoquinone methides from derivatives of 2-azidotoluene and their characterization by matrix isolation, density functional theory, and time-resolved laser flash photolysis. *EuJOC* (2001) 2447-2462 describes the matrix isolation of nitrenes, didehydroazepines and iminoquinone methides, which were obtained by photolysis of various derivatives of 2-azidotoluene, substituted in benzylic position. The formation of iminoquinone methides is facilitated by the presence of benzylic p-donor substituents. This is confirmed by the results of DFT-calculations. *EuJOC* (2001) 2463-2475 describes the characterization of reactive iminoquinone methides by time-resolved laser flash photolysis. These reactive intermediates show high reactivity towards nucleophiles such as alcohols and amines, and extremely high reactivity towards polyhydroxy compounds (glycols, sugars), thiols, and DNA-bases such as cytosine and adenine.

Holger F. Bettinger

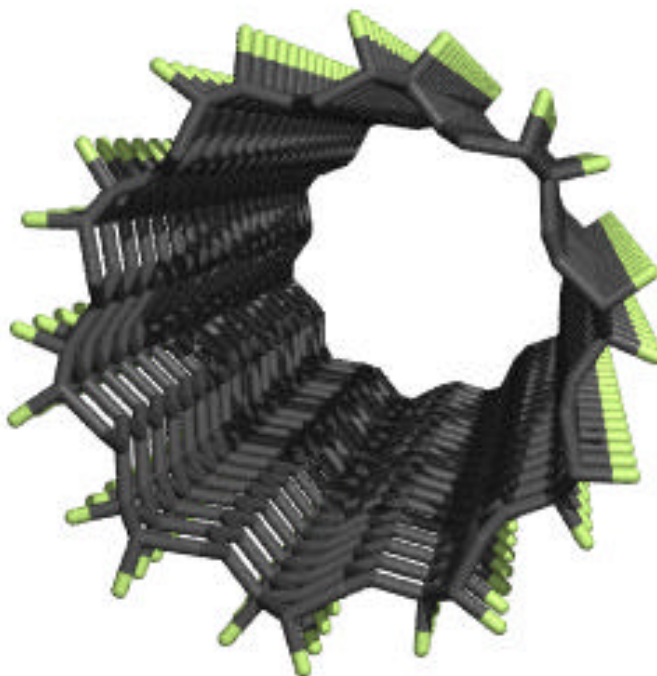
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; 44780 Bochum

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

e-mail: Holger.Bettinger@ruhr-uni-bochum.de

Bettinger, H. F.; Kudin, K. N.; Scuseria, G. E.; The Thermochemistry of Fluorinated Single Wall Carbon Nanotubes, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 12849-12856.

Während Kohlenstoffnanoröhren mit abnehmendem Durchmesser thermodynamisch instabiler werden, verhält es sich nach computerchemischen Rechnungen bei fluorierten Nanoröhren der Zusammensetzung C_2F umgekehrt: Röhren mit kleinerem Durchmesser sind thermodynamisch stabiler als solche mit größerem. Deshalb wachsen die durchschnittlichen Bindungsdissoziationsenergien der C-F Bindungen stark mit abnehmendem Durchmesser der fluorierten Nanoröhren. Dies lässt erwarten, dass die thermische Stabilität der fluorierten Nanoröhren stark von ihrem Durchmesser abhängt.



While the thermodynamic stability of carbon nanotubes decreases with decreasing tube diameter, the reverse trend is observed for fluorinated carbon nanotubes of C_2F composition according to quantum chemical computations: tubes with smaller diameter are thermodynamically more stable than those with large diameter. Therefore, the mean C-F bond dissociation energies increase strongly with decreasing diameter of fluorinated nanotubes. It is expected that the thermal stability of fluorinated nanotubes depends strongly on their diameter.

Gerald Dyker

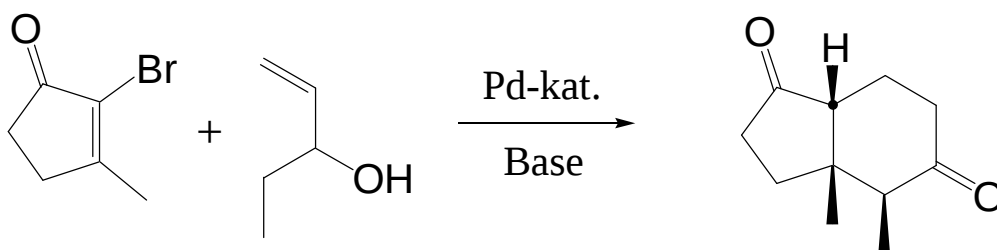
Organische/Metallorganische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Gerald.Dyker@ruhr-uni-bochum.de

G. Dyker, H. Markwitz and G. Henkel, *Eur. J. Org. Chem.* **2001**, 2415-2423. A Putatively Unfeasible Heck Reaction

Die Metallorganische Chemie liefert dem Synthetiker eine Vielzahl an Materialien und Methoden zum rationellen Aufbau auch komplexer Zielstrukturen. Hauptziel unserer Forschungsarbeiten ist es, besonders leistungsfähige Synthesemethoden so zu kombinieren, dass man in einem einzigen Reaktionsschritt von einfachen Syntheschemikalien zu den komplexen Zielverbindungen gelangt. Solche Dominoprozesse können Syntheseverfahren drastisch vereinfachen. Besonders Palladium-katalysierte Reaktionen lassen sich hervorragend mit anderen Synthesemethoden kombinieren. Uns ist es nun gelungen, auch solche Synthesebausteine zur Reaktion zu bringen, die in der Literatur als notorisch unreaktiv gegenüber Palladium-Katalysatoren galten. Auf die Ringgröße dieser Bausteine kam es an: nur ein zentraler Fünfring gewährleistet optimale Bindungswinkel und Abstände. Nunmehr sind Ringsysteme einfach zugänglich, die typisch sind für etliche Naturstoffe.



Organometallic chemistry provides a manifold of reagents and reactions as tools for the straightforward synthesis of complex target molecules. The main topic of our research is to combine especially powerful transformations in so-called domino processes, so that complex target molecules are accessible from simple starting materials in a single reaction step. Thus, synthesis is made easy. Palladium-catalyzed reactions are compatible with various classical reactions, for instance with aldol addition and condensation. Recently we succeeded in applying chemical building blocks that were reputed to be notoriously unreactive against palladium catalysts. The ring size of these building blocks had a crucial influence: exclusively five-membered carbocycles provided suitable bond angles and distances in key intermediates. Now annulated ring systems representing the carbon framework of certain natural products are easily accessible by our domino processes.

Dieter Hasselmann

Radikalchemie, Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224437; FAX: ++49-(0)234-3214109

email: hasselmann@orch.ruhr-uni-bochum.de

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

Im Vordergrund unserer Arbeiten stehen Untersuchungen zur *Synthese gespannter Kohlenstoff-Verbindungen* und zu den *Mechanismen* ihrer *thermisch induzierten Reorganisationsprozesse*. Zielsetzung ist die Gewinnung detaillierter Kenntnis über die Natur beteiligter reaktiver Zwischenstufen (*Diradikale*), über den Einfluss struktureller Faktoren und von Substituenten auf die Stereochemie und Energetik der Umlagerungen. Der Einfluss von Substituenten auf die *Stabilität von Kohlenstoff-Radikalen* wird insbesondere durch kinetische Messungen quantitativ ermittelt. Thermische *Cycloreversionen von Aren-Alken-Addukten* zu Aromaten werden hinsichtlich des Einflusses von Substituenten auf ihre Energetik und Mechanismen untersucht.

Placed in the forefront of our research are investigations on the *syntheses of strained carbon compounds* and the *mechanisms of their thermally induced reorganizations*. The object in view is to gain a more detailed knowledge of the nature of the reactive intermediates (*diradicals*) involved, and of the influence of structural factors and of substituents on the stereochemistry and the energetics of the rearrangements. Substituent effects on the *stability of carbon centered radicals* are derived especially by quantitative kinetic measurements. *Cycloreversions of arene-alkene-adducts* to give aromatics are investigated with regard to the influence of substituents on the energetics and the mechanisms involved.

Christof Wöll

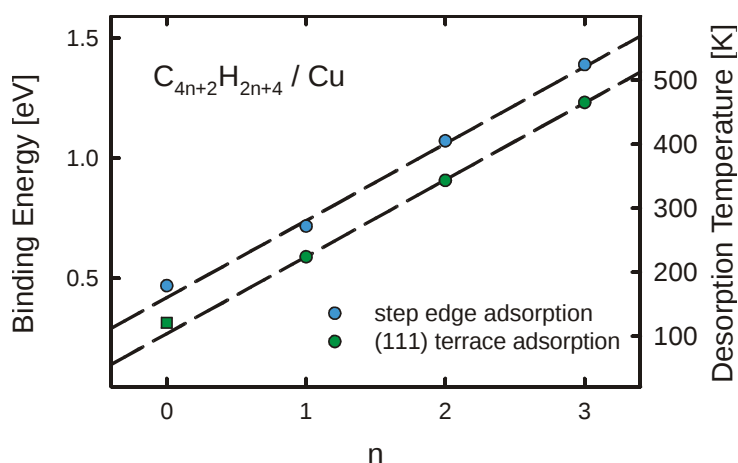
Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum

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

email: woell@pc.ruhr-uni-bochum.de; Internet: <http://www.pc.ruhr-uni-bochum.de>

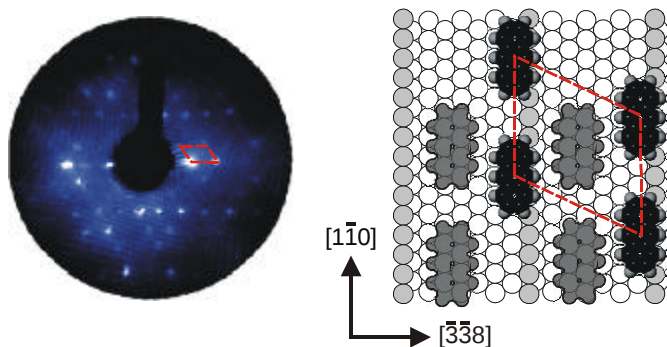
S. Lukas, S.Vollmer, G.Witte and Ch.Wöll, *J. Chem. Phys.* **114** (2001) 10123. Adsorption of acenes on flat and vicinal Cu(111) surfaces: Step induced formation of lateral order

Die gezielte Ausrichtung organischer Moleküle an Festkörperoberflächen durch mikroskopische Schablonen wie z.B. periodisch angeordnete atomare Stufen erfordert eine detaillierte mikrokinetische Kenntnis der Adsorption. Als Modellsystem hierfür wurde die Adsorption von Benzol, Naphthalin und Anthracen auf einer glatten Cu(111)-Oberfläche und im Vergleich hierzu auf den vizinalen, d.h. regelmäßig gestuften Cu(221)- und Cu(443)-Oberflächen mittels thermischer Desorptionsspektroskopie (TDS) und Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED) untersucht. Für jedes der untersuchten Azene ($C_{4n+2}H_{2n+4}$, $n = 1, 2, 3$) wurden dabei je zwei spezifische Bindungszustände beobachtet, die der Adsorption auf den glatten Terrassen sowie an Stufenkanten entsprechen. Hierbei steigt die Bindungsenergie für beide Adsorptionsplätze linear mit der Anzahl der aromatischen Ringe n an. Im Gegensatz zur Cu(111)-Oberfläche, auf der die Azene nur ungeordnete Monolagen ausbilden, konnten auf den Vizinalflächen geordnete Molekülfilme präpariert werden, in denen die Moleküle mit ihrer langen Achse entlang den Stufenkanten ausgerichtet sind.



A specific alignment of organic molecules on solid surfaces by using microscopic templates, such as e.g. periodic arrays of atomic steps, requires the knowledge of microkinetic details of the adsorption. As a model system for a site specific interaction on surfaces we have studied the adsorption of benzene, naphthalene, and anthracene on a flat Cu(111) surface and its vicinal Cu(221) and Cu(443) surfaces by means of by thermal desorption spectroscopy (TDS) and low energy electron diffraction (LEED). For each of the studied acenes ($C_{4n+2}H_{2n+4}$, $n = 1,2,3$) two distinct binding states were observed in the TDS corresponding to an adsorption on terraces and at step edges. The binding energies of both states are found to increase linearly with the number of aromatic rings n . In contrast to the Cu(111) surface where these acenes form disordered adlayers only, ordered films of naphthalene and anthracene with an alignment of the molecular axis

Anthracene / Cu(443)



along the steps could be prepared on the vicinal surfaces.

Uwe Burghaus

Am Lehrstuhl für Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224220; FAX ++49-(0)234-3214182

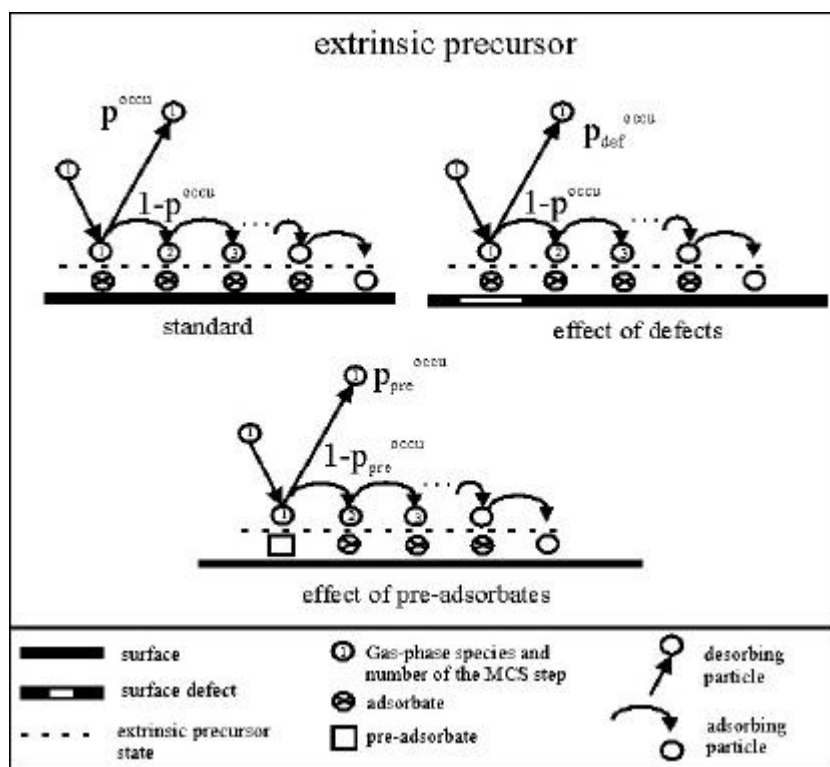
Email: burghaus@pc.ruhr-uni-bochum.de

<http://www.uweburghaus.de> (<http://www.pc.ruhr-uni-bochum.de>)

U. Burghaus, *Surface Review and Letters* **8** (2001) 353. Monte Carlo Simulation of the adsorbate-assisted adsorption in the case of CO/ZnO.

Motiviert durch unsere experimentellen Arbeiten [Th. Becker, M. Kunat, Ch. Boas, U. Burghaus, and Ch. Wöll, JCP **113** (2000) 6334] zur Reaktivität von Metalloxydkatalysatoren haben wir ein einfaches Monte Carlo Simulationsmodell zur Berechnung von Haftwahrscheinlichkeiten entwickelt. Das Modell basiert im wesentlichen auf einer Betrachtung der Massenunterschiede des Adsorbates und Substrates. Da sich die polaren ZnO Oberflächen gerade durch die Masse der Oberflächenatome unterscheiden (Sauerstoff- oder Zink-Terminierung) war die Betrachtung der CO Adsorption an diesen Oberflächen ein besonders günstiges Testsystem. Augenmerk wurde dabei auf die adsorbatvermittelte Adsorption gelegt („autokatalytische“ Adsorption), welche experimentell häufig beobachtet wurde, bisher aber in Simulationen kaum Betrachtung fand. Im weiteren wurde der für die heterogene Katalyse wichtige Einfluß von Defekten untersucht. Zeitaufgelöste Rechnungen befinden sich in der Vorbereitung (Kooperation mit J. Stephan, Universität in Potsdam).

Recently, a detailed study about the adsorption dynamics of CO on metal oxide surfaces has been published [Becker, et al., JCP **113** (2000) 6334]. For both polar surfaces, an increase in the adsorption probabilities with increasing surface coverage (adsorbate-assisted adsorption) has been observed. A Monte Carlo (MC) version of the so-called modified Kisliuk model is presented, which accounts for the main features observed experimentally. The model is based



on the differences in the mass-mismatch of the gas-phase species and the surfaces. Therefore, especially the polar surfaces of ZnO, which differ at a quick glance only by the mass of the atoms in the first surface layer, are perfectly suited to discuss the proposed algorithm. Furthermore has the effect of defects been considered. KMCS (time resolved MCS) are in progress, as a collaboration with J. Stephan (University of Potsdam).

Gregor Witte

Lehrstuhl für Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

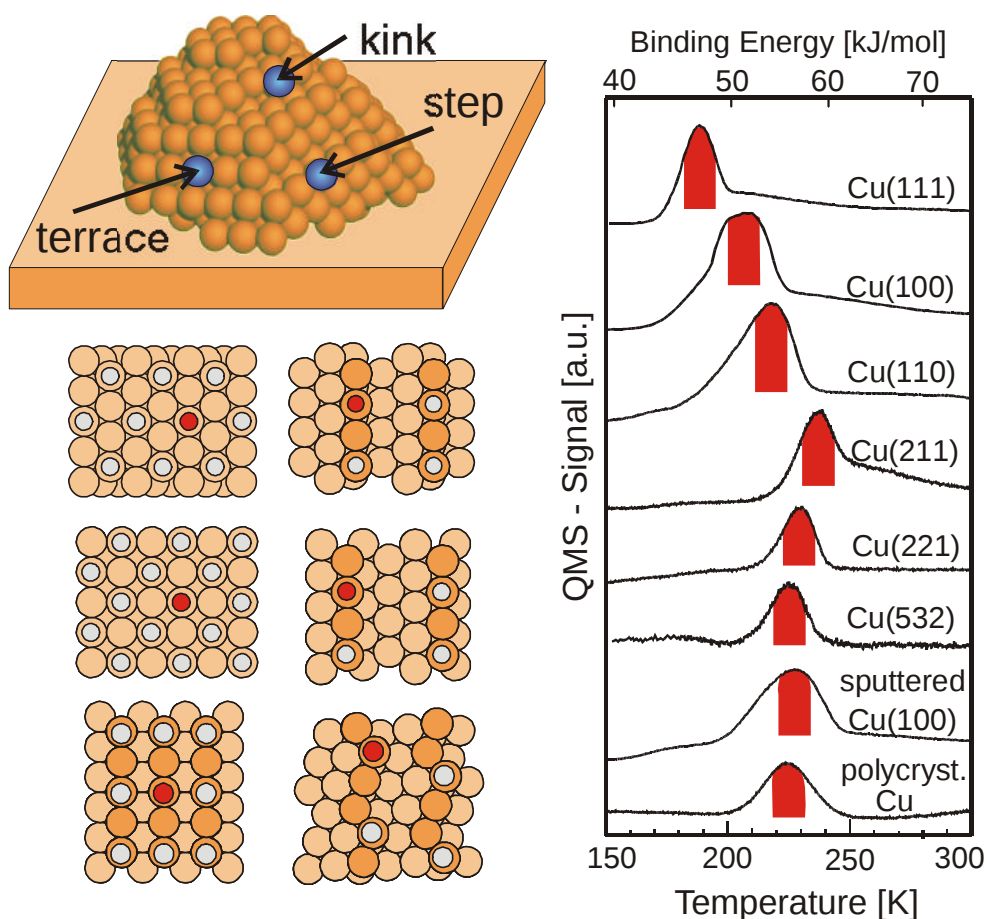
Tel.: ++49-(0)234-32-24222; FAX: ++49-(0)234-32-14182

email: witte@pc.ruhr-uni-bochum.de

<http://www.pc.ruhr-uni-bochum.de/~witte>

S. Vollmer, G. Witte and Ch. Wöll, *Catal. Lett.* **77** (1-3), 97 (2001). Determination of site specific adsorption energies of CO on copper.

The binding energies of (isolated) CO molecules adsorbed at several atomic sites (terrace, step, kink) on a number of differently oriented copper surfaces have been measured by thermal desorption spectroscopy (TDS). In addition to the three low indexed Cu-surfaces several regular stepped and kinked single crystal surfaces have been employed. Using LEED measurements together with available data in the literature allowed to identify the various different CO-adlayers and to assign the different TDS-binding energies to the different adsorbate sites.



Die Adsorptionsenergie einzelner CO-Moleküle auf unterschiedlichen Gitterplätzen (wie z.B. Terrassen, Stufen, Kinken) wurde für eine Reihe unterschiedlich orientierter Kupferoberflächen mittels thermischer Desorptionsspektroskopie (TDS) bestimmt. Die Zuordnung der gemessenen Bindungsenergien mit den unterschiedlichen Gitterplätzen erfolgte mit Hilfe von Elektronenbeugung (LEED) für die verschiedenen CO-Phasen sowie anhand der in der Literatur bekannten Adsorptionsgeometrien.

Friedrich Stuhl

Physikalische Chemie I - Laser- und Luftchemie

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226713; Fax: ++49-(0)234-3214656

email: friedrich.stuhl@ruhr-uni-bochum.de; <http://ruhr-uni-bochum.de/agstuhl>

M. Kind, F. Stuhl, Y.-R. Tzeng, M. H. Alexander und P. J. Dagdigian, J. Chem. Phys. **114**, 4479 (2001). Fine-structure state resolved rotationally inelastic collisions of $\text{CH}(A^2\Delta, v=0)$ with Ar: A combined experimental and theoretical study.

Relaxationserscheinungen in Methyldin-Radikalen

Kleine Moleküle können quantenmechanisch bezüglich Schwingung, Rotation, Spineinstellung, Λ -Dublett-Komponente und Elektronenkonfiguration exakt beschrieben werden. Moderne Lasermethoden ermöglichen aus der Mannigfaltigkeit der Quantenzustände einzelne anzuregen und zeitlich detailliert zu verfolgen. Wir haben dies für das CH-Radikal getan in Experimenten und mit Hilfe quantentheoretischer Berechnungen, um die Wirksamkeit von inelastischen Stößen zu untersuchen, die zur Zustandsrelaxation führen. Auf diese Weise erfährt man u.a. auf welche Weise, d.h. durch welche Einzelschritte, eine thermische Zustandsverteilung zustande kommt. Methyldyne (CH) Radikale spielen als kleinstes organisches Molekül eine wichtige Rolle, z.B. bei der Energieerzeugung durch fossile Brennstoffe. Die blaue Farbe der gezeigten Ethanolflamme entsteht beispielsweise durch die $\text{CH}(A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi)$ -Emission.



Rotational relaxation of methyldyne states by inelastic collisions

By molecular quantum mechanics small molecules in a selected electronic state can be characterized by well defined vibrational and rotational levels, and the Λ -doublet component and spin label. Modern laser excitation methods allow the preparation of such single states given by their quanta and labels. These state properties will be changed in inelastic collisions causing relaxation. We have investigated state-to-state rate constants for the CH(A) state in spectroscopic experiments and quantum chemical calculations to establish propensity rules. This way, we know the kinetics of the single steps leading, for example, to a Boltzmann distribution. The methyldyne (CH) radical, the smallest hydrocarbon species, plays an important role in combustion processes as is evident from the blue color of the ethanol flame shown in the figure, which is caused by the $\text{CH}(A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi)$ -transition.

Martina Havenith

Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224249; FAX: ++49-(0)234-3214183

email: martina.havenith@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2>

Infrarotspektroskopie an einem Prototypen für intermolekulare Wechselwirkung: Ar-CO

M. Havenith, Infrared Spectroscopy of Molecular Clusters –An Introduction of Molecular Forces, Springer Tracts in Modern Physics Volume **176**, ISBN 3-540-42691-4

Ziel der Untersuchungen am Lehrstuhl ist die Untersuchung einzelner Prototypen für ein verbessertes Verständnis der intermolekularen Wechselwirkung. Mittels hochauflösender Laserspektroskopie werden die Energien der intermolekularen Moden vermessen. Die Ergebnisse können dann mit den Resultaten der neuesten theoretischen *ab initio* Modelle verglichen werden. Von den verschiedenen Beiträgen zur intermolekularen Wechselwirkung (Elektrostatik, Induktion, Dispersion, Repulsion) stellen gerade korrekte Beschreibungsmodelle für Dispersion und Repulsion große Herausforderungen an die Theorie. Als Prototyp wurde daher der Ar-CO Komplex gewählt, da die Bindungsenergie im Ar-CO zu 98% von einem Wechselspiel zwischen anziehender Dispersion und abstoßender Repulsion geprägt ist. Bei einem Vergleich der Potentiale zeigt sich, daß die bisherigen theoretischen Methoden nicht in der Lage sind, ein adäquates Modell für diesen Prototypen zu erhalten:

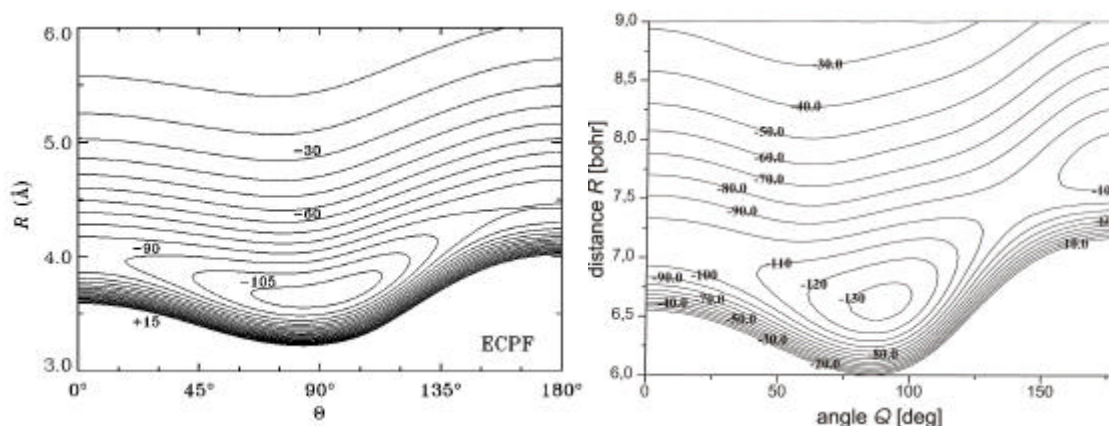


Abb: a) Angepaßtes *ab initio* Potential von Jansen b) Semi-empirisches Potential aufgrund der Messungen

Our goal is the investigation of single prototype systems to obtain an improved understanding of the intermolecular interaction. Using high resolution laser spectroscopy we have measured the energies of the intermolecular modes. The results could be compared with the results of the most recent *ab initio* methods. Considering the different contributions to intermolecular forces (electrostatic, induction, dispersion, repulsion) dispersion and repulsion are a big challenge for theory. We have chosen Ar-CO since 98 % of the binding energy can be obtained as a balance of attractive dispersion and repulsive repulsion interaction. When comparing the potentials we can conclude that current theoretical methods are not able to provide an adequate description for this prototype system.

Hermann Weingärtner

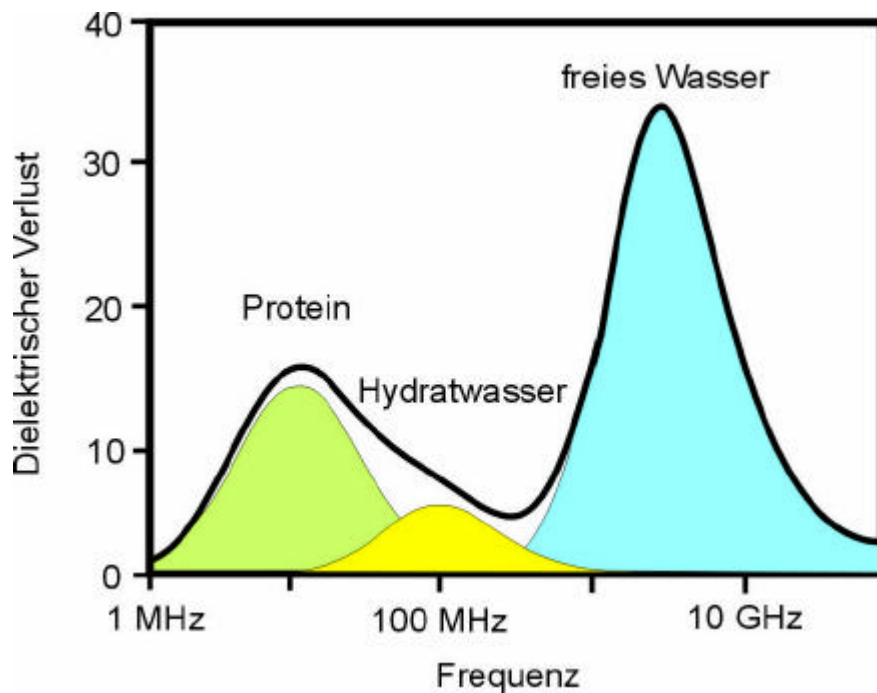
Physikalische Chemie II – Physikalische Chemie der Flüssigkeiten
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum
Tel. ++49-(0)234-32-25535; Fax: ++49-(0)-321-4293
e-mail: hermann.weingaertner@ruhr-uni-bochum.de

H. Weingärtner, A. Knocks, S. Boresch, P. Höchtel, O. Steinhauser, *J. Chem. Phys.*, 2001, **115**, 1463 - 1472. Complex Dielectric Spectra of Aqueous Solutions of Saccharides. - Experiment Meets Simulation.

und

A. Knocks, H. Weingärtner, *J. Phys. Chem. B*, 2001, **105**, 3635-3638. The Dielectric Spectrum of Ubiquitin in Aqueous Solution.

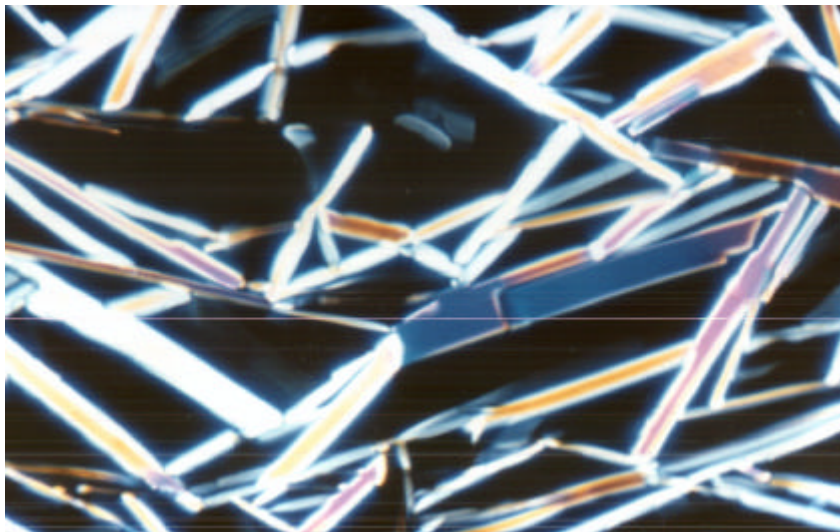
Die Frequenzabhängigkeit der Dielektrizitätskonstanten im Megahertz- und Gigahertzbereich liefert wertvolle Informationen über die Struktur und Dynamik von Molekülen in der flüssigen Phase. Dielektrische Spektren von Biomolekülen wie z.B. Proteinen in Lösung sind jedoch komplex und schwierig interpretierbar. In einem gemeinsamen Projekt mit O. Steinhauser und Mitarbeitern (Institut für Theoretische Chemie und Molekulare Strukturbioogie der Universität Wien) wurde erstmals gezeigt, daß eine durch molekuladynamische Simulationen gestützte Auswertung experimenteller dielektrischer Spektren zu einer eindeutigen Zuordnung der verschiedenen Beiträge führt. Das Verfahren wurde anhand von experimentellen Ergebnissen für wäßrige Lösungen von Sacchariden entwickelt und anhand von experimentellen Ergebnissen für das kleine globuläre Protein Ubiquitin erstmals auf größere Biomoleküle in Lösung angewandt. Die detaillierte Auswertung der Spektren ergibt grundlegende Informationen über den Zustand des Wassers an der Proteinoberfläche.



Albert Würflinger

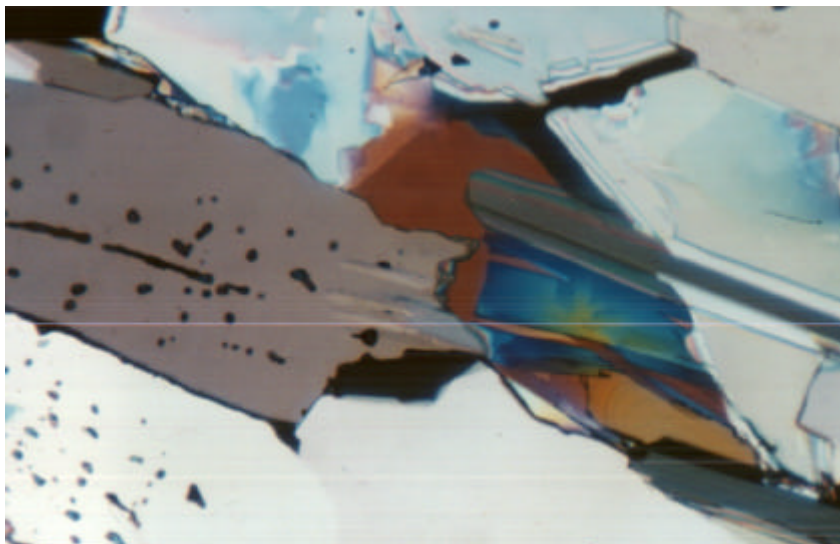
Physikalische Chemie II – Plastische und flüssige Kristalle
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum
Tel. ++49-(0)234-32-24258; Fax: ++49-(0)-321-4183
e-mail: Albert.Wuerflinger@ruhr-uni-bochum.de

In unserer Gruppe werden plastische und flüssige Kristalle mit verschiedenen Methoden unter Druck untersucht: Differentialthermoanalyse (DTA), Dilatometrie (pVT-Messungen) und dielektrische Messungen. Die thermodynamischen Messungen ergeben die p(T)-Phasendiagramme, aus denen die Koexistenzbereiche der jeweiligen Phasen abgelesen werden können, siehe zum Beispiel [4,7]. Aus dielektrischen Relaxationsmessungen erhält



man die Relaxationszeit, deren Druck- und Temperaturabhängigkeit Aktivierungsgrößen liefern, die mit den Molekülorientierungen verbunden sind [5].

In our group we investigate plastic and liquid crystals using different methods: differential thermal analysis (DTA), dilatometry (pVT measurements), and dielectric measurements. The



thermodynamic measurements enable us to establish (p,T) phase diagrams, displaying the coexistence ranges of the phases in question, see e.g. [4,7]. From dielectric relaxation measurements we obtain the relaxation time, the pressure and temperature dependence of which yield activation quantities which are associated with molecular rotations [5].

Gerhard M. Schneider

Lehrstuhl für Physikalische Chemie II, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum

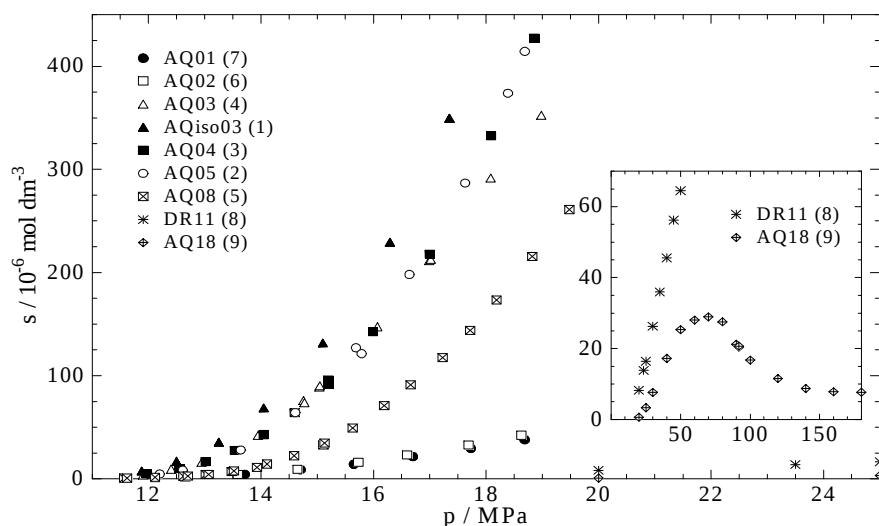
Tel. ++49-(0)234-32-24250; Fax: ++49-(0)-321-4183

e-mail: Gerhard.Schneider@ruhr-uni-bochum.de

D. Tuma, B. Wagner and G. M. Schneider, *Fluid Phase Equilibria* **182** (2001) 133–143
Comparative solubility investigations of anthraquinone disperse dyes in near- and supercritical fluids

Für Färbeverfahren aus nah- oder überkritischen Lösungsmitteln spielen die Löslichkeiten der eingesetzten Farbstoffe eine grundlegende Rolle. In der vorliegenden Untersuchung werden Gleichgewichtslöslichkeiten von Dispersionsfarbstoffen der homologen Reihe der 1,4-Bis-(alkylamino)-9,10-anthraquinone (mit alkyl von methyl (AC01) bis octadecyl (AC018)) sowie der Farbstoffe Disperse Red 11 (DR11) und Disperse Red 60 (DR60) in mehreren nah- und überkritischen Lösungsmitteln (CO_2 , N_2O , SF_6 , CClF_3) bis maximal 400 K und 180 MPa mitgeteilt und diskutiert. Die Abbildung zeigt ausgewählte Löslichkeits-Druck-Isothermen für 9 verschiedene Anthrachinonfarbstoffe in CO_2 bei 340 K. Der bestlösliche Farbstoff ist ACiso03 (1); die Zahlen entsprechen der Reihenfolge bezüglich abnehmender Löslichkeit. Das kleine Diagramm gibt die gleiche Auftragung für DR11 und AQ18 bis zu Drücken von 180 MPa wieder; hier durchläuft die Löslichkeit von AQ18 ein Maximum bei ca 70 MPa. Die Phänomene werden im Hinblick auf den Einfluß der Molekülgröße, der Substituenten, der Polarität und der Kristallmodifikation der Farbstoffe sowie der verschiedenen nah- bzw. überkritischen Lösungsmittel diskutiert.

For dyeing processes in near- and supercritical fluid solvents the dyestuff solubilities play an important role. In the present study equilibrium solubilities of some dispersion dyestuffs taken from the homologous series of the 1,4-bis-(alkylamino)-9,10-anthraquinones (with alkyl from methyl (AC01) to octadecyl (AC18)) and additionally for Disperse Red 11 (DR11) and Disperse Red 60 (DR60) in several near- and supercritical fluid solvents (CO_2 , N_2O , SF_6 , CClF_3) up to 400 K and 180 MPa are presented. The figure shows solubility-pressure isotherms for 9 different dyestuffs in CO_2 at 340 K, the best soluble being ACiso03. The numbers correspond to the sequence of decreasing solubility. In the small diagram the same plots are given for DR11 and AQ18 for pressures up to 180 MPa; here a maximum solubility in CO_2 is found for AQ18 at about 70 MPa. The effects are discussed with respect to the molecular size, the different substituents, the polarity and the crystalline modification of the dyestuffs and the different near- and supercritical solvents.



William S. Sheldrick

Lehrstuhl für Analytische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

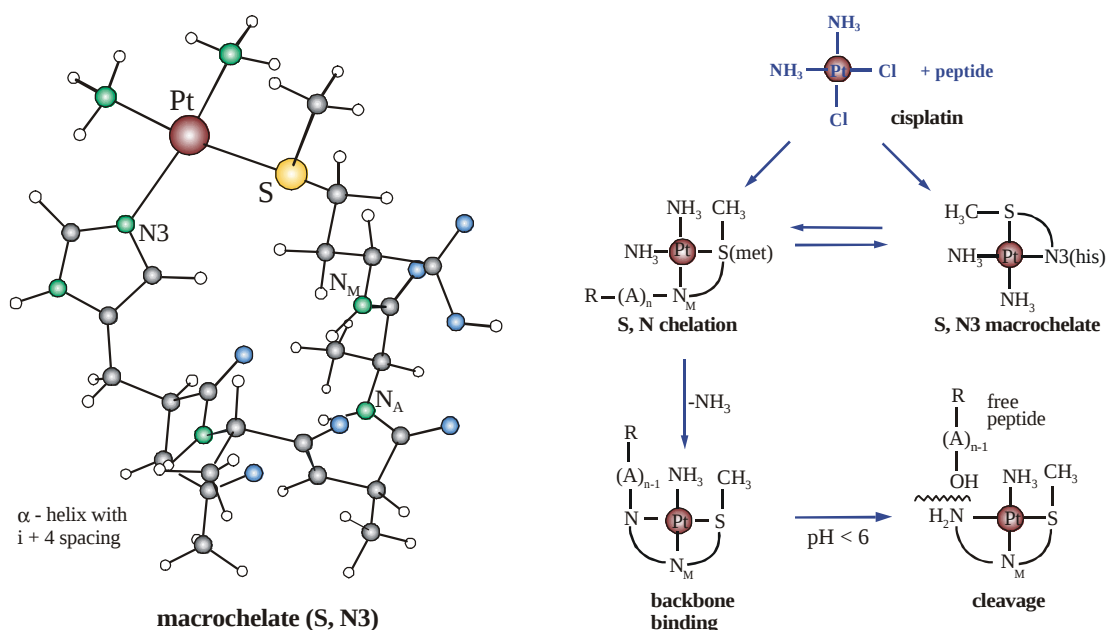
Tel: ++49(0)234-3224192; Fax: ++49-(0)234-3214420

email: shel@anachem.ruhr-uni-bochum.de

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

M. Hahn, M. Kleine, W. S. Sheldrick, *J. Biol. Inorg. Chem.* 6 (2001) 556-566. Interaction of cisplatin with methionine- and histidine-containing peptides - competition between backbone binding, macrochelation and peptide cleavage

Interesse an der konzentrationsabhängigen Nephrotoxizität des Cisplatin, $cis-(NH_3)_2PtCl_2$, sowie der möglichen Signifikanz von methioninhaltigen Platinkomplexen für den Reaktionsweg dieses Antitumormittels hat zu unseren aktuellen chromatographischen und spektroskopischen Studien geführt. Diese weisen erstmals daraufhin, dass Makrochelation kinetisch mit der Koordination des Peptid-Rückgrats konkurrieren kann. Von besonderem Interesse ist der Befund, dass nach Ammoniakverlust, der letztere tridentate Koordinationsmodus zu Peptidspaltung führt, auch bei relativ hohen pH-Werten (5-6).



Reaction of cisplatin with peptides such as Ac-his-(ala)₃-met-OH

Interest in the concentration-dependent nephrotoxicity of cisplatin $cis-(NH_3)_2PtCl_2$ and the possible significance of Pt-S bonding to methionine-containing peptides for both this phenomenon and for the formation of a platinum reservoir prior to DNA binding led to our current chromatographic and spectroscopic studies. These demonstrate for the first time that macrochelation is kinetically competitive with peptide backbone binding. Of particular interest is our novel finding that, following ammonia loss, tridentate Pt binding initiates peptide cleavage, even at relatively high pH values (5-6). This reaction must, therefore, be of general significance for cisplatin metabolism.

Iris Müller

Analytische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

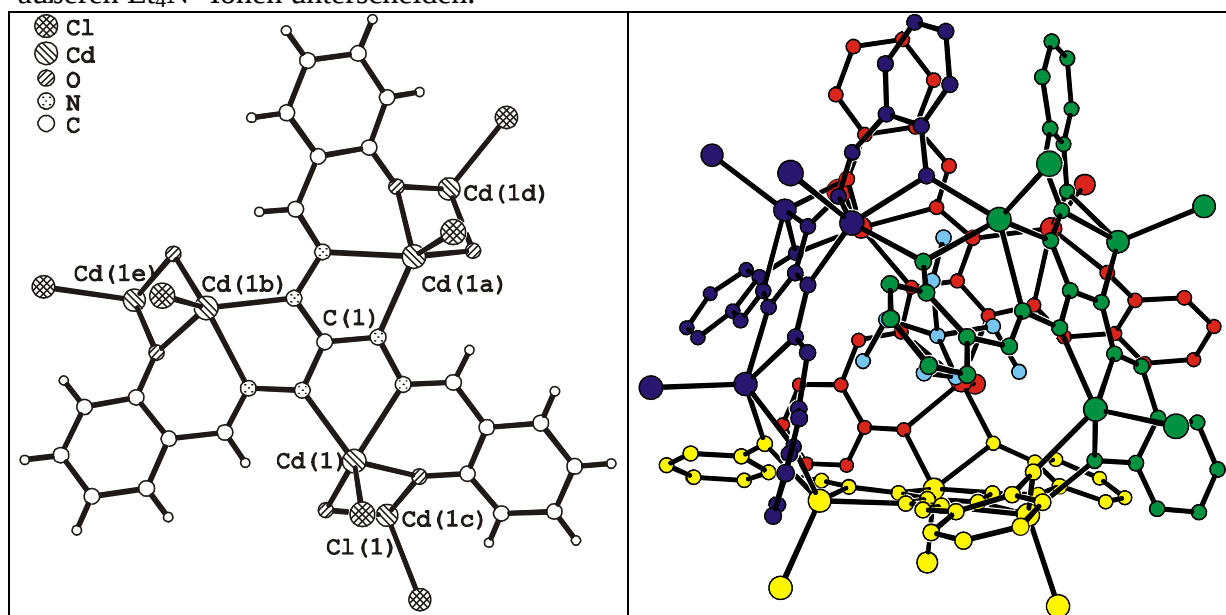
Tel.: ++49-(0)234-3224200; FAX: ++49-(0)234-3214420

email: iris@anachem.ruhr-uni-bochum.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/iris/index.htm>

I. M. Müller, R. Robson, F. Separovic, *Angew. Chem.* **113** (2001) 4519-4520. Eine metallhaltige, supramolekulare Kapsel mit der Topologie eines Tetraeders, 3^3 , aufgebaut aus vier Guanidinliganden und zwölf Cadmiumzentren. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **40** (2001) 4385-4386. A Metallosupramolecular Capsule with the Topology of the Tetrahedron, 3^3 , Assembled from Four Guanidine-based Ligands and Twelve Cadmium Centres

Die Reaktion von Tris-(2-hydroxybenzyl)triaminoguanidiniumchlorid mit Cadmiumchlorid in DMF führt in Anwesenheit von Et_4NOH zur Bildung von leuchtend gelben Kristallen der Zusammensetzung $(\text{Et}_4\text{N})_8[(\text{CdCl})_3\text{L}]_4 \cdot 4\text{DMF}$. Der Käfig ist ein Oktaanion und eines der acht Et_4N^+ -Gegenkationen ist im Inneren des Tetraeders eingeschlossen. Das Festkörper ^{13}C -NMR-Spektrum zeigt alle Banden, die für den Liganden und die DMF-Moleküle erwartet werden, sowie unterschiedliche Signale für die äußeren und das eingeschlossene Et_4N^+ -Kation. Die Verbindung weist leider in allen untersuchten Lösungsmitteln nur eine geringe Löslichkeit auf. In d_6 -DMSO bei 100 °C kann jedoch ausreichend Substanz gelöst werden, um ein ^1H -NMR Spektrum anzufertigen. Dieses zeigt, dass selbst unter diesen relativ harten Bedingungen die Löslichkeit nicht auf eine mögliche Zersetzung des Tetraeders zurückzuführen ist. Der Käfig bleibt intakt und das eingeschlossene Et_4N^+ lässt sich deutlich von den äußeren Et_4N^+ Ionen unterscheiden.



Reaction of tris-(2-hydroxybenzylidene)triaminoguanidiniumchloride with cadmium chloride in DMF in the presence of Et_4NOH gives bright yellow rhombic dodecahedral crystals of $(\text{Et}_4\text{N})_8[(\text{CdCl})_3\text{L}]_4 \cdot 4\text{DMF}$. The cage is an octa-anion and one of the eight Et_4N^+ counter cations is locked inside the enclosure. The solid state ^{13}C NMR spectrum shows all the features expected for the ligand components, the DMF molecules and the Et_4N^+ cations, both trapped and “external”. The compound unfortunately has very limited solubility in all solvents tested. However it is sufficiently soluble in d_6 -DMSO at 100°C to afford a ^1H NMR spectrum which reveals that, even under these relatively fierce conditions where it might be suspected that any minimal dissolution might be the result of decomposition, the cage remains intact with its trapped Et_4N^+ clearly differentiated from the “external” Et_4N^+ .

Wolfgang Schuhmann

Anal. Chem. - Elektroanalytik & Sensorik; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

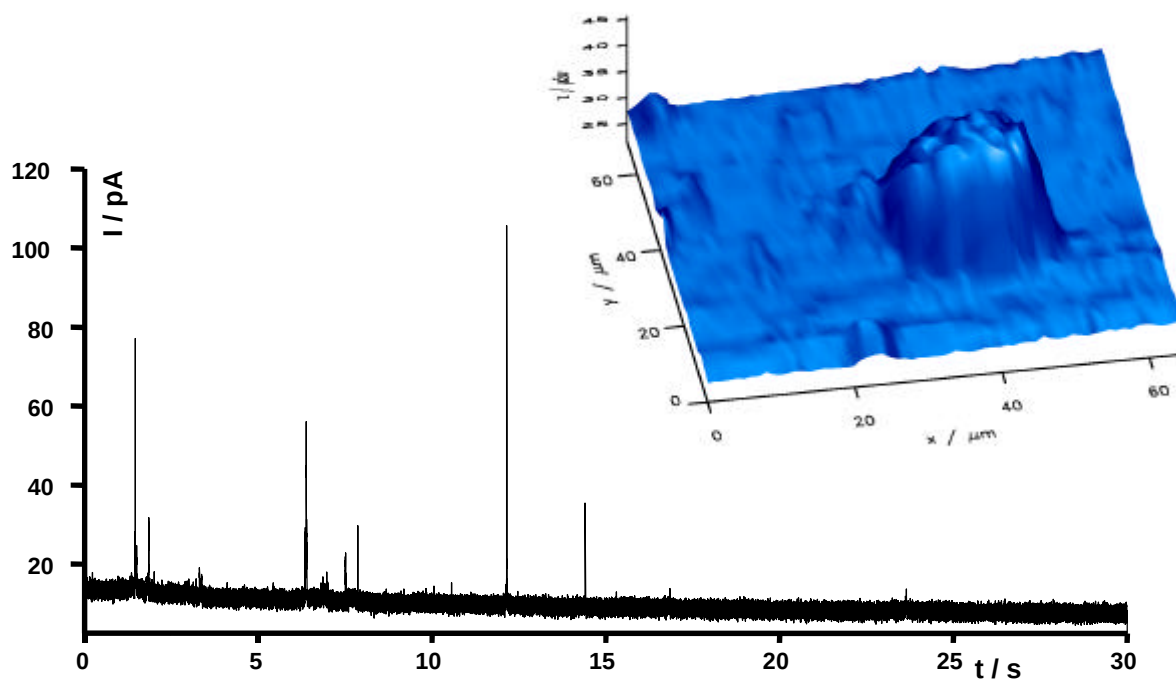
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683

email: Wolfgang.Schuhmann@ruhr-uni-bochum.de

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

A. Hengstenberg, A. Blöchl, I. D. Dietzel, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **113** (2001) 942-946. Ortsaufgelöste Detektion der Sekretion von Neurotransmittern aus einzelnen Zellen mittels elektrochemischer Rastermikroskopie. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **40** (2001) 905-908. Spatially Resolved Detection of Neurotransmitter Secretion from Individual Cells by Means of Scanning Electrochemical Microscopy.

Die Positionierung von Carbonfaser-Mikroelektroden mit optimierter Federkonstante und Schwingungseigenschaften in geringem Abstand von einer individuellen biologischen Zelle wird mittels einer Scherkraft-abhängigen Abstandskontrolle im elektrochemischen Rastermikroskop (SECM) erreicht. Mit der so positionierten Mikroelektrode kann die Ausschüttung von Neurotransmittern in einzelnen Exozytoseereignissen verfolgt werden.



Positioning of a carbon-fibre micro-electrode with optimised stiffness and vibration characteristics in close distance to an individual biological cell is achieved using a shear-force based constant-distance control in the scanning electrochemical microscope (SECM). With the properly positioned micro-electrode quantal release of neurotransmitters from individual cells can be monitored.

Dominik Marx

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

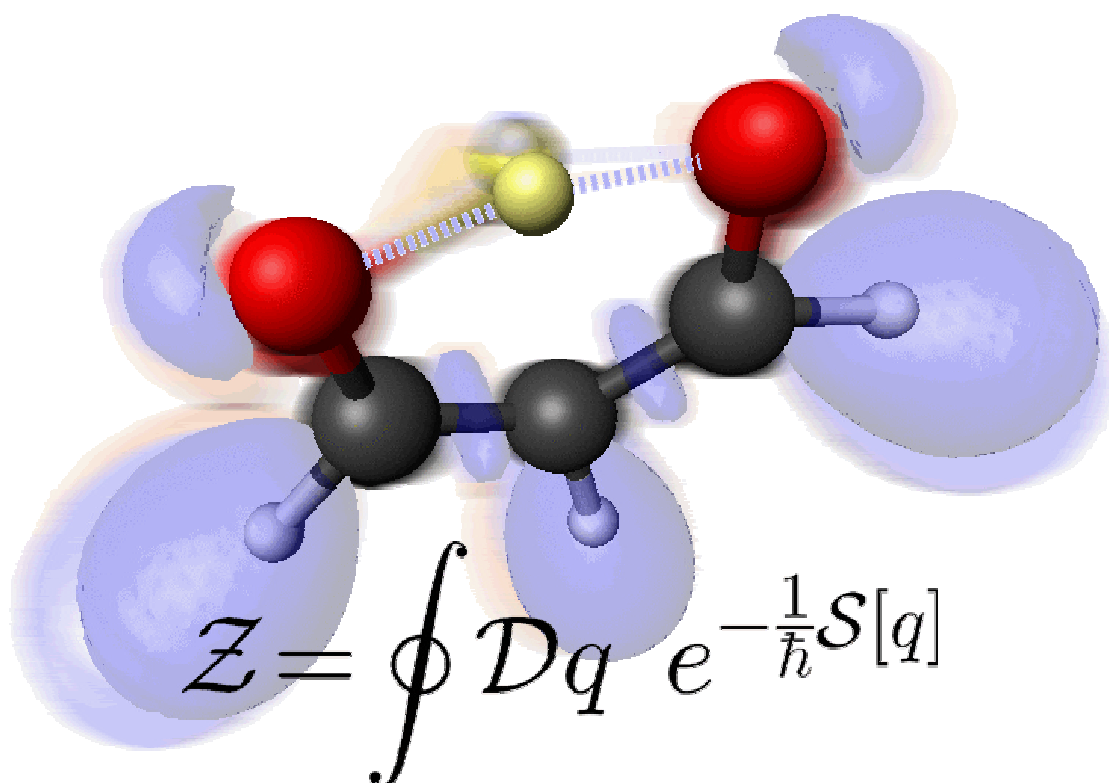
Tel.: ++49-(0)234-3228083; FAX: ++49-(0)234-14045

email: dominik.marx@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

M. E. Tuckerman and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 4946-4949. Heavy-Atom Skeleton Quantization and Proton Tunneling in 'Intermediate-Barrier' Hydrogen Bonds.

Mit Hilfe einer neuen aufwändigen Simulationstechnik ist es möglich, Protonentransfer im Computer zu simulieren und zu beobachten. Insbesondere können bei dieser vollständig quantenmechanischen Simulation im "Virtuellen Labor" die Quanteneffekte der benachbarten Schweratome willkürlich "an- und abgeschaltet" werden, in der obigen Arbeit O und C im Molekül Malonaldehyd. Dabei wurde überraschenderweise festgestellt, dass diese sekundären Effekte das Protonentunneln bei Raumtemperatur stark *begünstigen*.



Thanks to a novel simulation technique it is possible to simulate and observe proton transfer in the computer. In particular, it is possible to deliberately "switch on and off" quantum effects of the heavy atoms in the "virtual laboratory", as done here for O and C in malonaldehyde. As a surprise it was uncovered that these secondary effects *enhance* proton tunneling at room temperature considerably.

RUB Pressemitteilung:

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/pressemitteilungen-2001/msg00153.html>

Dynamische Animation: <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/go/malon.html>

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Highlights:

<http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/go/media.html>

Volker Staemmler

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

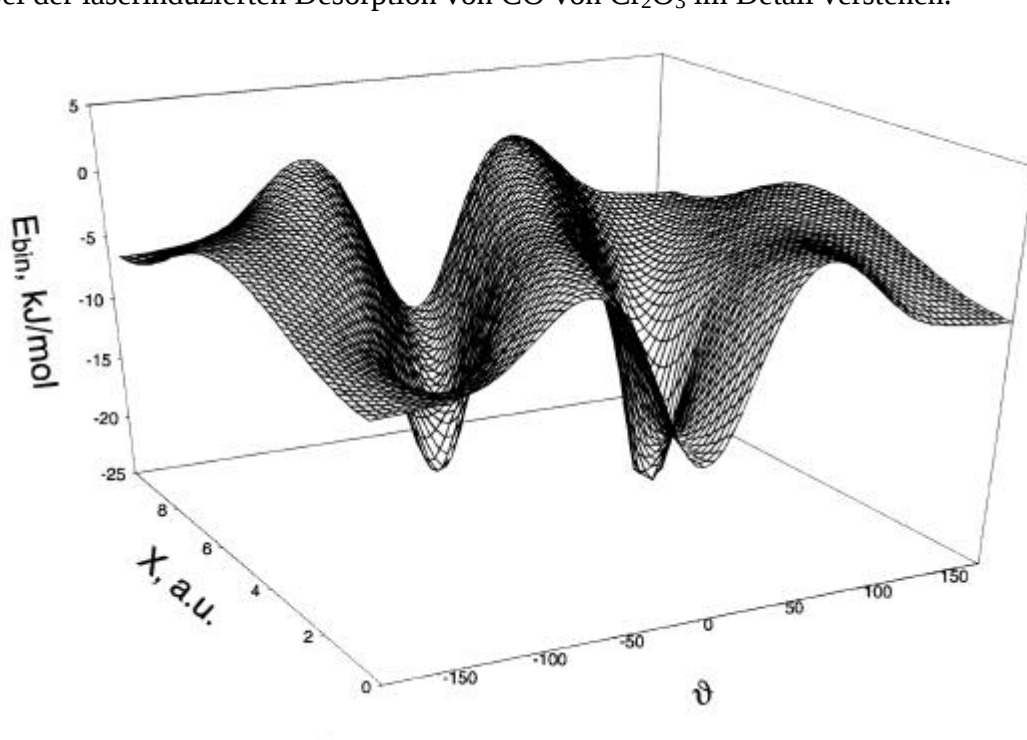
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

Email: volker.staemmler@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

M. Pykavy, V. Staemmler, O. Seiferth, H.-J. Freund, *Surf. Sci.* **479** (2001) 11. Adsorption of CO on Cr_2O_3 (0001).

Für ein Verständnis der Reaktionsabläufe in der heterogenen Katalyse ist die genaue Kenntnis der Adsorptionsgeometrien und –energien der Reaktionspartner an der beteiligten Festkörperoberfläche notwendig. Solche Eigenschaften werden in unserer Arbeitsgruppe mit quantenchemischen Methoden berechnet. Die Abbildung zeigt die Wechselwirkungsenergie eines CO-Moleküls mit einer Chromoxid-Oberfläche als Funktion des Verkipfungswinkels ϑ und der Position X von CO zwischen zwei Cr^{3+} -Ionen an der Oberfläche. Aus dieser „Potentialfläche“ lassen sich außer der Bindungsenergie und der optimalen Adsorptionsgeometrie auch dynamische Eigenschaften wie Diffusionskoeffizienten oder Desorptionswahrscheinlichkeiten herleiten. Gestützt auf die Berechnung analoger Potentialflächen für elektronisch angeregte Zustände von CO auf Chromoxid konnten wir erstmals experimentelle Beobachtungen bei der laserinduzierten Desorption von CO von Cr_2O_3 im Detail verstehen.



For an understanding of reaction processes in heterogeneous catalysis a detailed knowledge of the adsorption geometries and energies of the reaction partners at the respective solid surfaces is necessary. We are currently calculating such properties by means of quantum chemical methods. The figure shows the binding energy of a CO molecule adsorbed on a certain surface plane of chromium oxide, as a function of the tilt angle ϑ and the position X of CO between two Cr^{3+} ions at the surface. This “potential energy surface” allows to determine dynamic properties such as diffusion coefficients and desorption probabilities, apart from the binding energy and adsorption geometry. Similar potential energy surfaces have been calculated for electronic excited states of CO on chromium oxide and have been used successfully to analyze and understand the details of experimental observations in the laser induced desorption of CO from Cr_2O_3 .

Werner Kutzelnigg

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

Tel.: ++49-(0)234-3228482; FAX: ++49-(0)234-3214045

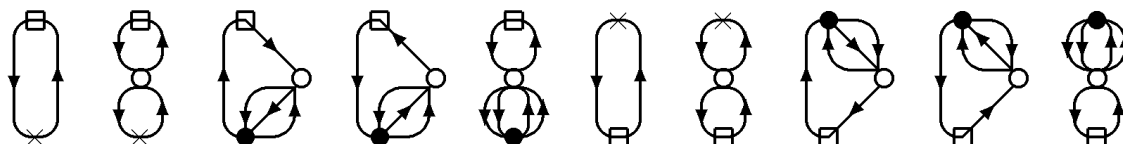
Email: werner.kutzelnigg@ruhr-uni-bochum.de

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

D. Mukherjee, W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **114** (2001) 2047-2061. Irreducible Brillouin conditions and contracted Schrödinger equations for n -electron systems. I. The equations satisfied by the density cumulants.

Während bei der traditionellen Quantenchemie die n -Elektronen-Wellenfunktion Ψ im Mittelpunkt steht, werden hier erstmalig die Einteilchen-Dichtematrix γ_1 und die Kumulanten λ_k der k -Teilchen-Dichtematrizen γ_k zur Beschreibung eines n -Elektronen-Atoms oder -Moleküls herangezogen. Diese Größen sind wesentlich kompakter als die Wellenfunktion Ψ , enthalten aber die gleiche *relevante* Information. Zudem haben sie den Vorteil, *extensive* Größen zu sein und mit der Größe des Systems linear zu skalieren, was auch für die Elektronendichte ρ gilt. Insofern besteht ein Zusammenhang zu den heute populären Dichtefunktionalansätzen, bei denen man die Energie als ein Funktional $E(\rho)$ nur von ρ ansetzt, das man allerdings grundsätzlich nicht kennt und nur raten kann. Die Energie $E(\gamma_1, \lambda_2)$ als Funktional von γ_1 und λ_2 ist dagegen explizit bekannt, und man kann im Sinne des Variationsprinzips γ_1 und λ_2 bestimmen. Es sind allerdings noch einige Fragen zu klären, bevor mit einer Computer-Implementation des neuen Ansatzes begonnen werden kann.

Die zu lösenden Gleichungen werden vorteilhaft durch Diagramme wie auf der beiliegenden Abbildung dargestellt. Jedes Diagramm entspricht dabei einem algebraischen Ausdruck, wobei z.B. ein dicker Punkt ein Matrixelement der Elektronenwechselwirkung und ein offener Kreis ein Matrixelement von λ_2 (oder λ_3) bedeutet. Die Linien mit Pfeilen symbolisieren Indices und zählen Spinorbitale. Das Verschwinden der Summe der angegebenen Diagramme ist eine Bedingung zur Bestimmung von γ_1 .



While in traditional Quantum Chemistry the n -electron wave function Ψ plays the central role, now the one-particle density matrix γ_1 and the cumulants λ_k of the k -particle density matrices γ_k are used for the first time to describe an n -electron-atom or -molecule. These quantities are much more compact than the n -electron wave function Ψ , but they contain the same *relevant* information. Moreover they have the advantage of being *extensive* and scaling linearly with the size of the system, as does the electron density ρ . Insofar there is a relation to the popular density functional theory, in the frame of which one tries to formulate the energy as a functional of ρ . While the *exact* functional $E(\rho)$ is not known, and one can only guess approximations to it, one does know explicitly the energy $E(\gamma_1, \lambda_2)$ as a functional of γ_1 and λ_2 . One can use the variational principle, to determine γ_1 and λ_2 . However, some questions need still to be answered, before a computer implementation of the new method can be started.

The equations to be solved are conveniently represented by diagrams, as in the enclosed figure. Each diagram corresponds to an algebraic expression, e.g. a full circle represents a matrix element of the electron interaction, and an open circle a matrix element of λ_2 (or λ_3). Lines with arrows symbolize indices and count spin-orbitals. Vanishing of the sum of the indicated diagrams is a condition for the determination of γ_1 .

Martin Muhler

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

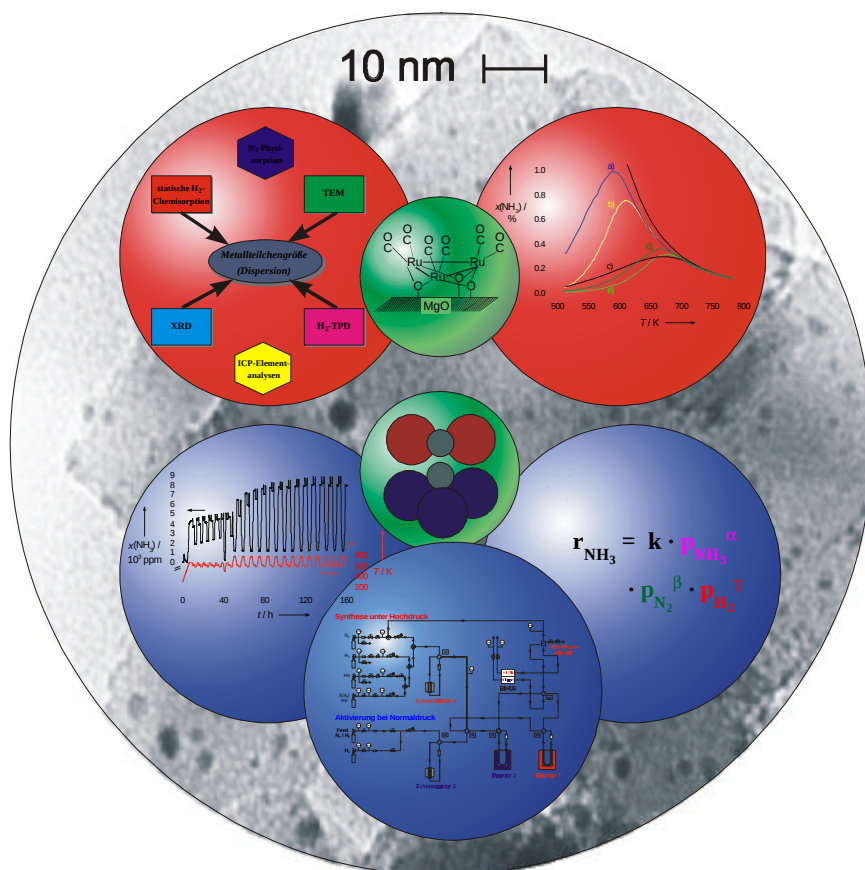
Tel.: ++49-(0)234-3226745; Fax: ++49-(0)234-3214115

email: muhler@techem.ruhr-uni-bochum.de

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

Hubert Bielawa, Olaf Hinrichsen, Alexander Birkner, Martin Muhler*, *Angew. Chem.* **113** (2001) 1093-1096. Der Ammoniakkatalysator der nächsten Generation: Barium-promotiertes Ruthenium auf oxidischen Trägern. *Angew. Chem. Int. Ed.* **40** (2001) 1061-1063. The Ammonia-Synthesis Catalyst of the Next Generation: Barium-Promoted Oxide-Supported Ruthenium.

Die Synthese von Ammoniak stellt mit einem Bedarf von etwa 1 % der Weltenergieproduktion einen der größten Einzelenergieverbraucher der industrialisierten Welt dar. Durch eine wissensbasierte Optimierung ist es uns gelungen, einen Ba-Ru/MgO-Katalysator zu entwickeln, dessen Aktivität die der bisher als Alternative zum industriellen Eisen-Katalysator angesehenen Ru/C-Katalysatoren übertrifft. Wir gehen davon aus, dass auf oxidischem Material geträgerte und mit Barium-Verbindungen promotorierte Ruthenium-Katalysatoren die Ammoniak-katalysatoren der nächsten Generation darstellen.



Ammonia synthesis belongs to the largest energy consuming processes of the industrialized world requiring approximately 1 % of the world power production. Employing a knowledge-based optimization we were able to develop a Ba-Ru/MgO catalyst which is far more active than the Ru/C catalysts which are considered an alternative to the industrially used iron catalyst up to now. Consequently, the barium-promoted ruthenium catalyst supported on oxides represents the ammonia synthesis catalyst of the next generation.

Kai-Olaf Hinrichsen

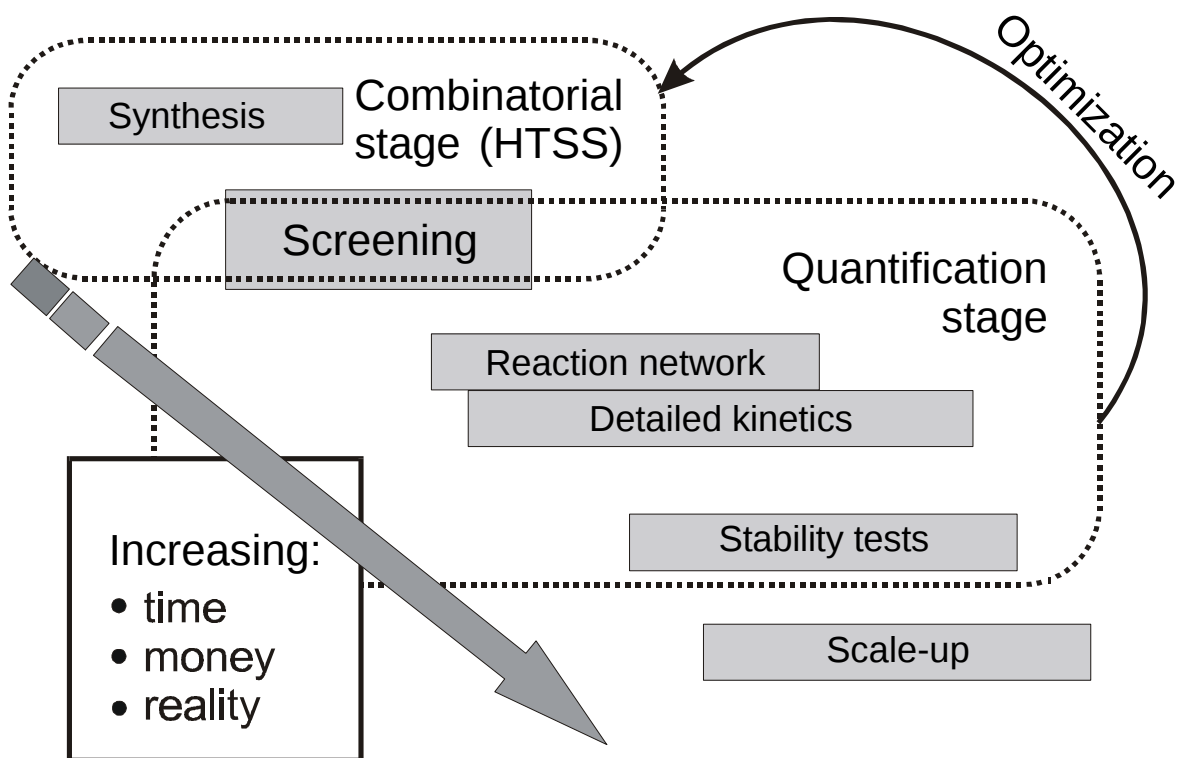
Lehrstuhl für Technische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226907; Fax: ++49-(0)234-3214115

email: olaf@techem.ruhr-uni-bochum.de; <http://www.techem.ruhr-uni-bochum.de>

Hubert Bielawa, Melanie Kurtz, Thomas Genger, Olaf Hinrichsen* *Ind. Eng. Chem. Res.* 40 (2001) 2793-2800. Rapid Kinetic Measurements in Methanol and Ammonia Syntheses

Um eine Vielzahl an präparierten Katalysatoren bezüglich ihrer Kinetik vermessen zu können, muss eine Methode zur schnellen Ermittlung kinetischer Daten eingesetzt werden. Üblicherweise wird bei heterogen-katalysierten Reaktionen eine detaillierte Kinetikstudie im parallelisierten Betrieb von Minifestbettektoren unter Variation der Prozessparameter (Druck, Temperatur, modifizierte Verweilzeit, Partialdruckvariation etc.) durchgeführt. Zu einer effizienten und schnellen Ermittlung der katalytischen Aktivität bei der Ammoniaksynthese konnte die „quasi-isotherme temperatur-programmierte“ Fahrweise entwickelt werden. Parallel zu dieser Screening-Methode wurden weitere Experimente, die unter instationären Reaktionsbedingungen durchgeführt werden, zu Fingerprint-Methoden entwickelt.



In order to measure the kinetics of plenty catalysts, a method must be used for the fast acquirement of kinetic data. Usually a detailed kinetic study in heterogeneous catalysis is performed by a parallelized operation of laboratory fixed-bed reactors applying a variation of the process parameters (pressure, temperature, modified space time, partial pressure variation etc.). The method of „quasi-isothermal temperature-programming“ has been applied successfully to study the kinetics of ammonia. Parallel to this screening method further transient experiments were developed as fingerprint methods.

Wolfgang Grünert

Lehrstuhl Technische Chemie, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

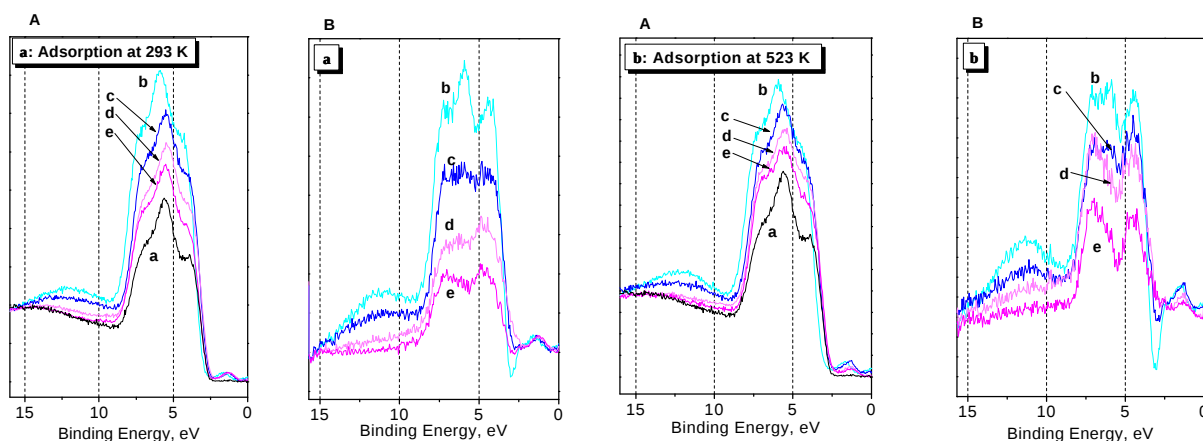
Tel.: ++49-(0)234-3222088; FAX: ++49-(0)234-3214115

email: W.Gruenert@techem.ruhr-uni-bochum.de

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

M. Heber, W. Grünert, *Top. Catal.* **15** (2001) 3-11. Application of Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS) in the Surface Characterisation of Polycrystalline Oxide Catalysts I. Methodics and Analytical Potential

Polycrystalline oxide surfaces have been investigated by a combination of photoemission and ion-scattering techniques (UPS, XPS, ISS) to assess the analytical potential of UPS for the surface characterisation of real polycrystalline oxide catalysts. UP spectra can be obtained from a number of binary and ternary oxides when the measurement is performed at appropriate temperatures in order to ensure sample conductivity sufficient to avoid surface charging. Where applicable, UPS provides enhanced surface sensitivity (as compared to XPS) and chemical sensitivity permitting the identification of surface structures and adsorbates. Examples are the detection of V^{4+} species in the outmost surface layer(s) of V_2O_5 , the identification of chemical compounds on bismuth molybdate surfaces on a fingerprint, and the study of N-containing adsorbates formed in the interaction of V_2O_5 with NH_3 .



UPS study of the interaction of polycrystalline V_2O_5 with NH_3 . A – UP spectra, NH_3 adsorption at 293 K (α) or at 523 K (β); spectra a - untreated surface b – after adsorption of NH_3 , c – e, during thermal evacuation at 473 K (c), 673 K (d), 773 K (e), B – difference spectra

Oberflächen polykristalliner Oxide wurden durch eine Kombination von Photoemissions- und Ionenstreutechniken (UPS, XPS, ISS) untersucht, um das analytische Potenzial der UPS für die Oberflächencharakterisierung realer polykristalliner Oxidkatalysatoren zu erkunden. Wenn die Messung bei erhöhten Temperaturen geschieht, um ausreichende Leitfähigkeit zur Vermeidung von Aufladungseffekten zu gewährleisten, können von einer Reihe binärer und ternärer Oxide UP-Spektren gewonnen werden. Wo anwendbar, bietet UPS eine gegenüber XPS verbesserte Oberflächenempfindlichkeit, dazu chemische Sensitivität, die eine Identifizierung von Oberflächenstrukturen und Adsorbaten gestattet. Als Beispiele sind der Nachweis von V^{4+} in der äußersten Lage von V_2O_5 , die Identifizierung chemischer Verbindungen auf Bismuth-Molybdat-Oberflächen im Fingerprintverfahren sowie die Untersuchung von N-Adsorbaten aus der Wechselwirkung von V_2O_5 mit NH_3 beschrieben.

Michael Hollmann

Lehrstuhl Biochemie I - Rezeptorbiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

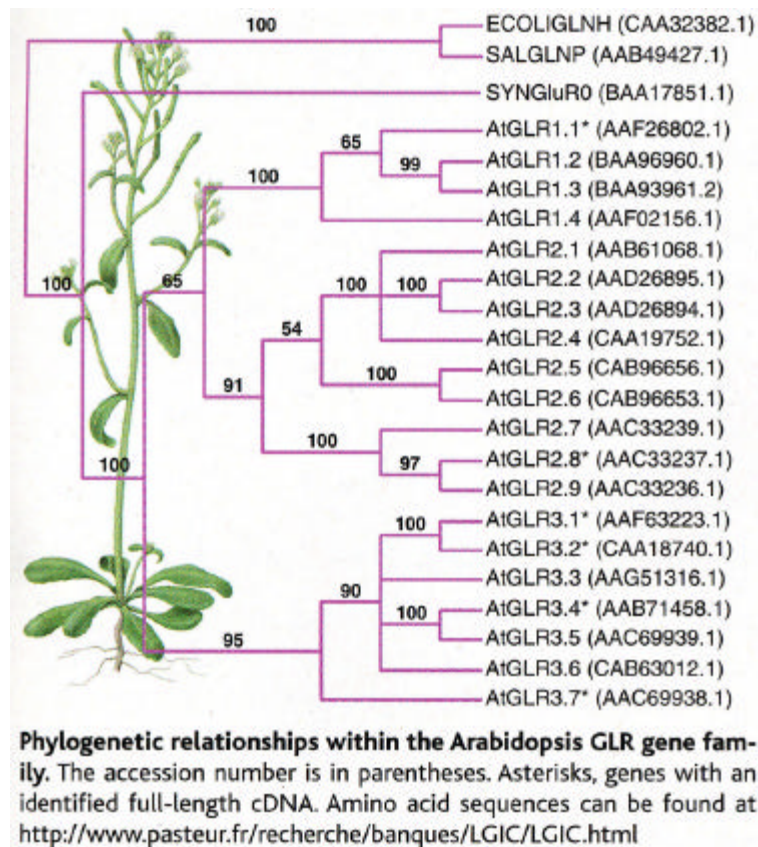
Tel.: ++49-(0)234-3224225 FAX: ++49-(0)234-3214244

E-mail: Michael.Hollmann@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/receptor-bioch.html>

B. Lacombe, D. Becker, R. Hedrich, R. DeSalle, M. Hollmann, J.M. Kwak, J.I. Schroeder, N. Le Novere, H.G. Nam, E.P. Spalding, M. Tester, F.J. Turano, J. Chiu, and G. Coruzzi (2001). The identity of plant glutamate receptors. *Science* **292**: 1486-1487.

Die Analyse des kürzlich komplett sequenzierten Genoms von *Arabidopsis thaliana* ergab den völlig unerwarteten Befund, daß dieses Ackerunkraut 20 putative Glutamaterezeptorgene besitzt. Diese überraschende Beobachtung wird mit Sicherheit ein Rennen um die Identifizierung der Signaltransduktionswege auslösen, bei denen diese Rezeptoren eine Rolle spielen. In diesem in der *Compass*-Sektion der Zeitschrift *Science* veröffentlichten Beitrag haben sich die an Pflanzenglutamaterezeptoren arbeitenden Gruppen zusammengetan und eine einheitliche, auf phylogenetischen Verwandtschaftsverhältnissen beruhende Nomenklatur als Grundlage zukünftiger Arbeiten zur Physiologie von Pflanzenglutamaterezeptoren konzipiert.



Analysis of the recently sequenced genome of the plant *Arabidopsis thaliana* revealed the unexpected presence of 20 putative glutamate receptor genes. This surprising observation is certain to trigger a race for the identification of those signal transduction pathways in the plant that utilize these receptors. In this note published in the *Compass* section of *Science* the major laboratories working on plant glutamate receptors got together, compared their data and agreed on a unified nomenclature for the emerging field of plant glutamate receptor physiology.

Rolf Heumann

Biochemie II-Molekulare Neurobiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: rolf.heumann@ruhr-uni-bochum.de

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

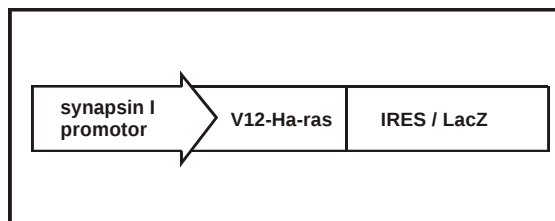
R.Heumann: Krebsgen gegen Nervenleiden :Rubin 1, 12- 16 (2001)

R. Heumann, C. Goemans, D. Bartsch, K. Lingenhöhl, P.C. Waldmeier, B. Hengerer, P.R. Allegrini, K. Schellander, E.F. Wagner, T. Arendt, R.H. Kamdem, K. Obst-Pernberg, F. Narz, P. Wahle and H. Berns: Transgenic Activation of Ras in Neurons Promotes Hypertrophy and Protects from Lesion-Induced Degeneration. J Cell Biol. 151(7), 1537-1548 (2000).

Das permanent aktivierte Signalprotein Ras ist in vielen Tumoren zu finden und ist Teil der Kaskade von Mutationen in Proto-Oncogenen, die zur Krebsentstehung führen. Durch Einführung dieses permanent aktivierten Ras-Gens in Nervenzellen von Mäusen (synRas-transgene Mäuse, Abb. A) wird unter Verwendung eines neuronalen Promotors für Synapsin die Aktivität des Ras „gebündelt“: Das Absterben der Nervenzellen, die aktiviertes Ras synthetisieren, wird nach Verletzung des Gesichtsnervs (*nervus facialis*) bei synRas Mäusen verhindert (vergleiche Abb. B1 mit B2). Darüber hinaus werden in einem Mäusemodell der Parkinson'schen Krankheit die betroffenen dopaminergen Nervenzellen aus der Gehirnregion der *substantia nigra* vor dem Absterben geschützt und bleiben in ihrer Funktion erhalten. Wir arbeiten daran, diesen Befund zur Entwicklung neuer Heilungsverfahren bei neurodegenerativen Krankheiten, wie der Parkinson'schen Krankheit heranzuziehen.

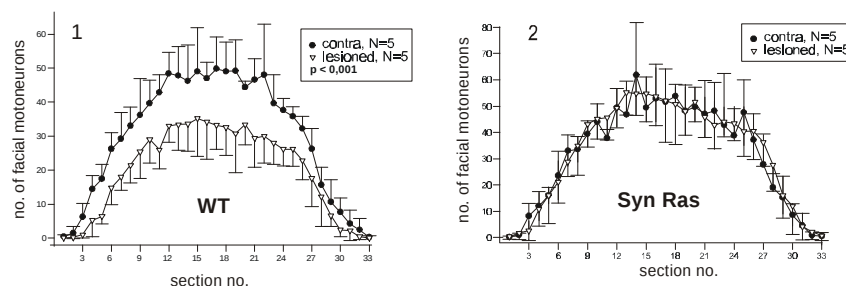
A

Syn Ras DNA construct



B

Protection of motoneurons 4 weeks after facial nerve lesion



Ras is an universal eukaryotic intracellular protein integrating extracellular signals from multiple receptor types. To investigate the effects of Ras activity in the brain of the adult nervous system, constitutively activated Val12- Ha-Ras was expressed selectively in neurons of transgenic mice using a neuronal synapsin promoter (fig. A). In the resulting synRas-transgenic mice degeneration of motoneurons was completely prevented after facial nerve lesion (figs B1/B2). Furthermore, neurotoxin-induced degeneration of dopaminergic substantia nigra neurons and their striatal projections was greatly attenuated. Neuronal Ras activation might become a tool to stabilize donor neurons for neural transplantation and to protect neuronal populations in neurodegenerative diseases.

Kai Sven Erdmann

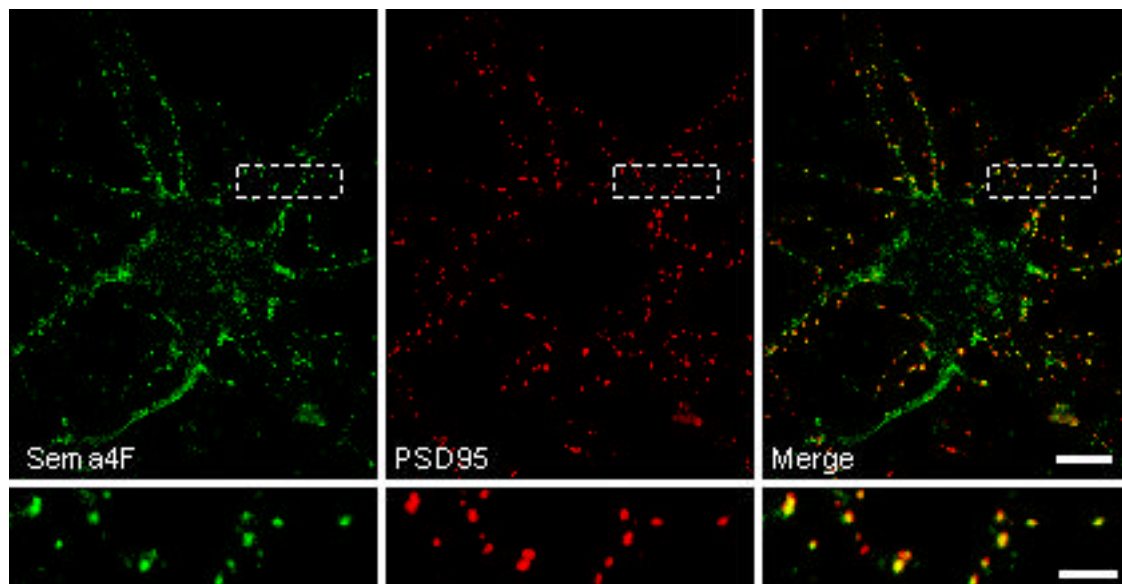
Lehrstuhl für Molekulare Neurobiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225774; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: kai.s.erdmann@ruhr-uni-bochum.de

W. Schultze, V. Eulenburg, V. Lessmann, L. Herrmann, T. Dittmar, E. D. Gundelfinger, R. Heumann, K.S. Erdmann, *J. Neurochem.* **78** (2001) 482-489. Semaphorin4F interacts with the synapse-associated Protein SAP90/PSD-95

Semaphorine sind eine Familie von sekretierten und membranassoziierten Proteinen, die in der Steuerung von Wachstumskegeln während der Entwicklung eine Rolle spielen. Wir zeigen, dass das transmembrane Semaphorin4F in der Lage ist mit dem Synapsen-assoziierten Protein SAP90/PSD-95 zu interagieren. Semaphorin4F colokalisiert mit PSD-95 in punktförmigen Strukturen in kultivierten hippocampalen Nervenzellen (siehe Abbildung), die eine synaptische Lokalisation implizieren. Semaphorin4F könnte eine wichtige Rolle in der Regulation der Synapsenbildung und synaptischen Plastizität spielen.



Semaphorins are a family of secreted and membrane-associated proteins involved in growth cone guidance during development. We show, that the transmembrane Semaphorin4F is able to interact with the synapse-associated protein SAP90/PSD-95. Semaphorin4F colocalizes with PSD-95 in cultured hippocampal neurons in punctate structures implicating a synaptic localization (see figure). Semaphorin4F might play an important role in the regulation of synaptogenesis and synaptic plasticity.

Volkmar Lessmann

Neurobiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

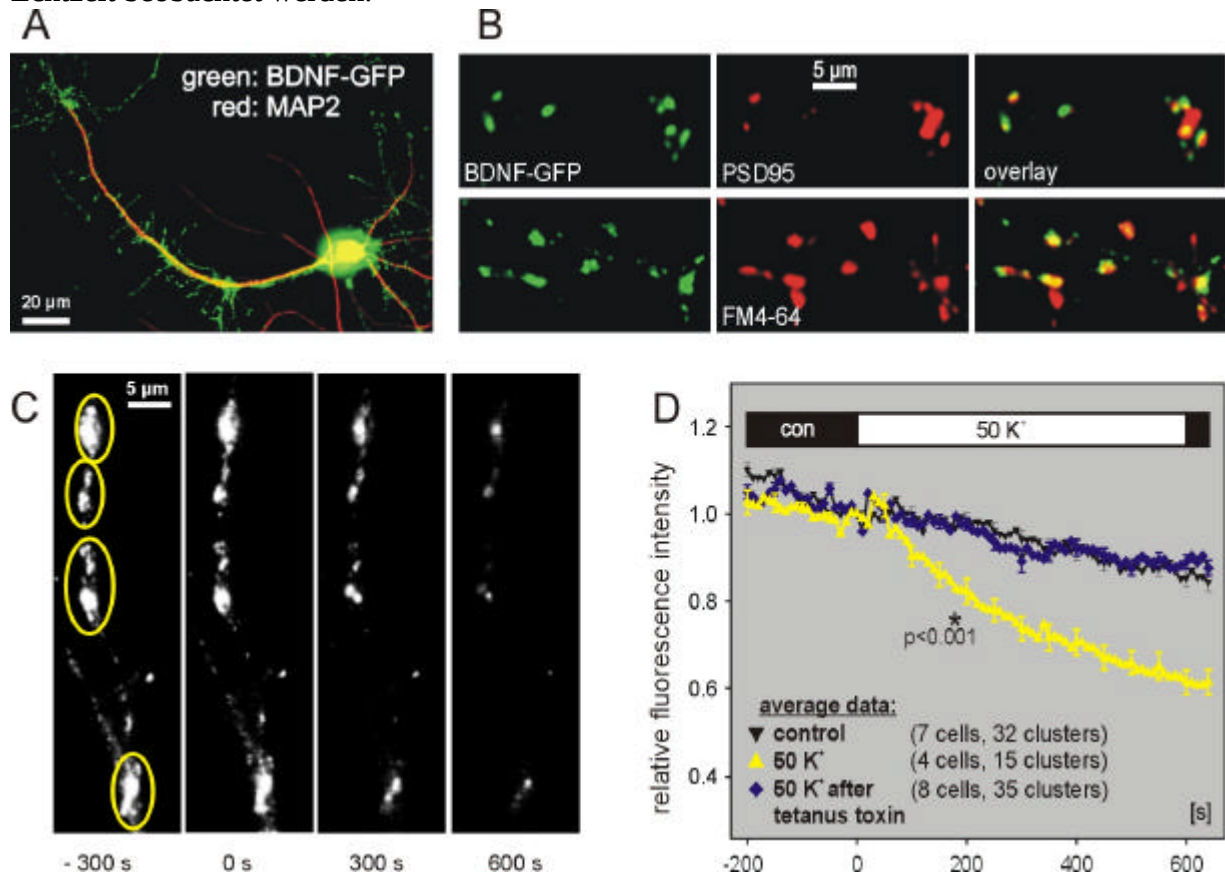
Tel.: ++49-(0)234-3226208; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: Volkmar.Lessmann@ruhr-uni-bochum.de

M. Hartmann, R.Heumann, V. Lessmann. *EMBO Journal* **20** (21): 5887-5897 (2001). Postsynaptic release of Brain-derived neurotrophic factor induced by high frequency synaptic stimulation.

Visualisierung der synaptischen Ausschüttung eines neurotrophen Faktors (BDNF).

A: Kolokalisation von GFP-markiertem BDNF (grün) und dem dendritischen Marker MAP2 (rot) in einem Neuron des Hippocampus. **B:** Ausschnittsvergrößerung eines Neurons wie in A; Kolokalisation von BDNF-GFP Vesikel clustern (grün) mit verschiedenen synaptischen Markern (PSD95; FM 4-64; beide rot). **C:** Synaptisch lokalisierte BDNF-GFP Vesikel cluster (gelb umrandet) wie in B. **D:** Mittlere Veränderung der Fluoreszenzintensität von BDNF-GFP clustern wie in C nach Depolarisation der Neurone mit 50 mM KCl. Mit dieser Technik kann erstmals die synaptische Ausschüttung von Peptiden als zelluläre Fluoreszenzabnahme in Echtzeit beobachtet werden.



Visualization of synaptic secretion of a neurotrophic factor (BDNF).

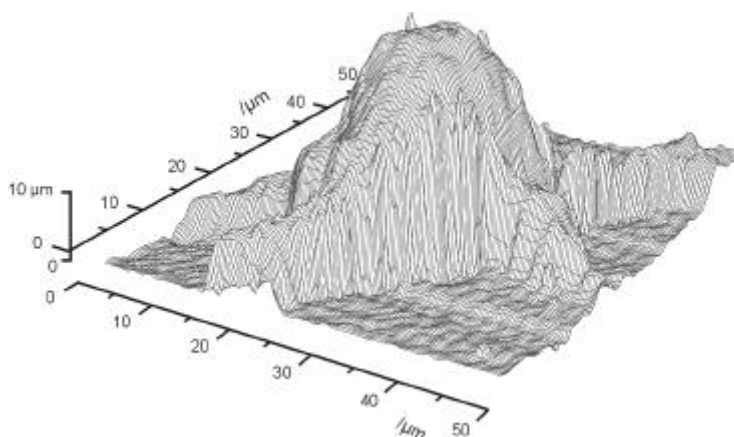
A: Colocalization of GFP-tagged BDNF (green) with the dendritic marker MAP2 (red) in a hippocampal neuron. **B:** Neuron as in A, shown at higher magnification; Colocalization of BDNF-GFP (green) with two different synaptic markers (PSD95; FM 4-64; shown in red). **C:** Synaptically localized BDNF-GFP vesicle clusters as in B, marked in yellow. **D:** Mean change in fluorescence intensity of BDNF-GFP vesicle clusters as marked in C, after depolarization of neurons with 50 mM KCl. This approach enables to monitor in real time synaptic secretion of peptides by means of decrease in cellular fluorescence intensity.

Irmgard D. Dietzel-Meyer

Molekulare Neurobiochemie – Elektrobiochemie neuraler Zellen
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3225803 -21470; FAX: ++49-(0)234-3214105
email: Irmgard.Dietzel-Meyer@ruhr-uni-bochum.de
<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/Irmgard.Dietzel-Meyer>

S. Mann, G. Hoffmann, A. Hengstenberg, W. Schuhmann, I.D. Dietzel, *Biological Chemistry Suppl.* **382** (2001) S132. Scanning ion conductance microscopy – a new technique to investigate properties of living cells.

Komplementär zur elektrochemischen Rastermikroskopie (SECM - siehe Hengstenberg et al., *Angew. Chem.* **113** (2001) 942-946) haben wir eine neuartige Variante eines "Ionenleitfähigkeits-Rastermikroskopes" (SICM) entwickelt. Ein SICM verwendet die Widerstandsänderung, die bei Annäherung einer Glaskapillarelektrode an einen Isolator in einer Elektrolytlösung auftritt, um z.B. eine benachbarte Zellmembran zu "erkennen" und die Position der Elektrodenspitze zu steuern. Die Abbildung zeigt die Konturen einer lebenden Satellitenzelle aus der weißen Substanz des Gehirns eines Hausschweins in Zellkultur. Die Elektrodenspitze wurde in z-Richtung in Schritten von 0.1 μm und horizontal in 0.5 μm Schritten verschoben.



With an approach complementary to scanning electrochemical microscopy (SECM- see Hengstenberg et al., *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **40** (2001) 905-908 we have constructed a novel variant of a "Scanning ion-conductance microscope" (SICM). This type of microscope uses the resistance increase that occurs if a glass capillary microelectrode approaches an insulator in an electrolyte solution to sense a near-by membrane of a living cell and control the position of the scanning tip. The figure shows the contours of a cultured living satellite cell from the white matter of a pig brain traced with our SICM using step sizes in z- direction of 0.1 μm . Lateral steps were 0.5 μm .

Bernhard Hovemann

AG-Molekulare Zellbiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

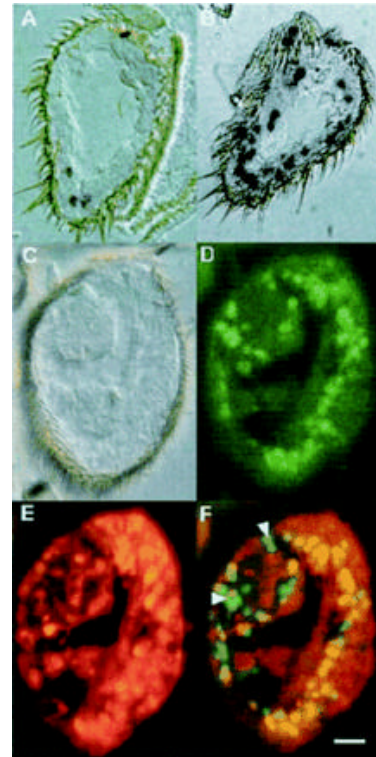
Tel.:++49-(0)234-322-4235; FAX.:++49-(0)234-322-4235

email: Bernhard.Hovemann@ruhr-uni-bochum.de

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

K.F. Störtkuhl and R. Kettler, *PNAS* **98** (2001) 9381-9385. Funktionelle Untersuchungen eines Geruchsrezeptors aus *Drosophila melanogaster*.

Kürzlich wurden 59 unterschiedliche Gene mit Hilfe von Komputeralgorithmen in *Drosophila melanogaster* identifiziert, von denen man annahm, dass sie Geruchsrezeptoren kodieren. Einer dieser Geruchsrezeptoren wurde mittels Enhancer Trap Technik in fast allen Rezeptorneuronen der Antenne exprimiert. Elektrophysiologische Messungen der Antenne dieser transformierten Tiere zeigten eine erhöhte Reizantwort gegenüber Benzaldehyd, Cyclohexanon, Cyclohexanol und Benzylalkohl. Es war somit gelungen, für einen Geruchsrezeptor die olfaktorische Funktion *in vivo* nachzuweisen.



K.F. Störtkuhl and R. Kettler, *PNAS* **98** (2001) 9381-9385 Functional analysis of an olfactory receptor in *Drosophila melanogaster*.

59 candidate olfactory receptor genes have recently been identified in *Drosophila melanogaster*, one of which is Or43a. In wild type flies the olfactory receptor Or43a is expressed at the distal edge of the third antennal segment in about 15 olfactory receptor neurons (ORNs). To identify ligands for the receptor we used the Gal4/UAS system to misexpress Or43a in the third antennal segment. Or43a mRNA expression in the antenna of transformed and wild type flies was visualised by *in situ* hybridisation with a digoxigenin - labelled probe. Electroantennogram (EAG) recordings from transformed and wild type flies were used to identify cyclohexanol, cyclohexanone, benzaldehyde and benzyl alcohol as ligands for the olfactory receptor Or43a. This *in vivo* analysis reveals for the first time functional properties of one member of the recently isolated olfactory receptor family in *Drosophila* and will provide further insight into our understanding of olfactory coding.

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1

- A.L.C. Lagoa, H.P. Diogo, M. P. Dias, M.E.M. da Piedade, L.M.P.F. Amaral, M.A.V.R. da Silva, J.A.M. Simoes, R.C. Guedes, B.J.C. Cabral, K.Schwarz, M. Epple, *Chemistry — A European Journal* **7** (2001) 483-489. Energetics of C-Cl, C-Br, and C-I bonds in haloacetic acids. Enthalpies of formation of XCH_2COOH ($X = Cl, Br, I$) compounds and of the carboxymethyl radical.
- F. Peters, M. Epple, *Zeitschrift für Kardiologie* 90:Suppl. **3** (2001) III/81-III/85. Simulating arterial wall calcification in vitro: biomimetic crystallization of calcium phosphates under controlled conditions.
- M. Epple, P. Lanzer, *Zeitschrift für Kardiologie* 90:Suppl. **3** (2001) III/2-III/5. How much interdisciplinarity is required to understand vascular calcification? Formulation of four basic mechanisms of vascular calcification.
- M. Epple, *Zeitschrift für Kardiologie* 90: Suppl. **3** (2001) III/64-III/67. Solid-state chemical methods to investigate the nature of calcified deposits.
- O. Herzberg, H. Ehrenberg, S. J. Kitchin, K. D.M. Harris, M. Epple, *Journal of Solid State Chemistry* **156** (2001) 61-67. Structural aspects of the solid-state polycondensation reaction in alkali 4-halogenomethylbenzoates.
- W. Linhart, F. Peters, W. Lehmann, K. Schwarz, A. Schilling, M. Amling, J.M. Rueger, M. Epple, *Journal of Biomedical Materials Research* **54** (2001) 162-171. Biologically and chemically optimized composites of carbonated apatite and polyglycolide as bone substitution materials.
- C. Schiller, M. Siedler, F. Peters, M. Epple, *Ceramic Transactions* **114** (2001) 97-108. Functionally graded materials of biodegradable polyesters and bone-like calcium phosphates for bone replacement.
- O. Herzberg, M. Epple, *European Journal of Inorganic Chemistry* (2001) 1395-1406. Formation of polyesters by thermally induced polymerization reactions of molecular solids.
- S. Weihe, M. Wehmöller, A. Tschakaloff, R. von Oepen, C. Schiller, M. Epple, H. Eufinger, *Mund-Kiefer- und Gesichtschirurgie* **5** (2001) 299-304. Alternative Knochenersatzmaterialien zur präoperativen Fertigung individueller CAD/CAM-Schädelimplantate.
- S. Weihe, M. Wehmöller, C. Schiller, C. Rasche, H. Eufinger, M. Epple, *Biomedizinische Technik* **46 Suppl. 1** (2001) 214-215. Formgebung degradierbarer Werkstoffe mit Hilfe der Verfahrenskette zur Fertigung individueller CAD/CAM-Implantate.
- S. Weihe, M. Wehmöller, C. Schiller, C. Rasche, H. Eufinger, M. Epple, *Biomedizinische Technik* **46 Suppl. 1** (2001) 204-205. Ein optimierter biodegradierbarer Werkstoff für die Behandlung großflächiger Schädeldefekte.
- J. S. Choi, M. Köller, D. Müller, G. Muhr, M. Epple, *Biomedizinische Technik* **46 Suppl. 1** (2001) 226-227. Verbesserung der Biokompatibilität von Ni-Ti-Formgedächtnislegierungen ("Nitinol") durch Beschichtung mit Calciumphosphaten aus Lösung.
- D. Tadic, M. Epple, *Biomedizinische Technik* **46 Suppl. 1** (2001) 224-225. Kontinuierliche Herstellung von Knochenmineral-ähnlichen Calciumphosphat-Keramiken.
- M. Epple, *Biomedizinische Technik* **46 Suppl. 1** (2001) 36-38. Biomaterialien: Von Fremdkörpern im Gewebe hin zu funktionellen Implantaten.

- M. Siedler, S. J. Kitchin, K. D.M. Harris, A. L. C. Lagoa, H. P. Diogo, M. E. M. da Piedade, M. Epple, *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions* (2001) 3140-3148. Porous Poly(d,l-lactide) and poly(d,l-lactide-co-glycolide) by thermal salt elimination from halogenocarboxylates.
- F. Peters, M. Epple, *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions* (2001) 3585-3592. Crystallization of calcium phosphates under constant conditions with a double-diffusion setup.

Anorganische Chemie 2

- R. Schmechel, H. Winkler, X. Li, M. Kennedy, M. Kolbe, A. Benker, M. Winterer, R. A. Fischer, H. Hahn, H. von Seggern, *J. Appl. Phys.*, **89** (2001) 1679-1686. Optical properties of nanocrystalline $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ in different host materials.
- R. Schmechel, H. Winkler, X. M. Li, M. Kennedy, M. Kolbe, A. Benker, M. Winterer, R. A. Fischer, H. Hahn, H. von Seggern, *Scripta Materialia*, **44** (2001) 1213-1217. Photoluminescence properties of nanocrystalline $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ in different environments.
- N. Oberbeckmann, K. Merz, R. A. Fischer, *Organometallics*, **20** (2001) 3265-3273. Coordination of Donor-Functionalized Cyclopentadienyl Ligands at Platinum(II) Centers: Syntheses and Molecular Structure of $\mu(1,2-\eta^2:5,6\text{-cod})\text{bis}\{[\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NMe}_2)]\text{MePt}\}$.
- H. Parala, A. Devi, A. Wohlfart, M. Winter, R. A. Fischer, *Adv. Functional Mater.*, **11** (2001) 224-228. An efficient chemical solution deposition method for epitaxial gallium nitride layers using single molecule precursor.
- H. Parala, A. Devi, W. Rogge, A. Birkner, R. A. Fischer, *J. Phys. IV France*, **11** (2001) 473-479. Synthesis of GaN particles in porous matrices by Chemical Vapour Infiltration of single molecule precursors.
- R. A. Fischer, U. Weckenmann, S. Mittler, *J. Phys. IV France*, **11** (2001) 1183-1190 (Selective CVD, VII). Area Selective OMCVD of Gold and Palladium on Self-Assembled Organic Monolayers: Control of Nucleation Sites.
- R. Becker, J. Weiß, A. Devi, R. A. Fischer, *J. Phys. IV France*, **11** (2001) 569-575. Chemical Vapour Deposition of Copper using intramolecularly adduct stabilised monomeric Copper(II) Alkoxides.
- Wohlfart, A. Devi, F. Hippler, H.W. Becker, R. A. Fischer, *J. Phys. IV France*, **11** (2001) 683-687. Growth of porous columnar α -GaN layers on c-plane Al_2O_3 by MOCVD using Bisazido dimethylaminopropyl gallium as single source precursor.
- Devi, H. Parala, W. Rogge, A. Wohlfart, A. Birkner, R. A. Fischer, *J. Phys. IV France*, **11** (2001) 577-584. Growth of InN whiskers from single source precursor.
- R. Becker, J. Weiß, M. Winter, R. A. Fischer, *J. Organomet. Chem.*, **630** (2001) 253-262. New Heterometallic Copper Zinc Alkoxides: Synthesis, Structural Properties and Pyrolysis to Cu/ZnO Composite Materials.
- J. Hambrock, A. Birkner R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.*, **11** (2001) 3197-3201. Synthesis of CdSe nanoparticles using various organometallic cadmium precursors.

- H. Parala, A. Devi, F. Hipler, E. Maile, A. Wohlfart, A. Birkner, H.-W. Becker, R. A. Fischer, *J. Cryst. Growth*, **231** (2001) 68-74. Investigations on InN whiskers grown by Chemical Vapour Deposition.
- H. Parala, A. Devi, F. Hipler, A. Birkner, R. A. Fischer, *Electrochemical Society Proceedings* **13** (2001) 356-364. InN Whisker Growth by Chemical Vapor Deposition.
- H. Parala, A. Devi, A. Birkner, R.A. Fischer, *Electrochemical Society Proceedings* **13** (2001), 429-436. Nano-sized GaN Particles by Chemical Vapour Infiltration.
- J. Müller, B. Wittig, S. Bendix, *J. Phys. Chem. A* **105** (2001) 2112–2116. Synthesis of Monomeric Me₂GaD via a *b*-Hydrogen Elimination at High Temperatures. A Matrix-Isolation Study.
- J. Müller, B. Wittig, H. Sternkicker, S. Bendix, *J. Phys. IV* **11 (Pr3)** (2001) 17–22. Insights into the MOCVD Process of GaN using Single-Source Precursors. Matrix Isolation: A Powerful Technique.
- J. Müller, B. Wittig, *Electrochemical Society Proceedings* **13** (2001) 124–128. Fragmentation of the Intramolecularly Coordinated Alane Me₂NCH₂CD₂CH₂AlBr₂. A Matrix-Isolation Study.
- J. Müller, S. Bendix, *Chem. Commun.* **2001**, 911–912. Insights into the Chemical Vapor Deposition of GaN using the Single-Source Precursor Me₂N(CH₂)₃Ga(N₃)₂. Matrix Isolation of Ga(N₃).

Organische Chemie 2

- G. Bucher, M. Halupka, C. Kolano, O. Schade, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 545 – 552. Characterization of Alkoxy carbonyl Radicals by Step-Scan Time-Resolved Infrared Spectroscopy
- C. Röser, R. Albers, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 269 – 273. Rearrangements of 2-Furfurylidene – Synthesis of Acylsilanes and –stannanes.
- G. Bucher, H. Wandel, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **14** (2001) 197 – 200. 1,4-Naphthoquinonediazide-2-carboxylic acid: a Diazo Compound with a Long-Lived Triplet Excited State.
- W. Sander, K. Block, W. Kappert, A. Kirschfeld, S. Muthusamy, K. Schroeder, C. P. Sosa, E. Kraka, D. Cremer, *J. Am. Chem. Soc.* **121** (2001) 2618 – 2627. Dimesitylketone O-oxide: Spectroscopic Characterization, Conformation, and Reaction Modes – OH Formation and OH Capture.
- H. H. Wenk, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **6** (2001) 1837 – 1844. Matrix Isolation and Spectroscopic Characterization of the Perfluorinated ortho- and meta-Benzyne.
- H. H. Wenk, A. Balster, W. Sander, D. A. Hrovat, and W. T. Borden, *Angew. Chem.* **113** (2001) 2356 – 2359. Matrix Isolation of the Perfluorinated p-Benzyne.
- H. H. Wenk, R. Hübert, W. Sander, *J. Org. Chem.* **66** (2001) 7994 – 7999. Reaction of 4-Oxo-2,3,5,6-tetrafluorocyclohexa-2,5-dienylidene with Acetylene – a Carbene to Carbene Reaction.
- W. Sander, A. Strehl, M. Winkler, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 3771 – 3778. Photochemistry of Bissulfonyldiazomethanes

- M. Winkler, W. Sander, *J. Phys. Chem.* **105** (2001) 10422 – 10432. The Structure of meta-Benzyne Revisited – A Close Look into σ -Bond Formation.
- G. Bucher, M. Halupka, C. Kolano, O. Schade, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 545 – 552. Characterization of Alkoxy carbonyl Radicals by Step-Scan Time-Resolved Infrared Spectroscopy
- C. Röser, R. Albers, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 269 – 273. Rearrangements of 2-Furfurylidene – Synthesis of Acylsilanes and –stannanes
- G. Bucher, H. Wandel, W. Sander, *J. Phys. Org. Chem.* **14** (2001) 197 – 200. 1,4-Naphthoquinonediazide-2-carboxylic acid: a Diazo Compound with a Long-Lived Triplet Excited State
- W. Sander, K. Block, W. Kappert, A. Kirschfeld, S. Muthusamy, K. Schroeder, C. P. Sosa, E. Kraka, D. Cremer, *J. Am. Chem. Soc.* **121** (2001) 2618 – 2627. Dimesitylketone O-oxide: Spectroscopic Characterization, Conformation, and Reaction Modes – OH Formation and OH Capture.
- H. H. Wenk, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **6** (2001) 1837 – 1844. Matrix Isolation and Spectroscopic Characterization of the Perfluorinated ortho- and meta-Benzyne.
- H. H. Wenk, A. Balster, W. Sander, D. A. Hrovat, and W. T. Borden, *Angew. Chem.* **113** (2001) 2356 – 2359. Matrix Isolation of the Perfluorinated p-Benzyne.
- H. H. Wenk, R. Hübner, W. Sander, *J. Org. Chem.* **66** (2001) 7994 – 7999. Reaction of 4-Oxo-2,3,5,6-tetrafluorocyclohexa-2,5-dienylidene with Acetylene – a Carbene to Carbene Reaction.
- W. Sander, A. Strehl, M. Winkler, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 3771 – 3778. Photochemistry of Bissulfonyldiazomethanes.
- M. Winkler, W. Sander, *J. Phys. Chem.* **105** (2001) 10422 – 10432. The Structure of meta-Benzyne Revisited – A Close Look into σ -Bond Formation.
- G. Bucher, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 2447-2462. Photochemical Generation of Iminoquinone Methides by 1,4-Hydrogen Migration in Derivatives of o-Tolyl nitrene.
- G. Bucher, *Eur. J. Org. Chem.* (2001) 2463-2475. Laser Flash Photolysis Study on *N,N*-Diethyl-2-azidobenzylamine: The Reactivity of Iminoquinonemethides in Solution.
- Kudin, K. N.; Bettinger, H. F.; Scuseria, G. E.; Fluorinated (10,10) and (18,0) Single-Wall Carbon Nanotubes *Phys. Rev. B.* **2001**, 63, 045413.
- Timoshkin, A. Y.; Bettinger, H. F.; Schaefer, H. F.; A Theoretical Approach to the Single Source Precursor Concept: Quantum Chemical Modeling of Gas Phase Reactions, *J. Cryst. Growth* **2001**, 222, 170-182.
- Stahl, F.; Schleyer, P. v. R.; Bettinger, H. F.; Kaiser, R. I.; Lee, Y. T.; Schaefer, H. F.; The reaction of the Ethynyl Radical, C_2H , with Methylacetylene, CH_3CCH , under single collision conditions: Implications for Astrochemistry, *J. Chem. Phys.* **2001**, 114, 3476.
- Timoshkin, A. Y.; Bettinger, H. F.; Schaefer, H. F.; DFT Modeling of Chemical Vapor Deposition of GaN from Organogallium Precursors. I. Thermodynamics of the Elimination Reactions, *J. Phys. Chem.*, **2001**, 105, 3240-3248.
- Timoshkin, A. Y.; Bettinger, H. F.; Schaefer, H. F.; DFT Modeling of Chemical Vapor Deposition of GaN from Organogallium Precursors. II. Structures of the Oligomers and Thermodynamics of the Association Processes, *J. Phys. Chem.*, **2001**, 105, 3249-3258.

- Sander, W.; Bettinger, H. F.; Reactions of 2,5-Cyclohexadienylidenes Investigated by Direct Spectroscopic Methods. In: *Advances in Carbene Chemistry*, Vol. 3, Brinker, U. H. (Ed.), Elsevier, Amsterdam, **2001**, pp. 159-203.
- Nossal, J.; Saini, R. K.; Sadana, A. K.; Bettinger, H. F.; Alemany, L. B.; Scuseria, G. E.; Billups, W. E.; Saunders, M.; Kong, A.; Weisemann, R.; Formation, Isolation, Spectroscopic Properties, and Calculated Properties of Some Isomers of C₆₀H₃₆, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 8482-8495.
- Bettinger, H. F.; Kudin, K. N.; Scuseria, G. E.; The Thermochemistry of Fluorinated Single Wall Carbon Nanotubes, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 12849-12856.
- G. Dyker, H. Markwitz and G. Henkel, *Eur. J. Org. Chem.* **2001**, 2415-2423. A Putatively Unfeasible Heck Reaction
- G. Dyker, M. Hagel, G. Henkel, M. Köckerling, C. Näther, S. Petersen, G. P. Schiemenz, *Zeitschrift für Naturforsch. B* **2001**, *56b*, 1109-1116. On the Impact of peri-Stress and Trityl-Stress upon the Length of N⁺-C Bonds in 1-Azonia-acenaphthene Cations

Physikalische Chemie 1

- Th. Becker, St. Hövel, M. Kunat, Ch. Boas, U. Burghaus, Ch. Wöll, *Surf. Sci.* **486**, L502 (2001). Interaction of hydrogen with metal oxides: The case of the polar ZnO(0001)-surface
- Ch. Boas, Th. Becker, M. Kunat, U. Burghaus, Ch. Wöll, *Phys. Rev. B* **64** (3), 37401 (2001). Comment on „Effect of the structural anisotropy and lateral strain on the surface phonons of monolayer xenon on Cu(110)“
- Ch. Wöll, *J. Synchrotron Radiation* **8**, 129-135, (2001). Small hydrocarbons on metal surfaces : adsorption- induced changes in electronic and geometric structure as seen by X-ray absorption spectroscopy
- H.-T. Rong, St. Frey, Y.-J. Yang, M. Zharnikov, M. Buck, M. Wühn, Ch. Wöll, G. Helmchen *Langmuir* **17**, 1582-1593 (2001). On the Importance of the Head Group Substrate Bond in Thiol Monolayers: A Study of Biphenyl Based Thiols on Gold and Silver.
- M. Kunat, Ch. Boas, Th. Becker, U. Burghaus, Ch. Wöll, *Surf. Sci.* **474**, 114-128 (2001). Adsorption dynamics of CO on Cu(110): a molecular beam study.
- M. Wühn, J. Weckesser, Ch. Wöll, *Langmuir* **17**, 7605-7612 (2001). Bonding and orientational ordering of long-chain carboxylic acids on Cu(111): Investigations using x-ray absorption spectroscopy.
- G. Beernink, M. Gunia, Ch. Wöll, F. Dötz, K. Müllen, H. Öström, K. Weiss, *Chem. Phys. Chem.* **5**, 317-320 (2001). Synthesis of polycyclic aromatic hydrocarbons and graphite-islands via surface-induced reaction of small molecules
- S. Lukas, S. Vollmer, G. Witte, Ch. Wöll, *J. Chem. Phys.* **114** (22), 10123-10130 (2001). Adsorption of acenes on flat and vicinal Cu(111) surfaces: step induced formation of lateral order
- R. Arnold, A. Terfort, Ch. Wöll, *Langmuir* **17**, 4980-4989 (2001). The Determination of Molecular Orientation in Self-Assembled Monolayers Using IR Absorption Intensities – The Importance of Grinding Effects

- C. Fuxen, W. Azzam, R. Arnold, G. Witte, A. Terfort, Ch. Wöll, *Langmuir* **17**, 3689-3695 (2001). Structural Characterization of Organothioliolate Adlayers on Gold: the Case of Rigid, Aromatic backbones
- S. Vollmer, G. Witte, Ch. Wöll, *Langmuir* **17**, 7560 (2001). Structural analysis of saturated alkanethiolate monolayers on Cu(100): coexistence of thiolate and sulfide species
- S. Vollmer, G. Witte, Ch. Wöll, *Catalysis Letters* **77**, 97-102 (2001). Determination of site specific adsorption energies of CO on copper
- V. Strehmel, A. Ziegler, M. Rutloh, C. Jung, J. Stumpe, R. Ruhmann, S. Kostromin, M. Wühn, A. Niklewski, S. Reiss, Ch. Wöll *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, **368**, 4229-4236 (2001). Bulk and surface investigation of photooriented polymer films.
- U. Burghaus, *Surface Review and Letters* **8** (2001) 353. Monte Carlo Simulation of the adsorbate-assisted adsorption in the case of CO/ZnO.
- L. Vattuone, U. Burghaus, L. Savio, D. Zampa, M. Rocca, F. Buatier de Mongeot, G. Costantini, C. Boragno, and U. Valbusa, *J.Chem.Phys.* **115** (2001) 3346. Oxygen interaction with disordered and nanostructured Ag(001) surfaces.
- S. Bartholmei, P. Fouquet and G. Witte, *Surf. Sci.* **473**, 227 (2001). Growth and dynamics of ultrathin Barium films on Cu(100).
- S. Lukas, S. Vollmer, G. Witte and Ch. Wöll, *J. Chem. Phys.* **114**, 10123 (2001). Chemisorption of Acenes on flat and vicinal Cu(111) surfaces: step induced alignment.
- C. Fuxen, W. Azzam, R. Arnold, G. Witte, A. Terfort, Ch. Wöll, *Langmuir* **17**, 3689 (2001). Structural characterization of organothioliolate adlayers on gold: the case of rigid, aromatic backbones.
- G. Witte, *J. Chem. Phys.* **115**, 2757 (2001). Low Energy Dynamics of NO and CO chemisorbed on Rh(111).
- P. Fouquet and G. Witte, *Appl. Surf. Sci.* **180**, 286 (2001). Metallization and demetallization of clean and oxygen covered ultrathin alkali metal films on GaAs(100).
- M. Kind, F. Stuhl, Y.-R. Tzeng, M. H. Alexander und P. J. Dagdigian, *J. Chem. Phys.* **114**, 4479 (2001). Fine-structure state resolved rotationally inelastic collisions of CH($A^2\Delta$, $v=0$) with Ar: A combined experimental and theoretical study,
- M. Kind und F. Stuhl, *J. Chem. Phys.* **114**, 6160 (2001). State-to-state rate constants for the rotational relaxation of CH($B^2\Sigma^-$, $v=0, J$) in inelastic collisions with Ar,

Physikalische Chemie 2

- I. Scheele, R. Lehnig, M. Havenith, Observation of a high lying van der Waals mode in the intermolecular potential of Ar-CO. *Mol. Phys.* **99**, 205 (2001)
- I. Scheele, R. Lehnig, M. Havenith, IR spectroscopy of van der Waals modes in the intermolecular potential of Ar-CO: The $K_a = 0$ combination of stretch and bending. *Mol. Phys.* **99**, 197 (2001)
- G. Gimmler, M. Havenith, Free-jet infrared diode laser spectroscopy of the v_2 -band of the Ar-N₂O van der Waals complex. *J. Mol. Struct.* **599**, 117 (2001)

- N. Pörtner, A. Vilesov, M. Havenith, The formation of heterogeneous van der Waals complexes in helium droplets. *Chem. Phys. Lett.* **343**, 281 (2001)
- M. Havenith, Infrared Spectroscopy of molecular clusters, Springer Tracts of Modern Physics, 176, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2001
- H. Weingärtner, W. Schröer, *Adv. Chem. Phys.*, 2001, **116**, 1 - 66. Criticality of Ionic Fluids.
- H. Nadolny, H. Weingärtner, *J. Chem. Phys.*, 2001, **114**, 5273 - 5276. Ion Pair Correlations Near Critical Points of Ionic Fluids. - An Experimental Investigation of the Static Dielectric Constant.
- D. Jacob, M.A. Anisimov, J.V. Sengers, A. Oleinikova, H. Weingärtner, A. Kumar, *Phys.Chem.-Chem.Phys.*, 2001, **3**, 829-831. Novel Phase Transition Behavior near Liquid-Liquid Critical Points of Aqueous Solutions: Formation of a Third Phase at the Interface.
- Knocks, H. Weingärtner, *J. Phys. Chem. B*, 2001, **105**, 3635-3638. The Dielectric Spectrum of Ubiquitin in Aqueous Solution.
- H. Weingärtner, A. Knocks, S. Boresch, P. Höchtl, O. Steinhauser, *J. Chem. Phys.*, 2001, **115**, 1463 - 1472. Complex Dielectric Spectra of Aqueous Solutions of Saccharides. - Experiment Meets Simulation.
- H. Weingärtner, A. Knocks, W. Schrader, U. Kaatze, *J. Phys. Chem. A*, 2001, **105**, 8646. Dielectric Spectroscopy of the Room Temperature Molten Salt Ethylammonium Nitrate.
- H. Weingärtner, *Pure Appl. Chem.*, 2001, **11**, 1733-1748. Corresponding States for Electrolyte Solutions.
- H. Weingärtner, ", in: *McGraw-Hill Encyclopedia of Science and Technology* 2002, 359-360, (publ. 2001) Supercritical Fluid Technology.
- H. Schmalfuss, W. Weissflog, A. Würflinger, S. Masberg, and G.M. Schneider: Thermodynamic measurements on selected liquid crystals at normal and elevated pressures; *Z. Naturforsch.* 56a (2001) 262-266.
- S. Urban and A. Würflinger: DTA and Dielectric Studies under Pressure of a Smectogen Substance with a Strong Perpendicular Dipole Moment; *Z. Naturforsch.* 56a (2001) 489-492.
- Würflinger and S. Urban: Thermodynamic measurements on three 5-n-alkyl-2-(4'-isothiocyanatophenyl)-1,3-dioxanes (6DBT, 8DBT, 10DBT) at elevated pressures, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, (PCCP), 3, (2001), 3727-3731.
- S. Urban, A. Würflinger, and A. Kocot: Phase diagram and dielectric relaxation studies of n-octyl-isothiocyanato-biphenyl (8BT) in the smectic E phase under high pressure; *Liq. Cryst.* 28, (2001) 1331-1336.
- W. Weissflog, I. Wirth, S. Diele, G. Pelzl, H. Schmalfuss, T. Schoss, and A. Würflinger: The Homologous Series of N,N'-Bis[4-(4-n-alkyloxybenzoyloxy)benzylidene]phenylene-1,3-diamines: Mesophase Behaviour and Physical Properties; *Liq. Cryst.*, 28, (2001) 1603-1609.
- Würflinger, D. Mondieig, F. Rajabalee, and M. A. Cuevas-Diarte: PVT measurements and related studies on the binary system $nC_{16}H_{34}$ - $nC_{17}H_{36}$ and on $nC_{18}H_{38}$ at high pressures. *Z. Naturforsch.* 56a, (2001) 626-634.

- Würflinger, M. Massalska-Arodz, S. Urban, W. Weissflog, and S. Ernst: Thermodynamic Measurements on the Binary System bis {[2,2-di(n-hexyloxycarbonyl)ethenyl] phenyl} biphenyl-4,4'-dicarboxylate and 4-n-octyloxyphenyl 4-n-pentyloxy-benzoate at Elevated Pressures; *Z. Naturforsch.* 56a, (2001) 658-662.
- M. Massalska-Arodz, H. Schmalfuss, W. Witko, H. Kresse, and A. Würflinger: Dielectric relaxation studies of 4-n-butyl-4'-thioxyanobiphenyl (4TCB); *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 366, (2001) 221-227.
- G. M. Schneider, in: K. Yanagisawa, Q. Feng (Eds.), Proceedings of the Joint 6th International Symposium on Hydrothermal Reactions and 4th International Conference on Solvo-Thermal Reactions, Kochi, Japan, 25–28 July 2000, Nishimura Tosha-Do Ltd, Kochi, Japan, 2001, p. 18–23. Aqueous solutions at pressures up to 2 GPa: Gas-gas equilibria, closed loops, high-pressure immiscibility, salt effects, and related phenomena.
- G. M. Schneider, D. Tuma, M. Winter, B. Wagner, Z. Kristallogr. NCS **216** (2001) 299–300. Crystal structure of 1,4-bis(ethylamino)anthracene-9,10-dione, C₁₈H₁₈N₂O₂
- D. Tuma, B. Wagner, G. M. Schneider, Fluid Phase Equilibria **182** (2001) 133–143. Comparative solubility investigations of anthraquinone disperse dyes in near- and supercritical fluids
- M. Roth, K. Maag, G. M. Schneider, D. Tuma, J. Phys. Chem. B **105** (2001) 10373–10378. Solution properties of C₆₀ and C₇₀ fullerenes and C₂₁ to C₄₀ *n*-alkanes at infinite dilution in carbon dioxide from supercritical fluid chromatography.

Analytische Chemie

- M. Heller, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **627** (2001) 569 - 571. Polymeric Linear CuCN Chains in a 2,3-Dihydroxyquinoxaline Host Lattice.
- J. Zahra, L. Henning, M. Findeisen, P. Welzel, D. Müller, W. S. Sheldrick, *Tetrahedron Lett.* **42** (2001) 2969 - 2972. Building Blocks for Phosphonate Analogues of Moenomycin A.
- D. J. Brauer, K. W. Kottsieper, T. Nickel, O. Stelzer, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2001) 1251-1259. Novel Electron Rich Hydrophilic Phosphanes with Carboxylated Cyclohexyl Substituents.
- Y. V. Mironov, A.V. Virovets, W. S. Sheldrick, V. E. Federov, *Polyhedron* **20** (2001) 969 - 974. Novel inorganic polymeric compounds based on the Re₄ chalcocyanide cluster complexes: synthesis and crystal structures of Mn₂[Re₄Se₄(CN)₁₂]·6H₂O, Cd₂[Re₄Te₄(CN)₁₂]·6H₂O, Cu₂[Re₄Te₄(CN)₁₂]·4H₂O and K₄Re₄Se₄(CN)₁₂·5H₂O.
- M. Hahn, M. Kleine, W. S. Sheldrick, *J. Biol. Inorg. Chem.* **6** (2001) 556 - 566. Interaction of cisplatin with methionine- and histidine-containing peptides - competition between backbone binding, macrochelation and peptide cleavage.
- J. Frelek, J. Jagodzinski, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, E. Wieteska, W. J. Szczepek, *Chirality* **13** (2001) 313 - 321. Chiroptical properties of binuclear rhodium complexes of lanostane alcohols.

- T. Röttgers, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **627** (2001) 1976 - 1982. Lamellar Copper(I) Thiocyanate-Based Coordination Polymers containing the Alkali Cation ligating Thiocrown Ether 1,10-Dithia-18-crown-6.
- A. Loose, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **627** (2001) 2051 - 2052. Synthesis and Structure of the Bicyclic $\text{Sn}_4\text{Se}_{11}^{6-}$ Anion in $\text{Na}_6\text{Sn}_4\text{Se}_{11} \cdot 22\text{H}_2\text{O}$.
- W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **86** (2001) 97. Interaction of Pt-antitumor drugs with methionine- and histidine-containing peptides: migration, macrochelation or backbone cleavage.
- F. Becker, W. Wirth, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **86** (2001) 141. Specific enhancement of guanosine 2'-monophosphate N3-coordination for (amine)Pt(II) complexes by $\kappa^2\text{N3,O}(\text{phosphate})$ macrochelation.
- M. Kleine, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **86** (2001) 296. Reaction of carboplatin with methionine- and histidine-containing peptides.
- J. Zahra, L. Henning, M. Findeisen, S. Giesa, P. Welzel, D. Müller, W. S. Sheldrick, *Tetrahedron* **57** (2001) 9437-9452. Synthesis of a Building Block for Phosphonate Analogues of Moenomycin A_{12} from D-Tartaric Acid.
- I. M. Müller, R. Robson, F. Separovic *Angew. Chem.* **113** (2001) 4519 Eine metallhaltige, supramolekulare Kapsel mit der Topologie eines Tetraeders, 3^3 , aufgebaut aus vier Guanidinliganden und zwölf Cadmiumzentren *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **40** (2001) 4385 A Metallosupramolecular Capsule with the Topology of the Tetrahedron, 3^3 , Assembled from Four Guanidine-based Ligands and Twelve Cadmium Centres
- Zimmer, D. Kuppert, T. Weyermüller, I. Müller, K. Hegetschweiler *Chemistry, A European Journal* **7** (2001) 917 Part 3 : Linear Primary Polyamines as Building Blocks for Coordination Polymers. Complex Formation of Ni^{II} , Cu^{II} , Pd^{II} and Co^{II} with 1,2,3,4-Butanetetramine
- D. Kuppert, J. Sander, C. Roth, M. Wörle, T. Weyhermüller, G. Reiss, U. Schilde, I. Müller, K. Hegetschweiler *Eur. J. Inorg. Chem.* **2001**, 2525 The Coordination Chemistry of *cis*-3,4-Diaminopyrrolidine and Related Polyamines
- J. Sander, K. Hegetschweiler, B. Morgenstern, A. Keller, W. Amrein, T. Weyhermüller, I. Müller *Angew. Chem.* **113** (2001) 4307 T-Symmetrische Ikosaeder: eine neue Form von Chiralität bei Metallkomplexen *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **40** (2001) 4179 T-symmetrical Icosahedra: A new Type of Chirality in Metal Complexes
- C. A. Briehn, M.-S. Schiedel, E. M. Bosen, W. Schuhmann, P. Bäuerle, *Angew. Chem.* **113** (2001) 4817-4820. Einzelsubstanz-Bibliotheken Organischer Materialien: Von der kombinatorischen Synthese konjugierter Oligomere zu Struktur-Eigenschaftsbeziehungen. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **40** (2001) 4680-4683. Single-Compound Libraries of Organic Materials: From the Combinatorial Synthesis of Conjugated Oligomers to Structure-Property Relationships.
- S. Reiter, K. Eckhard, A. Blöchl, W. Schuhmann, *The Analyst* **126** (2001) 1912-1918. Redox modification of proteins using sequential-parallel electrochemistry in microtiter plates
- M. Mosbach, T. Laurell, J. Nilsson, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **16** (2001) 611-620. A Miniaturised Direct Electrochemical Affinity Assay Based on a Wall-Free Sample Droplet and Nano-Dispensing of the Redox-Labelled Binding Partner

- M. Mosbach, H. Zimmermann, T. Laurell, J. Nilsson, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **16** (2001) 827-837. Picodroplet-Deposition of Enzymes on Functionalized Self-Assembled Monolayers as a Basis for Miniaturized Multi-Sensor Structures.
- E. Csöregi, S. Gaspar, M. Niculescu, B. Mattiasson, W. Schuhmann, "Amperometric biosensors for application in food and beverage industry" in (M. de Cuyper, J. Bulte, eds.) *Physics and Chemistry for Biotechnology, Vol VII of Focus on Biotechnology*, (M. Hofman, J. Ann, eds.), Kluwer, BV Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands (2001) pp. 105-129.
- P. Heiduschka, I. Romann, H. Ecken, M.J. Schöning, S. Thanos, W. Schuhmann *Electrochim. Acta.* **47** (2001) 299-307. Defined adhesion and growth of neurons on artificially structured substrates
- N. Diab, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **47** (2001) 265-273. Electropolymerized Manganese Porphyrin/Polypyrrole Films as Catalytic Surfaces for the Oxidation of Nitric Oxide"
- Turyan, C. Zeltser, I. Lewinstein, W. Schuhmann, D. Mandler, in "Chemical and biological sensors and analytical methods II" (M. Butler, P. Vanysek, N. Yamazoe, eds.), *Proc. Vol. 2001-18*, The Electrochemical Society, Pennington, N.Y., 2001, pp. 284-292. Comparing different approaches for assembling selective electrodes for mercury ions.
- C. Kurzawa, M. Mosbach, E. Bensen, W. Schuhmann, in "Chemical and biological sensors and analytical methods II" (M. Butler, P. Vanysek, N. Yamazoe, eds.), *Proc. Vol. 2001-18*, The Electrochemical Society, Pennington, N.Y., 2001, pp.304-314. Visualization of micro-structured enzyme patterns using scanning electrochemical microscopy (SECM)
- S. Reiter, K. Habermüller, W. Schuhmann *Sensors & Actuators B*, **79** (2001) 150-156. A reagentless glucose biosensor based on glucose oxidase entrapped into Osmium-complex modified polypyrrole films.
- S. Gaspar, M. Mosbach, L. Wallman, T. Laurell, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **73** (2001) 4254-4261. A method for the design and study of enzyme micro-structures formed by means of a flow-through micro-dispenser
- M. Mosbach, T. Laurell, J. Nilsson, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **73** (2001) 2468-2475. Determination of Diffusion Coefficients of Electroactive Species in "Time-of-Flight-Experiments" Using a Micro-Dispenser and Micro-Electrodes
- O. Köster, W. Schuhmann, H. Vogt, W. Mokwa, *Sensors & Actuators B*, **76** (2001) 573-581. Quality Control of Ultra-Microelectrode Arrays Using Cyclic Voltammetry, Electrochemical Impedance Spectroscopy and Scanning Electrochemical Microscopy
- S. Gaspar, H. Zimmermann, I. Gazaryan, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **13** (2001) 284-288. Hydrogen peroxide biosensors based on direct electron transfer from plant peroxidases immobilized on self-assembled thiol-monolayer modified gold electrodes
- Hengstenberg, A. Blöchl, I. D. Dietzel, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **113** (2001) 942-946. Ortsaufgelöste Detektion der Sekretion von Neurotransmittern aus einzelnen Zellen mittels elektrochemischer Rastermikroskopie; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **40** (2001) 905-908. Spatially Resolved Detection of Neurotransmitter Secretion from Individual Cells by Means of Scanning Electrochemical Microscopy.

- S. Gaspar, K. Habermüller, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Sensors & Actuators B*, **72** (2001) 63-68. Hydrogen peroxide sensitive biosensor based on plant peroxidases entrapped in Os-modified polypyrrole films
- Kurzawa, W. Schuhmann, L. Wang, H. Orth, I. Schwendtke, H. Gerberding, H. Stadler, B. Gründig, *GIT Labor-Fachzeitschrift* **45** (2001) 156-160. Kontinuierliche Bestimmung von Ammoniumionen in Klärwerksprozessen mittels sequentieller Injektionsanalyse.
- Turyan, T. Erichsen, W. Schuhmann, D. Mandler, *Electroanalysis* **13** (2001) 79-82. On-Line Analysis of Mercury by Sequential Injection Stripping Analysis (SISA) Using a Chemically Modified Electrode

Theoretische Chemie

- G.M. Koretsky, M.B. Knickelbein, R. Rousseau, and D. Marx, *J. Phys. Chem. A* **105** (2001) 11197-11203. A Combined Infrared Photodissociation and Theoretical Study of the Interaction of Ethanol with Small Gold Clusters.
- D. Krüger, H. Fuchs, R. Rousseau, D. Marx, and M. Parrinello, *J. Chem. Phys.* **115** (2001) 4776-4786. Interaction of short-chain alkane thiols and thiolates with small gold clusters: Adsorption structures and energetics.
- M.E. Tuckerman and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 4946-4949. Heavy-Atom Skeleton Quantization and Proton Tunneling in "Intermediate-Barrier" Hydrogen Bonds.

Presseecho dieser Arbeit:

- Ruhr-Nachrichten Bochum (14./15.06.2001): *Computer lässt Protonen tanzen.*
- Verein Deutscher Ingenieure: Ingenieur Forum Westfalen-Ruhr, **2** (2001) 29. *Protonen beim Tanzen zugeschaut.*
- dpa-Wissenschaftsdienst, **25** (18.06.2001) 14-15. *Protonentransfer im Molekül erstmals vollständig simuliert.*
- T. Grycuk, W. Behmenburg, V. Staemmler, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** (2001) 245. Quantum Calculation of the Excitation Spectra of Li*He Probing Interaction Potentials and Dipole Moments.
- M. Pykavy, V. Staemmler, O. Seiferth, H.-J. Freund, *Surf. Sci.* **479** (2001) 11. Adsorption of CO on Cr₂O₃ (0001).
- S. Thiel, M. Pykavy, T. Klüner, H.-J. Freund, R. Kosloff, V. Staemmler, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 077601. Three-Dimensional *Ab Initio* Quantum Dynamics of the Photodesorption of CO from Cr₂O₃(0001): Stereodynamic Effects.
- C. Kolczewski, R. Püttner, O. Plashkevych, H. Agren, V. Staemmler, M. Martins, G. Snell, A. S. Schlachter, M. Sant'Anna, G. Kaindl, L. G. M. Pettersson, *J. Chem. Phys.* **115** (2001) 6426. Detailed Study of Pyridine at the C 1s and N 1s Ionization Thresholds: The Influence of the Vibrational Fine Structure.
- D. Mukherjee, W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **114** (2001) 2047-2061. Irreducible Brillouin conditions and contracted Schrödinger equations for *n*-electron systems. I. The equations satisfied by the density cumulants.
- D. Mukherjee, W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **114** (2001) 8226-8227. Erratum.
- W. Kutzelnigg, *Forschung & Lehre* **6** (2001) 302-305. Kann man wissenschaftliche Leistung messen? Über die Aussagekraft von Publikationslisten und Zitierhäufigkeiten.

Technische Chemie

- M.M. Schubert, S. Hackenberg, A. van Veen, M. Muhler, V. Plzak, R.J. Behm, *J. Catal.* **197** (2001) 113-122. CO Oxidation over supported Gold Catalysts – “Inert” and “Active” support Materials and their role for the Oxygen supply during reaction
- A.C. van Veen, H.W. Zanthoff, O. Hinrichsen, M. Muhler, *J. Vac. Sci. Technol. A* **19** (2001) 651-655. Fixed-bed microreactor for transient kinetic experiments with strongly adsorbing gases under high vacuum conditions
- H. Bielawa, O. Hinrichsen, A. Birkner, M. Muhler, *Angew. Chem. Int. Ed.* **40** (2001) 1061-1063. The Ammonia –Synthesis Catalyst of the Next Generation: Barium-Promoted Oxide-Supported Ruthenium
- H. Bielawa, O. Hinrichsen, A. Birkner, M. Muhler, *Angew. Chem.* **113** (2001) 1093-1096. Der Ammoniakkatalysator der nächsten Generation: Barium-promotiertes Ruthenium auf oxidischen Trägern
- M.M. Günter, T. Ressler, B. Bems, C. Büscher, T. Genger, O. Hinrichsen, M. Muhler, R. Schlögl, *Catal. Lett.* **71** (2001) 37-44. Implication of the microstructure of binary Cu/ZnO catalysts for their catalytic activity in methanol synthesis
- D. Wolf, M. Heber, W. Grünert, M. Muhler, *J. Catal.* **199** (2001) 92-106. Predictions of Relationships between Catalytic and Solid Phase Properties by Kinetic Models and Their Validation
- Z. Paal, T. Koltai, K. Matusek, J.-M. Manoli, C. Potvin, M. Muhler, U. Wild, P. Tetenyi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3** (2001) 1535-1543. Sulfur uptake and exchange, HDS activity and structure of sulfided, Al₂O₃ supported MoO_x, PdMoO_x and PtMoO_x catalysts
- S. Besselmann, C. Freitag, O. Hinrichsen, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3** (2001) 4633-4638. Temperature-programmed reduction and oxidation experiments with V₂O₅/TiO₂ catalysts
- Madhavaram, H. Idriss, S. Wendt, Y.D. Kim, M. Knapp, H. Over, J. Aßmann, E. Löffler, M. Muhler, *J. Catal.* **202** (2001) 296-307. Oxidation Reactions over RuO₂: A Comparative Study of the Reactivity of the (110) Single Crystal and Polycrystalline Surfaces
- H. Bielawa, M. Kurtz, T. Genger, O. Hinrichsen, *Ind. Eng. Chem. Res.* **40** (2001) 2793-2800. Rapid kinetic measurements in methanol and ammonia syntheses
- H. Bielawa, M. Kurtz, O. Hinrichsen, *Chem.-Ing.-Tech.* **73** (2001) 685. The quasi-isothermal temperature-programmed method for rapid kinetic measurements
- A.C. van Veen, O. Hinrichsen, M. Muhler, in: 4th World Congress on Oxidation Catalysis (Hrsg. H. Geiling), 2001, 113-117. TAP reactor experiments over an unsupported polycrystalline silver catalyst: the influence of different oxygen states on the reactivity in selective oxidation reactions
- S. Besselmann, C. Freitag, O. Hinrichsen, Elke Löffler, M. Muhler, , in: 4th World Congress on Oxidation Catalysis (Hrsg. H. Geiling), 2001, 305-308. On the role of different vanadia species in the adsorption and oxidation of toluene over V₂O₅/TiO₂ catalysts (Eurocat)
- S. Besselmann, C. Freitag, O. Hinrichsen, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3** (2001) 4633-4638. Temperature-programmed reduction and oxidation experiments with

V₂O₅/TiO₂ catalysts

- T. Liese, E. Löffler, W. Grünert, *J. Catal.* **197** (2001) 123-30. Selective Catalytic Reduction of NO by Methane over CeO₂-Zeolite Composites – Active Sites and Reaction Steps
- M. Heber, W. Grünert, *Top. Catal.* **15** (2001) 3-11. Application of Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS) in the Surface Characterisation of Polycrystalline Oxide Catalysts I. Methodics and Analytical Potential
- F. Heinrich, C. Schmidt, E. Löffler, W. Grünert, *Catal. Comm.* **2** (2001) 317-21. A highly active intra-zeolite iron site for the selective catalytic reduction of NO by isobutane
- F. Heinrich, E. Löffler, W. Grünert, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **135** (2001) 30-P-27. Selective catalytic reduction of NO over Fe zeolites – catalytic and *in-situ* DRIFTS studies
- C. Schmidt, T. Sowade, F.-W. Schütze, M. Richter, H. Berndt, W. Grünert, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **135** (2001) 30-P-15. A comparison of different preparation methods of indium-modified zeolites as catalysts for the selective reduction of NO_x
- F.-W. Schütze, H. Berndt, M. Richter, B. Lücke, C. Schmidt, T. Sowade, W. Grünert, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **135** (2001) 10-O-01. Investigation of indium-loaded zeolites and additionally promoted catalysts for the selective catalytic reduction of NO_x by methane

Biochemie 1

- B. Lacombe, D. Becker, R. Hedrich, R. DeSalle, M. Hollmann, J.M. Kwak, J.I. Schroeder, N. Le Novère, H.G. Nam, E.P. Spalding, M. Tester, F.J. Turano, J. Chiu, and G. Coruzzi, *Science* **292** (2001) 1486-1487. The identity of plant glutamate receptors.
- N. Strutz, C. Villmann, A. Thalhammer, P. Kizelsztejn, M. Eisenstein, V.I. Teichberg, and M. Hollmann, *Journal of Neuroscience* **21** (2001) 401-411. Identification of domains and amino acids involved in GluR7 ion channel function.

Biochemie 2

- R. Heumann: Krebsgen gegen Nervenleiden: Rubin 1, 12-16 (2001)
- Siren AL, Fratelli M, Brines M, Goemans C, Casagrande S, Lewczuk P, Keenan S, Gleiter C, Pasquali C, Capobianco A, Mennini T, Heumann R, Cerami A, Ehrenreich H, Ghezzi P. Erythropoietin prevents neuronal apoptosis after cerebral ischemia and metabolic stress. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 98(7), 4044-9 (2001).
- Gross C, Heumann R, Erdmann KS. The protein kinase C-related kinase PRK2 interacts with the protein tyrosine phosphatase PTP-BL via a novel PDZ domain binding motif. *FEBS Lett.* 496(2-3), 101-4 (2001).
- W. Schultze, V. Eulenburg, V. Lessmann, L. Herrmann, T. Dittmar, E.D. Gundelfinger, R. Heumann and K.S. Erdmann: Semaphorin4F interacts with the postsynaptic density protein SAP90/PSD-95. *J. Neurochem.* 78(3), 482-9 (2001).
- Anneser JM, Gmerek A, Gerkrath J, Borasio GD, Heumann R. Immunosuppressant FK506 does not exert beneficial effects in symptomatic G93A superoxide dismutase-1 transgenic mice. *Neuroreport.* 12(12), 2663-5 (2001).

- Holzer M, Gartner U, Klinz F, Narz F, Heumann R, Arendt T. Activation of mitogen-activated protein kinase cascade and phosphorylation of cytoskeletal proteins after neurone-specific activation of p21ras. I. Mitogen-activated protein kinase cascade. *Neuroscience*. 105(4), 1031-40 (2001).
- Holzer M, Rodel L, Seeger G, Gartner U, Narz F, Janke C, Heumann R, Arendt T. Activation of mitogen- activated protein kinase cascade and phosphorylation of cytoskeletal proteins after neurone-specific activation of p21ras. II. Cytoskeletal proteins and dendritic morphology. *Neuroscience*. 105(4), 1041-54 (2001).
- M. Klau, M. Hartmann, K. Erdmann, R. Heumann & V. Lessmann. Reduced number of functional glutamatergic synapses in hippocampal neurons overexpressing full-length TrkB receptors. *J. Neurosci. Res.* 66(3), 327-336 (2001).
- M. Hartmann, R. Heumann & V. Lessmann. Synaptic secretion of Brain-Derived Neurotrophic Factor after high frequency postsynaptic stimulation of glutamatergic synapses. *EMBO J.* 20(21), 5887-97 (2001).
- J. Paul, K. Gottmann, V. Lessmann. NT-3 regulates BDNF-induced modulation of synaptic transmission in cultured hippocampal neurons. *NeuroReport* **12** (12): 2635-2639 (2001).
- Hengstenberg, A. Blöchl, I. D. Dietzel, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **113** (2001) 942-946. Ortsaufgelöste Detektion der Sekretion von Neurotransmittern aus einzelnen Zellen mittels elektrochemischer Rastermikroskopie; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **40** (2001) 905-908. Spatially resolved detection of neurotransmitter secretion from individual cells by means of scanning electrochemical microscopy.
- G. Hoffmann, D. Bartsch, H.H. Althaus, R. Heumann, I.D. Dietzel, *Pflügers Arch. Suppl.* **441** (2001) R147. Induction of action potentials in cultured oligodendrocytes from adult pigs.
- S. Mann, G. Hoffmann, A. Hengstenberg, W. Schuhmann, I.D. Dietzel, *Biological Chemistry Suppl.* **382** (2001) S132. Scanning ion conductance microscopy – a new technique to investigate properties of living cells.
- K.F. Störckuhl and R. Kettler, Functional analysis of an olfactory receptor in *Drosophila melanogaster*. *PNAS* **98** (2001) 9381-9385
- C.H. Wetzel, H.-J. Behrendt, G. Gisselmann, K.F. Störckuhl, B. Hovemann, and H. Hatt, Functional expression and characterization of a *Drosophila* odorant receptor in a heterologous cell system. *PNAS* **98** (2001) 9377-9380.

Dissertationen 2001

- **Besselmann, Sonja:** Temperaturprogrammierte und schwingungsspektroskopische Untersuchungen von V_2O_5/TiO_2 -Katalysatoren zur selektiven Oxidation von Alkylaromaten. Disputation: 29.01.2001 (Prof. Dr. M. Muhler)
- **Kruse, Tobias:** Übergangsmetallkomplexe neuer Thioether-Phenolatliganden - Synthese, Strukturen und Eigenschaften -. Disputation: 30.01.2001 (Prof. Dr. K. Wieghardt)
- **Schnepf, Robert:** *DeNovo*-Synthese und Charakterisierung von Vier-Helix-Bündel-Kupferproteinen. Disputation: 30.01.2001 (Prof. Dr. K. Wieghardt)
- **Türkel, Özlem:** Untersuchungen der Mechanismen der RSV-induzierten Th2-Zelldifferenzierung in kokultivierten dendritischen Zellen und allogenen naiven T-Zellen. Disputation: 02.02.2001 (Prof. Dr. H. Werchau)
- **Bräutigam, Andreas:** Einflüsse der Brandgutzusammensetzung und der Verbrennungsbedingungen auf die Entstehung mittel- und schwerflüchtiger organischer Brandrauchinhaltsstoffe. Disputation: 05.02.2001 (Prof. Dr. W. S. Sheldrick)
- **Winkler, Holger:** Mesoskopische Galliumnitrid-Kompositmaterialien. Disputation: 05.02.2001 (Prof. Dr. R. A. Fischer)
- **Baumann, Dirk:** Reorganisationen isomerer Methylenbiycloheptene und von Tricyclohexanen: Beiträge zur Stereochemie, Enantio- und Strukturisomerisierung. Disputation: 06.02.2001 (Prof. Dr. D. Hasselmann)
- **Leitheußer, Andreas:** Periodische Hartree-Fock-Rechnungen an Oxidoberflächen. Disputation: 07.02.2001 (Prof. Dr. V. Staemmler)
- **Stange, Bernd:** Beiträge zur Chemie der Bor-Stickstoff-Verbindungen - Synthesen und Reaktionen von N-Sulfinylaminen des Bors. Wege zu geeigneten Vorstufen -. Disputation: 07.02.2001 (Prof. Dr. mult. Dr.h.c. A. Haas)
- **Kolb, Peter:** Synthesen, Strukturen und Reaktionen von Zirkoniumkomplexen mit Pentalenliganden. Disputation: 08.02.2001 (Prof. Dr. K. Jonas)
- **Olteanu, Alexandra Gabriela:** Beiträge zur Chemie tellursubstituierter Chalkogen-Stickstoff-Heterocyclen. Disputation: 09.03.2001 (Prof. Dr. mult. Dr.h.c. A. Haas)
- **Röttgers, Thomas:** Design und Struktur ionophorer Kupfer(I)-iodid- und -pseudohalogenidhaltiger Koordinationspolymere mit 1,10-Dithio-18-Krone-6 als verbrückendem Liganden. Disputation: 23.03.2001 (Prof. Dr. W. S. Sheldrick)
- **Wirth, Wolf:** NMR-spektroskopische, potentiometrische und chromatographische Untersuchungen zur spezifischen Erkennung von Übergangsmetallkomplexen durch 2'- und 3'-Purinnukleotide. Disputation: 03.04.2001 (Prof. Dr. W. S. Sheldrick)
- **Mosbach, Marcus:** Mikroelektrochemische Methoden in der Biosensorik und Elektroanalytik. Disputation: 04.04.2001 (Prof. Dr. W. Schuhmann)
- **Sprenger, Susanne:** Oberflächenanalytische Untersuchungen zu Metall-Träger-Wechselwirkungen mittels Photoelektronen-, Ionenstreu- und Infrarotspektroskopie. Disputation: 18.04.2001 (Prof. Dr. M. Muhler)
- **Sickmann, Albert:** Proteomanalyse des humanen Liquor cerebrospinalis. Disputation: 24.04.2001 (Prof. Dr. H. E. Meyer)
- **Ossenbühl, Friedrich:** Zur post-transkriptionellen Regulation der plastidären Genexpression in *Chlamydomonas reinhardtii*: Analyse von RNA-Protein Interaktionen mit der 5'nicht-translatierten Region der *psbD* mRNA. Disputation: 24.04.2001 (PD Dr. J. Nickelsen)

- **Weiß, Dana:** Koordinationschemie von Organylmetallspezies an Platinkomplexfragmenten. Disputation: 04.05.2001 (Prof. Dr. R. A. Fischer)
- **Segnitz, Oliver:** Neutrale und kationische Komplexe donorfunktionalisierter Cyclopentadienyl-Liganden an Nickelzentren - Synthese, Struktur, Reaktivität, Theorie -. Disputation: 04.05.2001 (Prof. Dr. R. A. Fischer)
- **Praefcke, Gerrit:** Das humane Guanylat-bindende Protein 1: Modell oder Sonderfall der Dynamin-verwandten GTP-bindenden Proteine. Disputation: 18.05.2001 (Prof. Dr. A. Wittinghofer)
- **Kiselewsky, Michael:** Untersuchungen an Singulettcarbenen und Carbonyl-O-oxiden in kryogenen Matrices. Disputation: 11.06.2001 (Prof. Dr. W. Sander)
- **Sill, Torsten:** Untersuchungen der Hydrochlorierung von Silizium zur Trichlorsilansynthese in einem Wirbelschichtreaktor. Disputation: 25.06.2001 (Priv.-Doz. Dr. L. Mleczko)
- **Schumacher, Rüdiger:** Reaktivität μ -oxo- μ -acetato-verbrückter Eisen- und Mangankomplexe. Disputation: 27.06.2001 (Prof. Dr. K. Wieghardt)
- **van Staveren, Dave Richard:** Robust transition metal markers for labelling of Peptides via solid phase synthesis methods. Disputation: 27.06.2001 (Prof. Dr. K. Wieghardt)
- **Kurzawa, Christian:** Nicht-manuelle Immobilisierung von biologischen Erkennungselementen als Grundlage für die Herstellung amperometrischer Biosensoren für potentielle Anwendungen in der Klärwerksprozeßkontrolle und der medizinischen Diagnostik. Disputation: 04.07.2001 (Prof. Dr. W. Schuhmann)
- **Reiß, Eike Sebastian:** Spektroskopische Untersuchungen verschiedener molekularer Adsorbate auf der Titandioxid(110)-Oberfläche. Disputation: 11.07.2001 (Prof. Dr. C. Wöll)
- **Arnold, Ralf:** Struktur und Ordnung selbstordnender Monolagen aliphatischer und aromatischer Thiole auf Goldoberflächen. Disputation: 20.08.2001 (Prof. Dr. C. Wöll)
- **Hasse, Bernd:** Festkörperchemische Untersuchungen an Biomineralen und Alkali-S-2-chlorpropionaten. Disputation: 22.08.2001 (Prof. Dr. M. Epple)
- **Rüggeberg, Carsten Jens:** Beiträge zur gerichteten Evolution von Enzymen für die organische Synthese. Disputation: 23.08.2001 (Prof. Dr. M. T. Reetz)
- **Wilensek, Stephanie:** *Gerichtete Evolution* als ein Mittel zur Erzeugung enantioselektiver Enzyme für die organische Synthese. Disputation: 23.08.2001 (Prof. Dr. M. T. Reetz)
- **Hüttermann, Aloys:** Experimente zur Entwicklung pulszählender Schutzgruppen. Disputation: 27.08.2001 (Prof. Dr. G. von Kiedrowski)
- **Hoffmann, Gerd:** Regulation spannungsaktivierter Ionenkanäle neuronaler Zellen. Disputation: 27.08.2001 (Priv.-Doz. Dr. I. Dietzel-Meyer)
- **Wollenweber, Marcel:** Synthese kationischer Lipide auf Basis von L-Cystin und Untersuchungen zur Synthese selbstoptimierender Systeme. Disputation: 28.09.2001 (Prof. Dr. G. von Kiedrowski)
- **Fuxen, Claus:** Adsorption, Struktur und Desorption von Organothiolen auf Goldsubstraten. Disputation: 08.10.2001 (Prof. Dr. C. Wöll)
- **Wolf, Anke:** Systematische Untersuchungen zur Synthese von Goldkatalysatoren für die Tieftemperatur-CO-Oxidation. Disputation: 29.10.2001 (Prof. Dr. F. Schüth)

- **Büscher, Christoph:** Mikrokinetische Untersuchungen zur kupferkatalysierten Methanolsynthese und Konvertierung von Kohlenmonoxid mit Wasserdampf. Disputation: 29.10.2001 (Prof. Dr. M. Muhler)
- **Schatzschneider, Ulrich:** Übergangsmetallkomplexe mit Nitronyl Nitroxid-Radikalen - Bausteine für molekulare magnetische Materialien -. Disputation: 30.10.2001 (Prof. Dr. K. Wieghardt)
- **Ballesteros Katemann, Bernardo:** Elektrochemische Rastermikroskopie in Nanometerdimensionen und hochaufgelöste Charakterisierung von Korrosionsphänomenen mittels lokaler Impedanz. Disputation: 30.10.2001 (Prof. Dr. W. Schuhmann)
- **Reinholz, Tatjana Christina:** Charakterisierung von Disulfid-einführenden und Cytochrom c-Biogenese-Proteinen in Cyanobakterien. Disputation: 30.10.2001 (Prof. Dr. M. Rögner)
- **Knocks, Andrea:** Dielektrische Spektroskopie an Lösungen kleiner, biochemisch relevanter Modellsysteme. Disputation: 31.10.2001 (Prof. Dr. H. Weingärtner)
- **Azzawi, Alexander:** Ligationsreaktionen mit Phosphoramidaten in Modellreaktionen, SELEX-Experimenten und bei Oligonucleotid-Peptid-Konjugaten - Beiträge zum Konzept einer minimalen Replikase -. Disputation: 02.11.2001 (Prof. Dr. G. von Kiedrowski)
- **Schade, Olaf:** Zeitaufgelöste und kryogene Untersuchungen von Carbonylradikalen und Nitrenen. Disputation: 05.11.2001 (Prof. Dr. W. Sander)
- **Osterhoff, Martin:** Die Rolle der Ca^{2+} /calmodulinabhängigen Proteinkinase II δ_2 in β -Zellen. Disputation: 05.11.2001 (Prof. Dr. R. Heumann)
- **Sakinc, Türkan:** Identifizierung und Charakterisierung eines Sdr-Proteins von *Staphylococcus saprophyticus*. Disputation: 05.11.2001 (Prof. Dr. S. Gattermann)
- **Dümpelmann, Edda:** Die effiziente Transkription des viralen EBER 2-RNA-Gens hängt von der strukturellen Integrität der RNA ab. Disputation: 06.11.2001 (Prof. Dr. B.-J. Benecke)
- **Schmidt, Carmen:** Untersuchungen an indium- und eisenmodifizierten Zeolithkatalysatoren mittels Röntgenabsorptions- und Photoelektronenspektroskopie. Disputation: 06.11.2001 (Prof. Dr. W. Grünert)
- **Herrmann, Lutz:** Untersuchung der biologischen Funktion der Proteintyrosinphosphatase PTP-BL. Disputation: 06.11.2001 (Prof. Dr. R. Heumann)
- **Frodl, Andre:** Ligandeneinflüsse auf die DNA-Wechselwirkungen von intercalierenden Halbsandwich-Ruthenium(II)-Komplexen. Disputation: 08.11.2001 (Prof. Dr. W. S. Sheldrick)
- **Vollmer, Stefan:** Untersuchung von selbstordnenden Alkanthiol-Monolagen auf Kupfer-Einkristalloberflächen. Disputation: 12.11.2001 (Prof. Dr. C. Wöll)
- **Scheele, Iris:** Hochauflösende Infrarot-Spektroskopie an schwach gebundenen Van-der-Waals-Systemen. Disputation: 04.12.2001 (Prof. Dr. M. Havenith-Newen)
- **Schmidt, Jörg:** Charakterisierung eines Ziegler-Natta-Modellkatalysators für die Polyethylen-Herstellung - Untersuchungen mit ESR und IRAS bei der Präparation und Ethylen-Polymerisierung -. Disputation: 06.12.2001 (Prof. Dr. H.-J. Freund)
- **Schroeder, Kerstin:** Synthese und Reaktivität stabiler Dioxirane. Disputation: 11.12.2001 (Prof. Dr. W. Sander)
- **Birschmann, Ingvid:** Funktionsanalysen der AAA-Peroxine Pex1p und Pex6p aus *Saccharomyces cerevisiae*. Disputation: 11.12.2001 (Prof. Dr. W.-H. Kunau)

- **Hake, Andrea:** Rotationsenergietransfer im $\text{NH}(\text{A}^3\Pi, v=0)$ -Radikal durch inelastische Stöße mit Ammoniak. Disputation: 12.12.2001 (Prof. Dr. F. Stuhl)
- **Oberbeckmann, Nicola:** Die Einführung von funktionalisierten Cyclopentadienyl-Liganden an Platin(II)-Zentren über Diolefin-Platin-Komplexe. Disputation: 13.12.2001 (Prof. Dr. R. A. Fischer)
- **Evers, Matthias:** Generation and phenotyping of tenascin-C deficient mice and cloning and characterization of new members of the HNK-1 family of sulfotransferases. Disputation: 13.12.2001 (Prof. Dr. R. Heumann)
- **Ladberg, Rüdiger:** Lineare und cyclische Oligopeptide aus 3α -Aminocholansäure-Bausteinen - Synthesen, Konformationen und Komplexierungsverhalten -. Disputation: 14.12.2001 (Prof. Dr. M. Feigel)
- **Beckmann, Udo:** Synthese und Charakterisierung von Eisen-, Cobalt- und Galliumkomplexen mit den redoxaktiven Amidligandsystemen Pyridincarboxamidobenzol und Hydroxyphenyloxamid. Disputation: 17.12.2001 (Prof. Dr. K. Wieghardt)
- **Bussian, Patrick:** *In situ*-Untersuchungen zur Festkörperbildung. Disputation: 17.12.2001 (Prof. Dr. F. Schüth)
- **Becker, Thomas:** Untersuchungen der Struktur sauberer und adsorbatbedeckter Metalloxid-Oberflächen und des Wachstums metallischer Schichten. Disputation: 18.12.2001 (Prof. Dr. C. Wöll)
- **Mallek, Carsten:** Versuche zur Darstellung eines nicht-konjugierten Dimethylenbicyclooctens und Untersuchungen zum thermischen Verhalten 1,4-dimethylensubstituierter Tricycloalkane. Disputation: 18.12.2001 (Prof. Dr. D. Hasselmann)
- **Geick, Nils Ulrich:** Zu Synthese und Eigenschaften von Oxabicyclohexan und Derivaten und zur *Claisen*-Umlagerung von Allenylallylether. Disputation: 18.12.2001 (Prof. Dr. D. Hasselmann)
- **Exner, Michael:** Darstellung von 1,3-Didehydrobenzolderivaten in kryogenen Matrices durch die Photolyse von [2.2]-Metaparacyclophan-2,9-dionen. Disputation: 19.12.2001 (Prof. Dr. W. Sander)
- **Lopez, Marco:** Vom Metalloxid-Konzept zur Metalloxid-Methode - Wasserlösliche nanostrukturierte mono-, bi-, tri- und tetrametallische Metalloxid-Kolloide -. Disputation: 20.12.2001 (Prof. Dr. M. T. Reetz)
- **Maiwald, Peter:** Neue Liganden für die asymmetrische Katalyse. Disputation: 20.12.2001 (Prof. Dr. M. T. Reetz)
- **Balster, Andreas:** Darstellung und Nachweis von organischen Diradikalen in kryogenen Matrices. Disputation: 21.12.2001 (Prof. Dr. W. Sander)
- **Kindermann, Maik:** Kleine organische Replikationssysteme und kristalline Filme durch Amidinium-Carboxylat-Wechselwirkungen an der Luft-Wasser-Grenzschicht. Disputation: 21.12.2001 (Prof. Dr. G. von Kiedrowski)