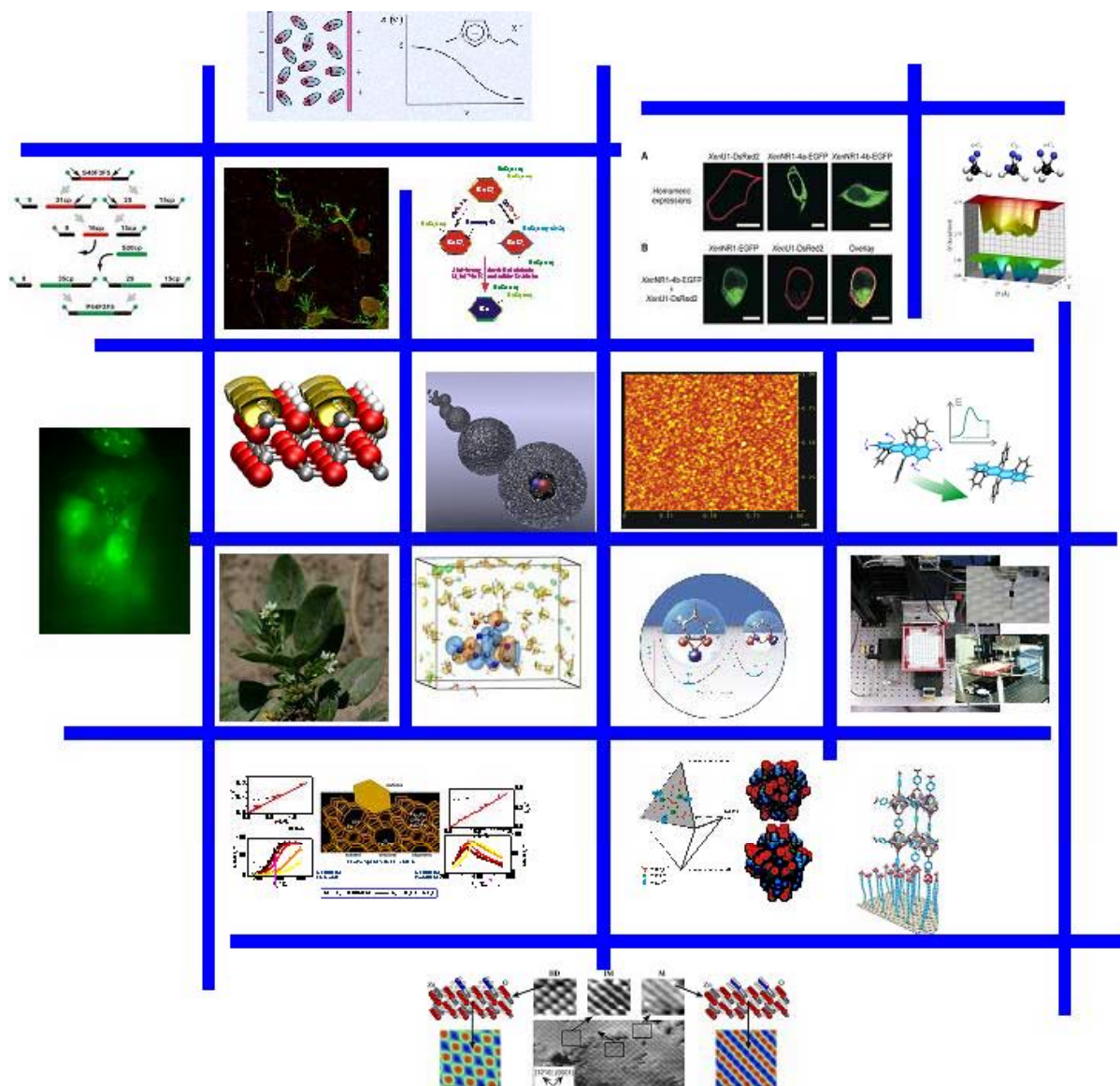


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie

Forschung 2005



Research 2005

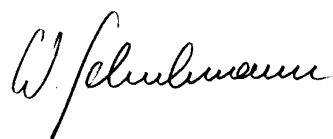
Faculty of Chemistry

Ruhr-Universität Bochum

Dieser Jahresbericht soll einen kurzen Eindruck über die Vielfältigkeit der Forschung in der Fakultät für Chemie der Ruhr-Universität Bochum im Jahre 2005 vermitteln. Die Fakultät hat sich in der Forschungslandschaft in Deutschland aber auch aus internationaler Sicht sehr gut positioniert, so dass wir auch in schwierigen Zeiten mit Tatkraft und Optimismus die vielfältigen Aufgaben in Forschung und Lehre weiter angehen werden.

Wenn Sie zu den einzelnen Themen weitere Informationen wünschen, können Sie unter den angegebenen Adressen der Homepages der Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (www.ruhr-uni-bochum.de/chemie) vertiefte Einblicke erhalten.

Bochum, den 01.04.2006

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'W. Schuhmann', written in a cursive style.

(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann; Fakultätsbeauftragter für Öffentlichkeitsarbeit)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1	
Prof. Dr. Nils Metzler Nolte (Bioanorganische Chemie).....	4
Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2	
Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials).....	5
Dr. Rochus Schmid.....	6
JP Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	7
Lehrstuhl für Organische Chemie 1	
Prof. Dr. Sabine Müller (Bioorganische Chemie)	8
Lehrstuhl für Organische Chemie 2	
Prof. Dr. Wolfram Sander	9
PD Dr. Götz Bucher.....	10
PD Dr. Holger Bettinger	11
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	12
Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1	
Prof. Dr. Christof Wöll	13
PD Dr. Gregor Witte.....	14
Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	15
Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2	
Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	16
Prof. Dr. Herrmann Weingärtner (Physikalische Chemie der Flüssigkeiten).....	17
Prof. (em.) Dr. Gerhard Schneider	18
Lehrstuhl für Analytische Chemie	
Prof. Dr. William Sheldrick	19
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)	20
Dr. Peter Zinn	21
Pd Dr. I. Müller	22
JP Dr. Raphael Stoll.....	23
Lehrstuhl für Theoretische Chemie	
Prof. Dr. Dominik Marx.....	24
PD Dr. Nikos L. Doltsinis	25
Dr. Bernd Meyer.....	26
Prof. Dr. Christof Hättig	27
Prof. Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie).....	28
PD Dr. Karin Fink	29
Prof. (em.) Dr. Werner Kutzelnigg.....	30
Lehrstuhl für Technische Chemie	
Prof. Dr. Martin Muhler.....	31
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren).....	32
Lehrstuhl für Biochemie 1	
Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	33
Lehrstuhl für Biochemie	
Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	34
Prof. Dr. Bernd Hovemann	35
PD Dr. Andrea Blöchl.....	36
Didaktik der Chemie	
Prof. Dr. Katrin Sommer.....	37

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I-Bioanorganische Chemie;

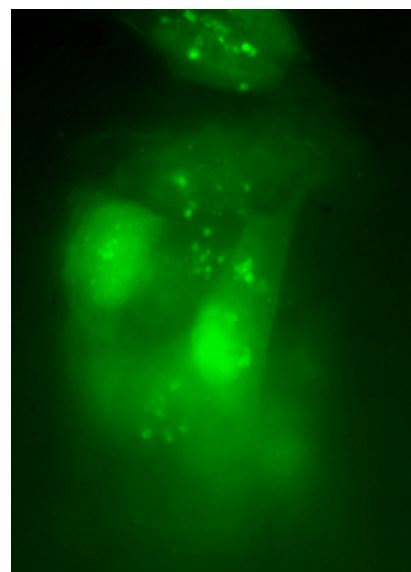
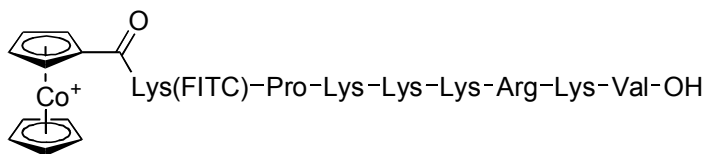
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

F. Noor, A. Wüstholtz, R. Kinscherf, N. Metzler-Nolte, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 2429-2432. A Cobaltocenium–Peptide Bioconjugate Shows Enhanced Cellular Uptake and Directed Nuclear Delivery.

Die Aufnahme und der gezielte Transport von Organometallverbindungen in bestimmte Zellkompartimente ist von zentraler Bedeutung für die biologische Funktion dieser Verbindungen. Wir stellen ein neues Konzept zum gerichteten Transport von Organometallverbindungen in lebende Zellen durch kovalente Verbindung des metallkomplexes mit einem intracellulären Signalpeptid vor. Ein neuartiges Biokonjugat aus NLS-Peptid, Cobaltoceniumcarbonsäure und einem Fluoreszenzmarker wurde mittels Festphasen-Peptidsynthese hergestellt und vollständig charakterisiert (NLS: Nuclear Localization Sequence, Kernlokalisierungssequenz). Eine Anreicherung im Zellkern wurde mittels Fluoreszenzmikroskopie an lebenden HepG2 Zellen nachgewiesen.



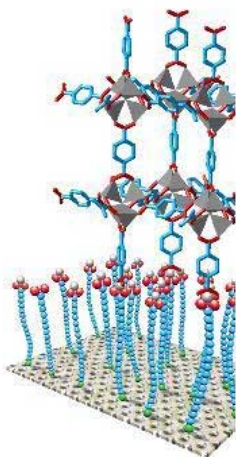
Uptake and directed cellular delivery of organometallic compounds is of central importance for the biological function of these compounds. We introduce a new concept for the directed delivery of organometallic compounds in living cells by linking the metal complex covalently to intra-cellular signalling peptides. A novel bioconjugate was prepared by solid phase peptide synthesis (SPPS) comprising the NLS peptide, cobaltocenium carboxylic acid and a fluorescence marker (NLS: nuclear localization sequence). The conjugate was fully characterized. Cellular uptake and accumulation in the nuclei of living HepG2 cells was demonstrated by live cell fluorescence microscopy.

Roland A. Fischer

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

S. Hermes, F. Schröder, R. Chelkowski, C. Wöll, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **2005**, *127*, 13744-13745. Selective Nucleation and Growth of Metal-Organic Open Framework Thin Films on Patterned COOH/CF₃-Terminated Self-Assembled Monolayers on Au(111).

Aus der Fülle koordinationspolymerer Verbindungen ragt die von Omar M. Yagi et al. entwickelte Stoffklasse hochporöser basischer Zinkcarboxylate heraus. Ihr Prototyp ist MOF-5, in dem Zn₄O Baueinheiten über Terephthalat-Brücken zu einem Zeolith-ähnlichen, kubischen Raumnetz verknüpft sind (MOF: Metal Organic Framework). Die von keiner anderen, kristallinen Substanz übertroffenen, extrem hohen spezifischen Oberflächen von bis zu 4500 m²/g bzw. Porenvolumina von 0.69 cm³/cm³ (für MOF-177) bei gleichzeitiger thermischer Stabilität (bis zu 350 °C) eröffnen faszinierende Perspektiven für die supramolekulare Wirt/Gast-Chemie.^[3] Anwendungen als Gas-Speicher (H₂, CH₄) und Trennmedien, als Gas-Sensoren und Katalysatormaterialien aber auch Möglichkeiten für die molekulare Elektronik zeichnen sich ab. Für die Realisierung dieser Perspektiven aber ist es erforderlich, MOF-Materialien in Form dünner Schichten an Oberflächen gezielt zu verankern bzw. aufwachsen zu lassen. Dies haben wir in der zitierten Arbeit beschrieben.



The ultra high porous and chemically robust Metal-Organic open Framework coordination polymers (MOFs) based on zinc carboxylate structural motifs pioneered by O. M. Yaghi et al. are fascinating because of extraordinary gas-storage capacities for hydrogen and hydrocarbons. Other applications are emerging as well, including gas-separation, gas-sensing and catalysis. Fine-tuning size, shape and chemical functionality of the nanoscale cavities and the internal surface offers prospects for a unique supramolecular host-guest chemistry of these zeolith-type organic-inorganic hybrid materials. Beyond this use as bulk (powder) materials it is obvious that the integration of MOFs as novel building-blocks and functional units for bottom-up nanotechnology raises the challenge to direct and control the growth of MOFs at surfaces (Fig. 1). Self Assembled Organic Monolayers (SAMs) in combination with soft lithographic techniques (Micro Contact Printing, μ CP) play a dominant role in designing chemical and physical functionalities at surfaces on a molecular level. Our paper describes the selective anchoring and growth of MOF-5 on patterned SAMs and the subsequent gas-phase loading with a OMCVD precursors for Pd to yield {Pd@MOF-5}/SAM.

Rochus Schmid

Anorganische Chemie II, Organometallics and Materials

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

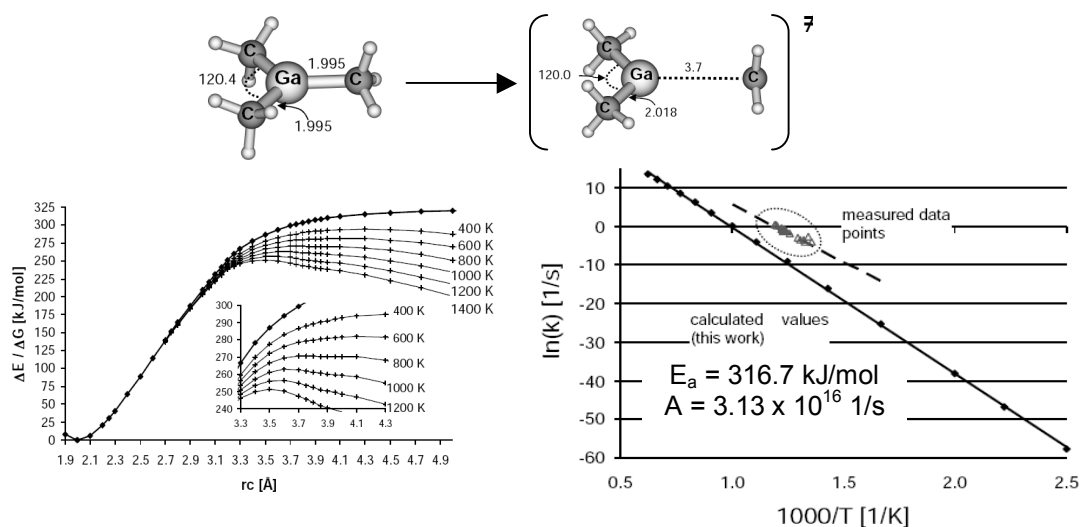
Tel. ++49 (0)234 32 24166 Fax. ++49 (0)234 32 14174

email: rochus.schmid@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.rub.de/aci2/schmid/>

R. Schmid, D. Basting, *Journal of Physical Chemistry A* **2005**, *109*, 2623-2630. Gas Phase Chemistry in Gallium Nitride CVD: Theoretical Determination of the Arrhenius Parameters for the First Ga-C Bond Homolysis of Trimethylgallium.

Bei der technischen Abscheidung von epitaktischen Gallium-Nitrid Filmen wird meist von Trimethylgallium und Ammoniak ausgegangen, wobei die pyrolytische Zersetzung des Galliumalkyls von besonderer Bedeutung ist. Alle in CFD-Simulationen verwendeten Mechanismen benutzen für diesen Schritt die experimentellen kinetischen Daten von Jacko und Price von 1963. Neuere Messungen mit dem Homologen InMe_3 zeigen, dass in einem Heisswand-Reaktor durchgeführten Messungen durch autokatalytische Wandeffekte deutlich erhöhte effektive Ratenkonstanten ergeben. Wir haben deshalb mittels Variationeller Übergangszustands-Theorie (VTST) die temperaturabhängigen Ratenkonstanten der ersten Ga-C Homolyse rein theoretisch mittels *ab initio* Methoden errechnet. Die Reaktionsenergie wurde mit korrelierten wellenfunktionsbasierten Methoden bestimmt, wohingegen die finiten Temperatureffekte (Entropie) durch Zustandssummen auf der Basis von Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen berechnet wurden. Die erhaltenen Arrhenius-Parameter sollten für die Modellierung der rein homogenen Gasphasen-Pyrolyse verwendet werden.



For the industrial production of epitaxial gallium-nitride films trimethylgallium and ammonia are generally employed as precursors. The pyrolytic decomposition of the gallium alkyl is of prime importance in this case. All chemical mechanisms utilized in CFD process simulations use for this step the experimental kinetic data determined by Jacko and Price in 1963. New measurements of the homologue InMe_3 revealed, however, that rate constants determined in hot wall reactors are affected by autocatalytic wall effects, leading to increased effective rate constants. We have therefore used Variational Transition State Theory (VTST) to determine the temperature dependent rate constants of the first Ga-C bond homolysis purely by theoretical *ab initio* methods. The reaction energy was calculated by correlated wave function methods, whereas the finite temperature effects (entropy) were determined from partition functions based on density functional theory type calculations. These Arrhenius parameters should be used for the modeling of the pure homolytic gas phase pyrolysis reaction.

Anjana Devi

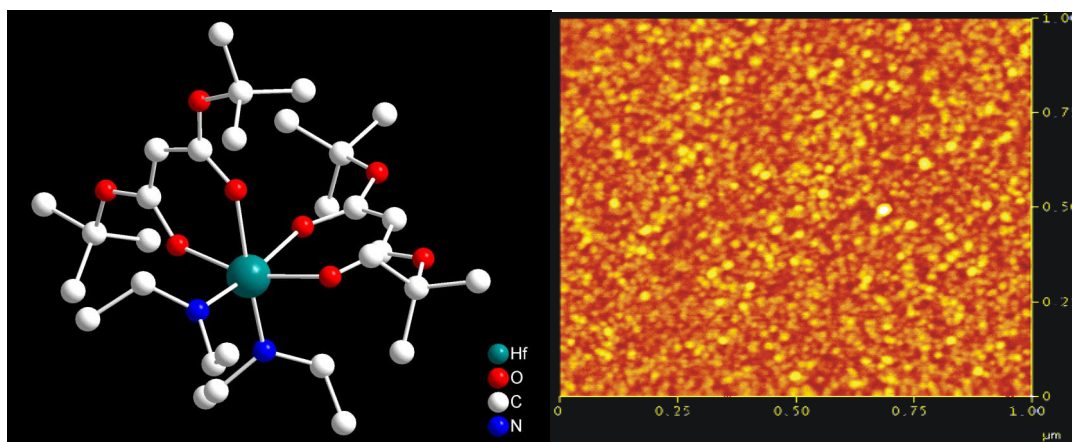
AG Chemie Anorganischer Materialien; Lehrstuhl für Anorganische Chemie II,
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: anjana.devi@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/acii2>

A. Devi, R. Bhakta and A. Milanov, Metalorganic precursors for CVD and related techniques (ALD); *German Patent*: DE 10 2005 030 9151 and *US Patents*: US 60/696,072, US 60/730,906 – (2005).

HfO₂ ist wegen seiner hohen dielektrischen Konstante ein sehr vielversprechendes Material für dielektrische Schichten in komplementären metalloxidischen Halbleiterkomponenten. Das Konzept, Malonate als Chelat-Liganden in Kombination mit Metallamiden von Hf einzuführen, hat eine neue Klasse von Precursoren hervorgebracht, die im Vergleich zum Vorgänger Hf Dialkylamid (i) stabil ist, (ii) verdampfbar ist und dabei adäquate thermische Eigenschaften für CVD und verwandte Techniken (ALD) besitzt und (iii) sich bei niedrigen Temperaturen zersetzt und dadurch die Abscheidung von HfO₂ bei reduzierten Substrat-Temperaturen ermöglicht. Abscheidungen mit dem neuartigen monomeren Hf-Komplex, nämlich Hafniumbis(diethylamid)-bis(di-tert-butylmalonat) [Hf(NEt₂(dbml)₂], in Butylacetat-Lösung resultierte in homogenen HfO₂ Schichten über 6" Wafern mit reproduzierbaren Schichtqualitäten, die für mikroelektronische Bauteile geeignet sind. Die Oberflächenmorphologie der HfO₂ Schichten auf SiO_x/Si Substraten zeigt eine gleichmäßige Verteilung von Feinkörnern bei einer gemittelten Rautiefe von ungefähr 0,57 nm.



HfO₂ is one of the most promising materials for dielectric layers in complementary metal-oxide semiconductor devices owing to its high dielectric constant. The concept of introducing malonates as chelating ligands in combination with metal amides of Hf has yielded a new class of precursors which is (i) stable compared to the parent Hf dialkyl amide, (ii) volatile and possessing appropriate thermal properties for CVD and related techniques (ALD) and (iii) decompose at low temperatures enabling deposition of HfO₂ at reduced substrate temperatures. Depositions with the novel monomeric complex of Hf namely hafnium bis(diethylamide)-bis(di-tert-butylmalonate) [Hf(NEt₂)₂(dbml)₂] dissolved in butyl acetate resulted in homogeneous HfO₂ films over 6" wafers with reproducible device quality film properties. The surface morphology of the HfO₂ films on SiO_x/Si substrates reveals a uniform distribution of fine-grains with the average surface roughness of about 0.57 nm.

Sabine Müller

Bioorganische Chemie/Ribozyme; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

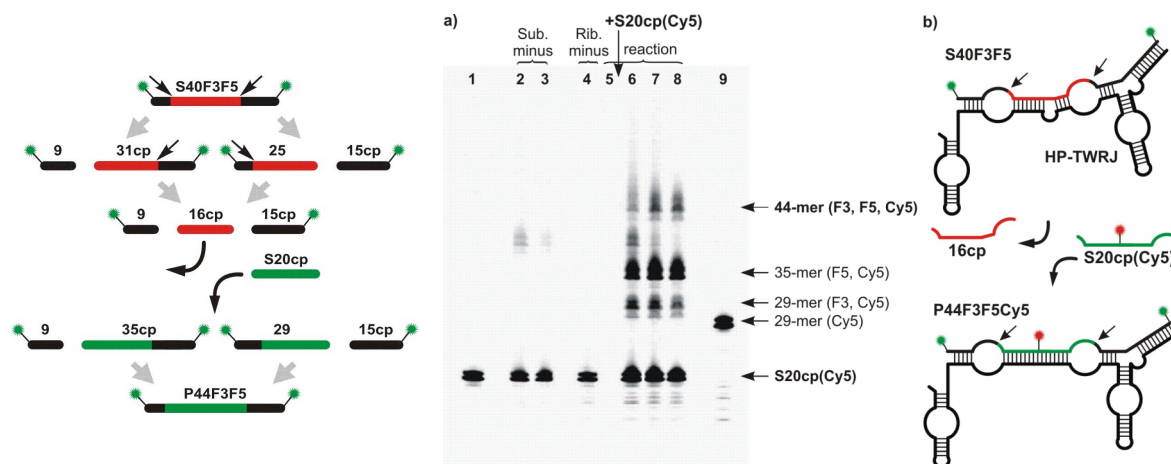
Tel.: ++49-(0)234-3227034; FAX: ++49-(0)234-3214783

email: sabine.w.mueller@ruhr-uni-bochum.de

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

S. A. Ivanov, S. Vauléon, S. Müller, *FEBS J.* **272** (2005) 4464-4474. Efficient RNA ligation by reverse-joined hairpin ribozymes and engineering of twin ribozymes consisting of conventional and reverse-joined hairpin ribozyme units.

In den letzten Jahren ist die Aufklärung des Mechanismus und der Struktur von katalytischen RNA-Molekülen weiter fortgeschritten. Ribozyme sind heute gut genug verstanden, sie in nützliche Werkzeuge zu verwandeln. Ein zentrales Thema unserer Forschung ist die Entwicklung von Twinribozymen für die orts-spezifische Variation von RNA-Sequenzen. Unsere Strategie beinhaltet die Kombination zweier Ribozymeinheiten in einem Molekül (Twinribozym). Wir haben ein revers verknüpftes Hairpinribozym entwickelt, das zusätzlich zur RNA-Spaltung auch die Ligation effizient katalysiert. Die beste Variante ligiert die passenden RNA-Substrate mit einer *single turnover* Geschwindigkeitskonstante von 1.1 min^{-1} und einer Endausbeute von 70 %. Ein revers verknüpftes Hairpinribozym wurde mit einem konventionellen Hairpinribozym zu einem Twinribozym kombiniert, das die Insertion von vier zusätzlichen Nucleotiden an einer vorher definierten Position einer Substrat-RNA bewirkt. Dieser Prozess entspricht der Korrektur einer kurzen Deletionsmutation auf RNA-Ebene; 17 % des Ausgangssubstrats wurden in das Insertionsprodukt überführt.



In recent years major progress has been made in elucidation of the mechanism and structure of catalytic RNA molecules and we are now beginning to understand ribozymes well enough to turn them into useful tools. Work in our laboratory has focused on the development of twin ribozymes for site-specific RNA sequence alteration. To this end we followed a strategy that relies on combination of two ribozyme units into one molecule (hence dubbed twin ribozyme). We have developed reverse-joined hairpin ribozymes that are structurally optimized and which in addition to cleavage catalyze efficient RNA ligation. The most efficient variant ligated its appropriate RNA substrate with a single turnover rate constant of 1.1 min^{-1} and a final yield of 70 %. We combined a reverse-joined hairpin ribozyme with a conventional hairpin ribozyme to create a twin ribozyme that mediates the insertion of four additional nucleotides into a pre-determined position of a substrate RNA, and thus mimics, at the level of RNA, the repair of a short deletion mutation; 17 % of the initial substrate was converted into the insertion product.

Wolfram Sander

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

Tel.: ++49-(0)234 32-24593; FAX: ++49-(0)234 32-14353

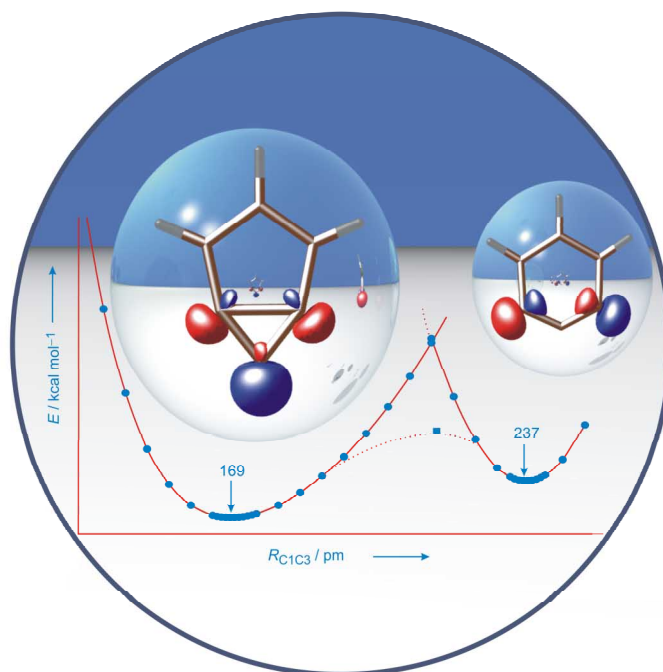
email: wolfram.sander@ruhr-uni-bochum.de

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

S. Venkataramani, M. Winkler, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2005), 6306 – 6311.

1,2,3-Tridehydrobenzene. Gemeinsam einsam: ein Molekül mit drei Einzelelektronen

Ein Molekül mit drei „ungepaarten“ Elektronen konnte bei extrem tiefen Temperaturen isoliert und untersucht werden. Dabei handelt es sich um ein Benzolmolekül, dem drei Wasserstoffatome entfernt wurden. Im Experiment zeigte sich, daß die theoretischen Vorhersagen über seine Eigenschaften teils falsch waren. Moleküle wie das hier vorgestellte mit mehreren ungepaarten Elektronen dienen dazu, das Phänomen der chemischen Bindung besser zu verstehen und theoretische Modelle zu verbessern. Sie stellen sowohl für die experimentelle Chemie als auch für die Theorie eine besondere Herausforderung dar. Und sie dienen als Vorlage zum Design von organischen magnetischen Materialien, nach denen in vielen Laboratorien weltweit intensiv geforscht wird.



Tridehydrobenzenes are interesting triradicals with close lying low-spin (doublet) and high-spin (quartet) electronic states. Although these species have been subject to theoretical and sophisticated mass spectrometric studies, none of the three isomers had been isolated before. The experiments described in this paper indicate that 1,2,3-tridehydrobenzene could be isolated and spectroscopically characterized in cryogenic neon matrices. The IR spectra are in accordance with a 2A_1 ground state (in contrast to previous theoretical prediction), whereas the 2B_2 excited state is calculated to be 1 – 2 kcal/mol higher in energy and thus not observed under these conditions.

Götz Bucher

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

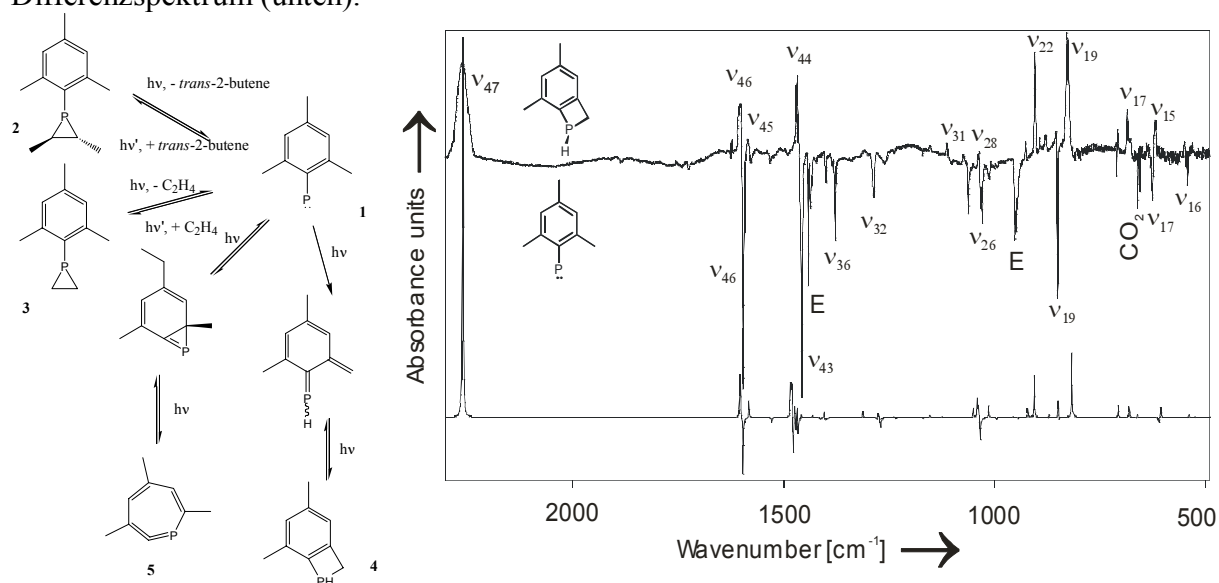
Tel.: ++49-(0)234-3224421; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: Goetz.Bucher@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.orch.ruhr-uni-bochum.de/bucher/bucher.html>

G. Bucher, M. L. G. Borst, A. W. Ehlers, K. Lammertsma, S. Ceola, M. Huber, D. Grote, W. Sander, *Angew. Chem.* **117** (2005), 3353-3357; *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005), 3289-3293. Infrared-, UV-Vis-, and W-Band ESR-Spectroscopic Characterization and Photochemistry of Triplet Mesityl Phosphinidene.

Im Gegensatz zu den eng verwandten Nitrenen R-N: sind die Phosphinidene R-P: bislang nur unzulänglich untersucht. Wir haben nun das Triplett-Mesitylphosphiniden **1** durch Photolyse von zwei Phosphirane **2** und **3** erzeugt und mittels Matrixisolation (IR-, UV/Vis- und W-Band ESR-Detektion) und Laser-Blitzlichtphotolyse untersucht. In einer sekundären photochemischen Reaktion lagert **1** durch eine Wasserstoffverschiebung in ein Dihydrobenzophosphet **4** um. Nach UV/Vis-spektroskopischen Messungen wird zusätzlich in sehr geringer Menge ein Didehydrophosphepin **5** gebildet. Die Reaktivität von **1** wurde mittels Laser-Blitzlichtphotolyse untersucht. Es zeigte sich hierbei, dass **1** eine mittlere Reaktivität gegenüber reaktiven π -Systemen wie Tetramethylallen aufweist, jedoch nicht messbar mit einfachen Alkenen wie 1-Hexen reagiert. Die Abbildung rechts zeigt das experimentelle IR-Differenzspektrum der Reaktion **1** $\rightarrow$ **4** (oben) im Vergleich zum berechneten Differenzspektrum (unten).



In contrast to the closely related nitrenes R-N:, phosphinidenes R-P: have been barely investigated so far. We have now generated triplet mesityl phosphinidene **1** by photolysis of two phosphiranes **2** and **3** and have characterized it by matrix isolation spectroscopy (IR-, UV/Vis-, and W-band ESR spectroscopy) and Laser Flash Photolysis. In a secondary photochemical reaction, **1** rearranges to a dihydrobenzophosphete **4** via hydrogen shift. According to UV/Vis experiments, didehydrophosphepine **5** is also formed in trace amounts. The reactivity of **1** was investigated by Laser Flash Photolysis. According to our experiments, **1** shows medium reactivity towards reactive π -systems like tetramethylallene, but it does not react with simple alkenes like 1-hexene. The figure shown on the right displays the experimental IR difference spectrum of the reaction **1** $\rightarrow$ **4** (top) in comparison with the calculated difference spectrum (bottom).

Holger F. Bettinger

Lehrstuhl für Organische Chemie 2; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

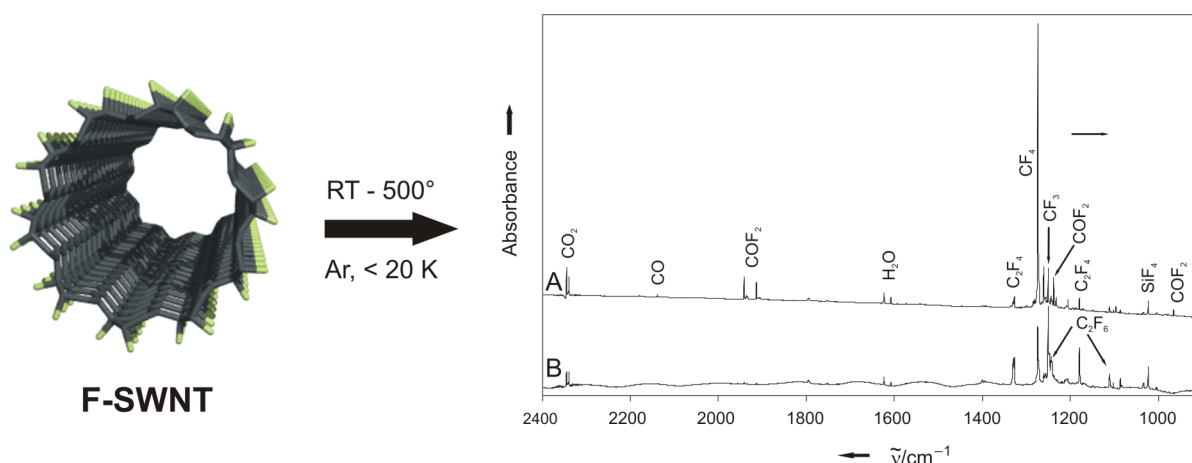
Tel.: ++49-(0)234-3224259; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: Holger.Bettinger@ruhr-uni-bochum.de

<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/Holger.Bettinger>

H.F. Bettinger, H. Peng *J. Phys. Chem. B.* **109** (2005) 23218-23224. Thermolysis of Single-Walled Carbon Nanotubes: Identification of Gaseous Decomposition Products by Matrix Isolation Infrared Spectroscopy.

The thermal decomposition of fluorinated single-walled carbon nanotubes (F-SWNTs), known to result in pristine SWNTs, has been investigated by freezing the gaseous products formed at temperatures between 50 and 500 °C under high vacuum in an argon matrix at 10–20 K and analyzing the trapped species by IR spectroscopy. The major products of F-SWNT decomposition are carbonyl fluoride (COF_2) below 300 °C and CF_4 above 300 °C (trace A). For comparison, graphite fluoride is stable thermally up to 300 °C under these conditions, and the major gas-phase species at temperatures below 500 °C are CF_4 and the CF_3 radical (trace B). F-SWNTs are thermally less stable than graphite fluoride, and etching of the nanotubes is observed at lower thermolysis temperatures.



Die thermische Zersetzung von fluorierten einwandigen Kohlenstoffnanoröhren (F-SWNT) zwischen 50 und 500 °C, die bekanntermaßen zur Bildung reiner SWNT führt, wurde mit Hilfe der IR-Spektroskopie durch Ausfrieren der Gasphasenprodukte in einer Argonmatrix bei 10–20 K untersucht. Die Hauptprodukte der Thermolyse sind Carbonylfluorid (COF_2) unterhalb und CF_4 oberhalb von 300 °C (Spektrum A). Graphitfluorid (CF_n) ist unter identischen Bedingungen bis 300 °C thermisch stabil und zersetzt sich unterhalb von 500 °C hauptsächlich in CF_4 und das CF_3 Radikal (Spektrum B). Die F-SWNT sind thermisch weniger stabil als Graphitfluorid, Ätzung des Kohlenstoffnanoröhrengerüsts wird bei relativ geringen Thermolysetemperaturen beobachtet.

Gerald Dyker

Org. Chem.-Organische Synthese und Katalyse;

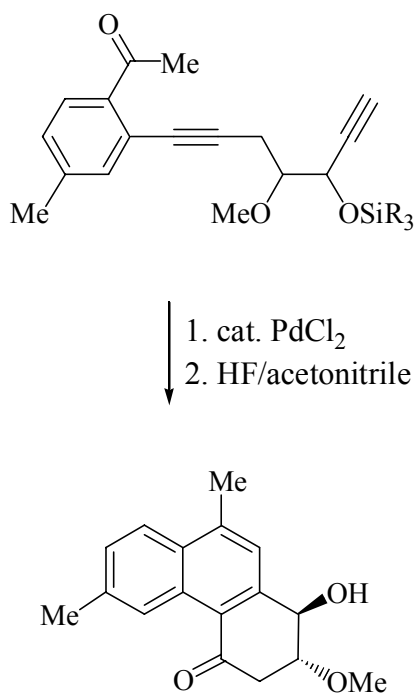
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

G. Dyker, D. Hildebrandt, *J. Org. Chem.* **70** (2005), 6093-6096. Total Synthesis of Heliophenanthrone.

Heliophenanthrone ist ein Dihydrophenanthren, das im Jahre 2003 aus *Heliotropium ovalifolium* isoliert worden ist, einer krautartigen Pflanze, die für ihre Toxizität für Rinder, Schafe und Pferde berüchtigt ist. Andererseits hat diese Pflanze auch eine Reihe von Leitstrukturen für antibakterielle und fungizide Verbindungen geliefert. Uns gelang die rationelle Totalsynthese von racemischem Heliophenanthron mit einer konvergenten Synthesestrategie, die einen Platin-katalysierten Dominoprozess mit einer Cycloaddition an einem Isobenzopyrylium-Intermediat als Schlüsselschritt ausnutzt.



Heliophenanthrone is a dihydrophenanthrene derivative which was isolated from *Heliotropium ovalifolium* in 2003. This herbaceous plant is infamous for its toxicity for cattle and sheep, but on the other hand has delivered some lead compounds for antibacterial and antifungal compounds. We succeeded in the total synthesis of *rac*-heliophenanthrone by a convergent approach, making use of a platinum catalyzed domino process with an intramolecular cycloaddition at an isobenzopyrylium intermediate as key step.

Christof Wöll

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

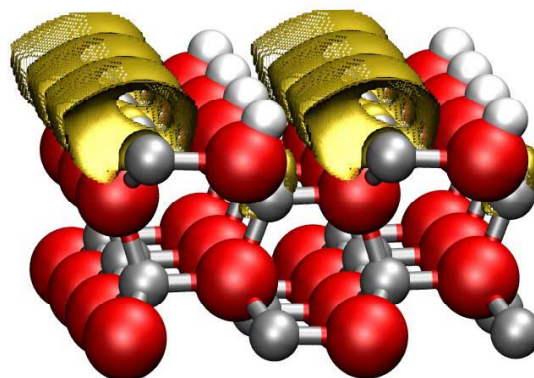
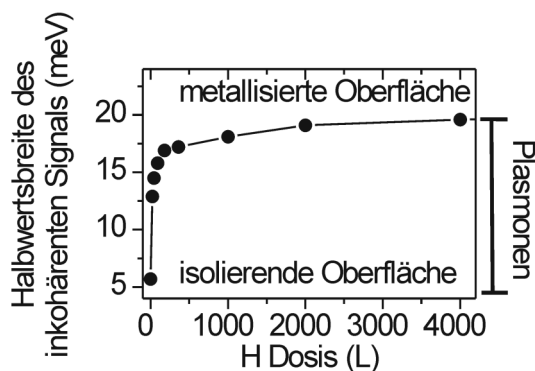
Tel.: ++49-(0)234-3225529; FAX: ++49-(0)234-3214182

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

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

Y. Wang, B. Meyer, X. Yin, M. Kunat, D. Langenberg, F. Traeger, A. Birkner, Ch. Wöll
Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 266104-1-4. Hydrogen Induced Metallicity on the ZnO(10 $\bar{1}$ 0) surface.

Für die chemischen Eigenschaften von Oxidoberflächen ist die Anwesenheit von Wasserstoffatomen (z.B. in Form von Hydroxyspezies, -OH) von entscheidender Bedeutung. Überraschenderweise zeigt sich aber auch ein großer Einfluß auf die elektrische Leitfähigkeit. Wenn bei tiefen Temperaturen H-Atome auf der gemischtterminierten ZnO(10 $\bar{1}$ 0)-Oberfläche adsorbiert werden, zeigt die Elektronenenergieverlustspektroskopie (HREELS) wie erwartet das Auftreten von ZnH und OH-Schwingungen. Bei Erwärmen der Oberfläche verschwindet dann aber das ZnH-Signal und die Energiehalbwertsbreite der inkohärent gestreuten Elektronen wird unerwarteter Weise sehr groß. Mittels der Heliumatombeugung konnte nachgewiesen werden, dass diese Änderungen mit einem strukturellen Phasenübergang korrelieren. Gleichzeitig weisen Ergebnisse aus der Rastertunnelmikroskopie (STM) darauf hin, dass die elektrische Leitfähigkeit stark zunimmt. Am Lehrstuhl für Theoretische Chemie durchgeführte Rechnungen zeigen, dass oberhalb von 300 K die Zn-Atome wasserstofffrei sind und nur teilweise besetzte Oberflächenzustände erzeugen, die die ZnO-Oberfläche metallisch machen (Bild rechts).



The adsorption of hydrogen atoms on oxide surfaces has a strong impact on their chemical properties. Surprisingly, also the electrical conductivity can be affected. If the mixed-terminated ZnO(10 $\bar{1}$ 0)-surface is exposed to H-atoms at low temperatures, results from electron energy loss spectroscopy (HREELS) reveal, as expected, ZnH and OH-vibrations. At higher temperatures the ZnH-vibrations disappears and, unexpectedly, the energetic width of the incoherently scattered electrons becomes significantly larger. Results from He-atom scattering demonstrate that these changes correlate with a structural phase transition. Investigations with a scanning tunneling microscope (STM) reveal a strong increase in the electrical conductivity. Calculations carried out at the chair for Theoretical Chemistry reveal that at 300K the Zn-atoms have no H-atom attached to them and give rise to partially filled electronic states, thus rendering the oxide surface metallic.

Gregor Witte

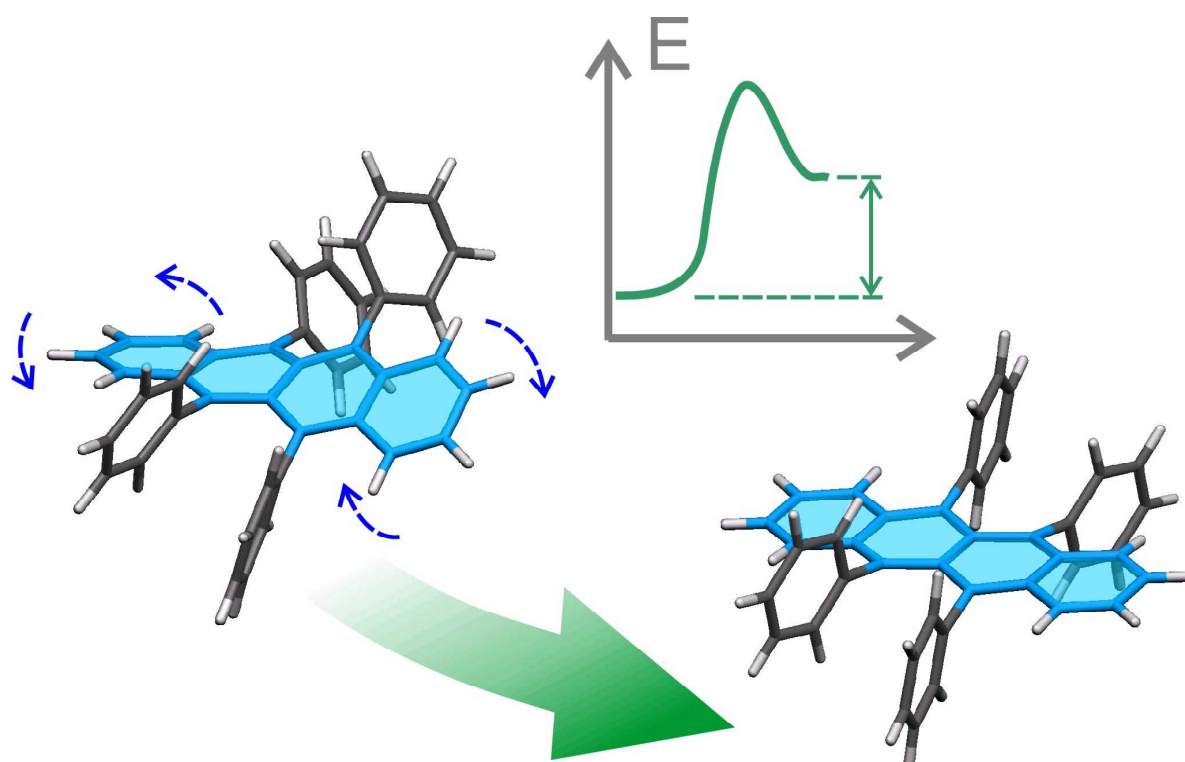
Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Witte@pc.rub.de; <http://www.pc.rub.de>

D. Käfer, L. Ruppel, G. Witte and Ch. Wöll, *Physical Review Letters* **95** (2005) 166602. The role of molecular conformations in thin film growth: Why soft matter can be special

Aufgrund ihrer elektronischen Eigenschaften wird der Einsatz molekularer Halbleiter für zukünftige organische Elektronik und das Wachstum geordneter Molekülfilme gegenwärtig intensiv untersucht. Mit Hilfe von Röntgenabsorptions-Spektroskopie (NEXAFS) Experimenten konnte am Beispiel des organischen Halbleiters Rubren ($C_{42}H_{28}$) gezeigt werden, dass ein epitaktisches Wachstum kristalliner Molekülfilme stark gehindert ist, wenn sich die Konformation des freien Moleküls substantiell von der in seiner kristallinen Struktur unterscheidet.



A systematic analysis of the growth of rubrene ($C_{42}H_{28}$), an organic molecule which currently attracts considerable attention with regard to its application in molecular electronics, is carried out by using x-ray absorption spectroscopy (NEXAFS) and thermal desorption spectroscopy. The results allow to unravel a fundamental mechanism which effectively limits organic epitaxy for a large class of organic molecules. If the structure of the free molecule differs substantially from that of the corresponding molecular structure in the bulk the crystallization is severely hampered.

Christian Herrmann

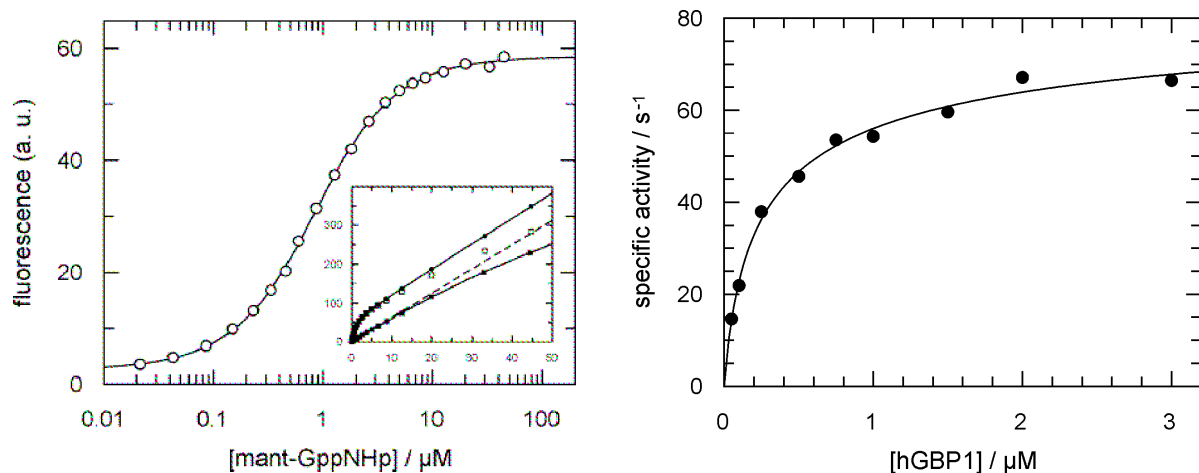
Physikalische Chemie 1; AG Protein-Interaktionen; Ruhr-Uni Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224173; FAX: ++49-(0)234-3214785

email: chr.herrmann@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/proin>

S. Kunzelmann, G.J.K. Praefcke, C. Herrmann, *Methods in Enzymology* **404** (2005) 512-527. Nucleotide Binding and Self-Stimulated GTPase Activity of Human Guanylate-Binding Protein 1 (hGBP1).

Die Synthese von humanem Guanylat-bindenden Protein 1 (hGBP1) wird im menschlichen Organismus durch Interferon-gamma induziert. Es spielt eine Rolle bei der Abwehr von Viren und bei der Neubildung von Blutgefäßen nach noch nicht verstandenen Mechanismen. In dieser Arbeit werden grundlegende, biochemische Eigenschaften dieses Enzyms charakterisiert, nämlich Dynamik und Affinität der Nukleotidbindung, die GTP-abhängige Assemblierung zu Dimeren und Tetrameren sowie die dadurch stimulierte GTPase-Aktivität. Mit Hilfe von Fluoreszenz Resonanz Energie Transfer (FRET) gelingt der empfindliche Nachweis der Protein/Nukleotid-Interaktion und er kann für kinetische und Gleichgewichts-Messungen (linkes Bild) ausgenutzt werden. Durch Bestimmung der Konzentrations-Abhängigkeit der GTPase Aktivität (rechtes Bild) konnte gezeigt werden, dass die Homo- Dimerisierung des Enzyms im submikromolaren Bereich stattfindet und damit von physiologischer Bedeutung ist. Zusammen mit strukturellen, noch unveröffentlichten Ergebnissen erlauben diese Daten einen tiefen Einblick in den molekularen Mechanismus von hGBP1.



The synthesis of human Guanylate-Binding Protein 1 (hGBP1) is induced by interferon-gamma and its biological function is related to antiviral activity and regulation of proliferation. Similar to other large GTPases like dynamin, hGBP1 shows higher specific GTP hydrolysis activity with increasing concentration of the protein. This is based on nucleotide-dependent self-association of hGBP1 which leads to self-stimulation of its GTPase activity. We describe the characterisation of the basic biochemical properties of hGBP1. Essentially, the biological activity of a GTPase is controlled by the type of nucleotide bound (figure on the left: titration using fluorescence resonance energy transfer between nucleotide and protein). Therefore, nucleotide binding is quantified in terms of affinity and dynamics since both of these aspects are important for the occurrence of hGBP1 bound to the one or the other nucleotide. In addition, we analyse the self-stimulated GTPase activity and show how to extract the hGBP1 homodimer dissociation constant from these data (figure on the right). Finally, the nucleotide-dependent formation of hGBP1 dimers and tetramers is shown. These biochemical characteristics may help to further understand the biological function of hGBP1.

Martina Havenith-Newen

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

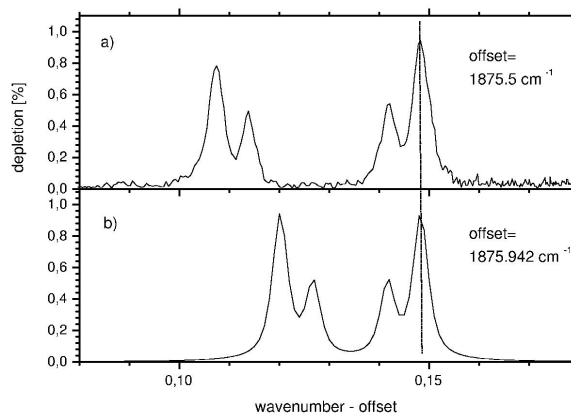
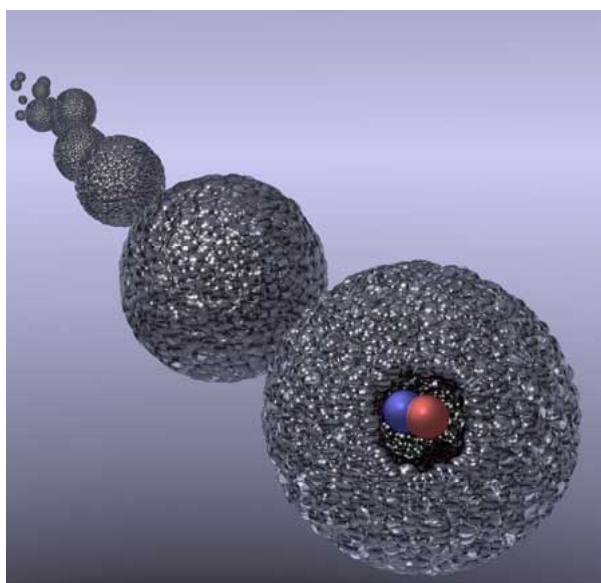
Tel.: ++49-(0)234-3224249; Fax: ++49-(0)234-3214183

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

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

K. von Haeften, A. Metzelthin, S. Rudolph, V. Staemmler, M. Havenith, *Phys. Rev. Lett.* **95**, (2005) 21531. High resolution spectroscopy of NO in helium droplets: A prototype for open shell molecular interactions in a quantum solvent

In einer Heliumclusteranlage werden supraflüssige Helium-Nanotröpfchen mit einer Temperatur von etwa 0,4 K erzeugt, in die Moleküle eingelagert werden können. Die Substanz selbst wird dabei ebenfalls auf 0,4 K abgekühlt, weil bei jedem Einfang einzelne Heliumatome des Tröpfchens verdampfen und die Energie des eingelagerten Moleküls abgeben. Das eingelagerte Molekül friert dabei nicht ein, sondern kann sich frei im Heliumtropfen bewegen. Unserer Gruppe gelang es, diese Technik auch für die störungsfreie Beobachtung von Radikalen zu nutzen. Dies ermöglicht die Untersuchung von ultrakalten, kontrollierten Reaktionen in diesem nanometergroßen Minilabor. Die gemessenen Spektren ähneln in verblüffender Weise den bereits bekannten Spektren von NO in der Gasphase. Selbst feinste Unterstrukturen, wie die Hyperfeinstruktur einzelner Vibrations-Rotations-Übergänge und das Λ -doubling können aufgelöst werden. Diese Messungen liefern nicht nur neue Informationen über die Quantennatur der Helium-Nanotröpfchen, sie ebnen gleichzeitig den Weg für eine kontrollierte Untersuchung von chemischen Reaktionen des Stickstoffmonoxids mit Reaktionspartnern.



IR-spectra of
a) NO in helium droplets and
b) NO gas phase

We have generated superfluid helium nano droplets at a temperature of 0,4 K. These droplets can be doped with molecules, which thereby are cooled down to 0,4 K due to evaporative cooling of He atoms. The molecule can freely rotate in the superfluid environment which can be considered as a “soft” matrix. We have succeeded in doping with NO, a radical. The spectra resemble the spectra of NO in the gas phase. We were able to show the high resolution of this method which allows us to even resolve hyperfine structure and the Λ -doubling. This technique enables the study of controlled reactions in an ultracold nanolab.

Hermann Weingärtner

Physikalische Chemie II; Physikalische Chemie der Flüssigkeiten

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

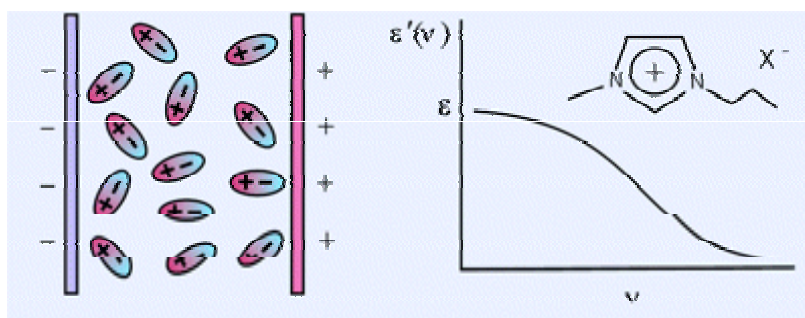
Tel.: ++49-(0)234-3225535; FAX: ++49-(0)234-3214293

email: hermann.weingaertner@rub.de

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

C. wakai, A. Oleinikova, M. Ott, H. Weingärtner, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 17028-17030.
How Polar are Ionic Liquids? Determination of the Static Dielectric Constant of an Imidazolium-based Ionic Liquid by Microwave Dielectric Spectroscopy.

Some imidazolium-based room-temperature ionic liquids are of much current interest as environmentally benign solvents with properties that can be tuned by variation of the cations and anions. When selecting such solvents for a given application, an important criterion is the polarity, as reflected by the static dielectric constant. Due to the intrinsic electrical conductance of ionic liquids, the dielectric constant cannot be determined by conventional techniques. In a pilot study, we have used dielectric spectroscopy in the microwave regime to determine the complex dielectric function of imidazolium-based ionic liquids, from which the static dielectric constant can be determined by zero-frequency extrapolation. The results classify the ionic liquids as moderately polar solvents with static dielectric constants between about 10 and 15. The results indicate markedly lower polarities than previously. This observation will have consequences for many future modelings of solvent properties.



Einige auf Imidazoliumkationen basierende, bei Raumtemperatur flüssige Salze ("Ionische Flüssigkeiten") sind als umweltfreundliche Lösungsmittel von Interesse, deren Eigenschaften durch Variation der Kationen und Anionen auf spezifische Anwendungen eingestellt werden können. Um Lösungsmittel für vorgegebene Anwendungen auszuwählen, wird üblicherweise die statische Dielektrizitätskonstante als Kriterium für die Polarität herangezogen. Aufgrund der hohen elektrischen Leitfähigkeit der geschmolzenen Salze kann diese nicht mit konventionellen Methoden bestimmt werden. Wir haben zum ersten Mal gezeigt, dass die statischen Dielektrizitätskonstanten dieser elektrisch leitenden Systeme über eine Nullfrequenzextrapolation der dielektrischen Permittivität im Mikrowellenbereich ermittelbar sind. Die Ergebnisse weisen Ionische Flüssigkeiten als mäßig polare Lösungsmittel mit dielektrischen Konstanten zwischen 10 und 15 aus. Diese Werte sind deutlich niedriger als bisher angenommen, was zu merklichen Konsequenzen für Modellierungen der Lösungsmiteleigenschaften führen sollte.

Gerhard M. Schneider

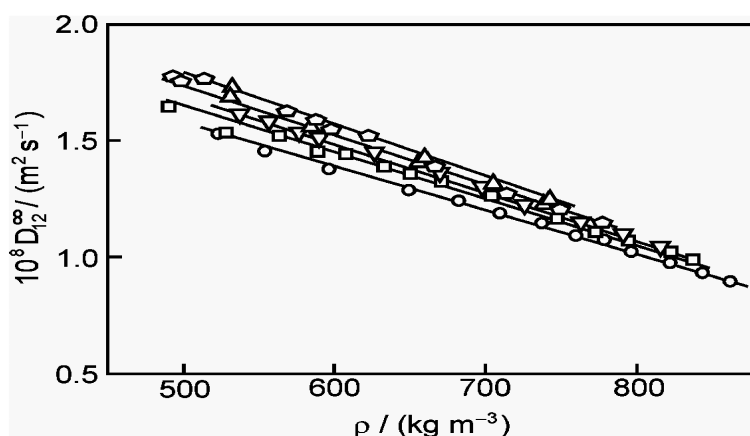
Lehrstuhl für Physikalische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224250; FAX: ++49-(0)234-3214293

email: gerhard.schneider@ruhr-uni-bochum.de

H. Weingärtner, U. Klask, G.M. Schneider *Z. Phys. Chem.* **219** (2005) 1261 – 1271. Solute Diffusion in Supercritical Solvents – Diffusion Coefficients D_{12}^{∞} and Diffusion – Viscosity Relationship for the Aromatic Model Solute Biphenyl in Carbon Dioxide.

Carbon dioxide is a major solvent in supercritical fluid technologies. For assessing mass transfer in a diversity of processes, for example in chromatographic columns or in technical plants for fluid extraction, the knowledge of the diffusion coefficients of solutes in CO₂ is mandatory. The temperature and density dependence of the mutual diffusion coefficient D_{12}^{∞} of biphenyl as a model substance at infinite dilution in supercritical carbon dioxide has been measured by the Taylor dispersion method at several temperatures from 309 K to 331 K and at pressures between about 8 MPa and 20 MPa, corresponding to densities from about 500 kg m⁻³ to 850 kg m⁻³. The observed diffusion coefficients are of the order of 10⁻⁸ m² s⁻¹. They decrease about linearly with increasing density and increase slightly with increasing temperature. The experimental data show a density and temperature dependence of the quantity $D_{12}^{\infty} \eta / T$, indicating a breakdown of the Stokes-Einstein relation.



Density dependence of the mutual diffusion coefficient D_{12}^{∞} of biphenyl at infinite dilution in supercritical CO₂ along isotherms at 309.1 K (circles), 314.0 K (squares), 318.4 K (triangles downward), 324.6 K (pentagons) and 330.6 K (triangles upward), respectively.

Kohlendioxid ist ein wichtiges Lösungsmittel für überkritische Fluidtechnologien. Für eine Vielzahl von Prozessen, z.B. in Chromatographiesäulen oder technischen Fluidextraktionsanlagen, ist die Kenntnis der Diffusionskoeffizienten von gelösten Stoffen in CO₂ unerlässlich. Die Temperatur-, Druck- und Dichteabhängigkeit des binären Diffusionskoeffizienten D_{12}^{∞} von Biphenyl als Modellschubstanz bei unendlicher Verdünnung in überkritischem Kohlendioxid wurde mit der Taylor-Dispersionsmethode bei mehreren Temperaturen von 309 K bis 331 K und bei Drücken zwischen ca. 8 MPa und 20 MPa gemessen, entsprechend Dichten von ca. 500 kg m⁻³ bis 850 kg m⁻³. Die experimentellen binären Diffusionskoeffizienten sind von der Größenordnung 10⁻⁸ m² s⁻¹. Sie nehmen etwa linear mit steigender Dichte ab und steigen mit steigender Temperatur leicht an. Die experimentellen Ergebnisse zeigen eine Dichte- und Temperaturabhängigkeit der Größe $D_{12}^{\infty} \eta / T$ und weisen damit auf ein Versagen der Stokes-Einstein-Beziehung hin.

William S. Sheldrick

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

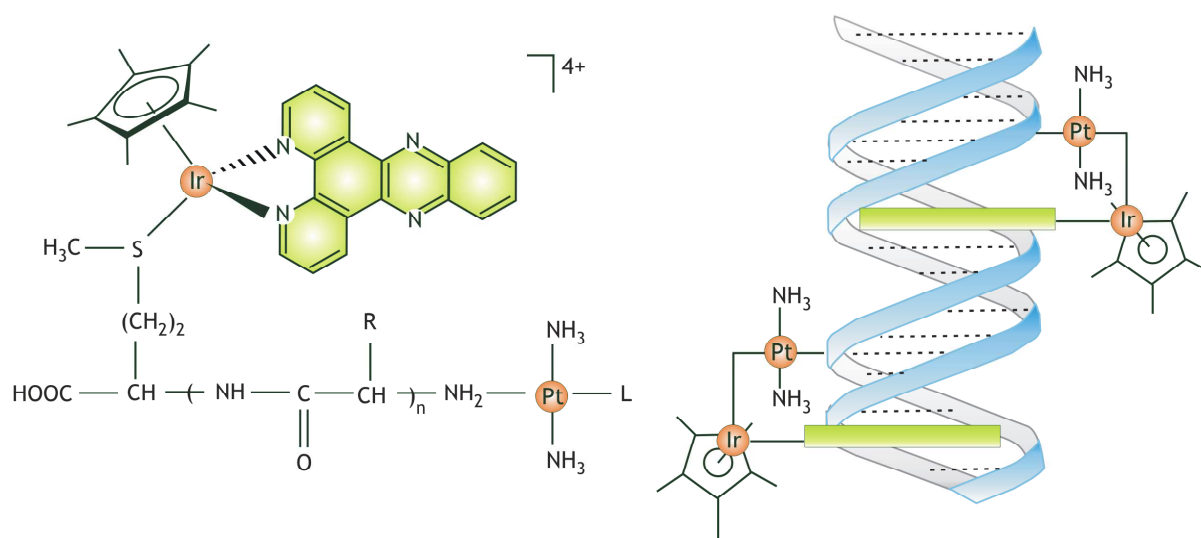
Tel: ++49(0)234-3224192; Fax: ++49-(0)234-3214420

email: william.sheldrick@ruhr-uni-bochum.de

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

S. Gencaslan, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2005) 3840–3849. Bifunctional bio-organometallic iridium(III)-platinum(II) complexes incorporating both intercalative and covalent DNA binding capabilities

Mehrkernige Platinkomplexe repräsentieren eine neue Klasse von metallhaltigen Antitumorverbindungen. In einer modifizierten Strategie werden zwei Metallzentren mit konkurrierenden DNA-Bindungseigenschaften über starre oder flexible Brückenliganden miteinander verknüpft. Wir haben nun neuartige Iridium(III)-Platin(II)-Komplexen des letzteren Typs entwickelt, die sowohl ein Metallointercalator $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ir}(\text{dppz})]^{2+}$, als auch eine $\text{trans-}[\text{PtL}_2\text{L}']^{2+}$ -Einheit ($\text{L} = \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}$; $\text{L}' = \text{DMF}, \text{NH}_3$) enthalten. Die einzelnen Fragmente sind über Oligopeptide unterschiedlicher Kettenlänge miteinander verbrückt. Spektroskopische Bindungsstudien weisen darauf hin, dass sowohl die Kettenlänge des Peptids als auch die Position des labilen Pt(II)-Substituenten einen wichtigen Einfluss auf die Intercalation des aromatischen Liganden und auf die durch simultane Pt(II)-Koordination verursachte Verzerrung der B-Helix ausüben.



Multinuclear platinum complexes represent a new class of metal-based anticancer agents. A modified approach to this polynuclear concept involves the design of bifunctional compounds with two distinct DNA binding capabilities connected by a rigid or flexible bridging moiety. We have now developed a series of novel iridium(III)-platinum(II) complexes of the latter type containing a metallointercalator $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ir}(\text{dppz})]^{2+}$ tethered to a $\text{trans-}[\text{PtL}_2\text{L}']^{2+}$ -Einheit ($\text{L} = \text{NH}_3, \text{H}_2\text{O}$; $\text{L}' = \text{DMF}, \text{NH}_3$) fragment by oligopeptides with varying numbers of amino acid residues. Spectroscopic binding studies indicate that both the peptide chain length and the site of the labile Pt(II) substituent play important roles in determining the degree of intercalation of the dppz ligand and the extent of B-helix distortion caused by simultaneous Pt(II) coordination of DNA nucleobases.

Wolfgang Schuhmann

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

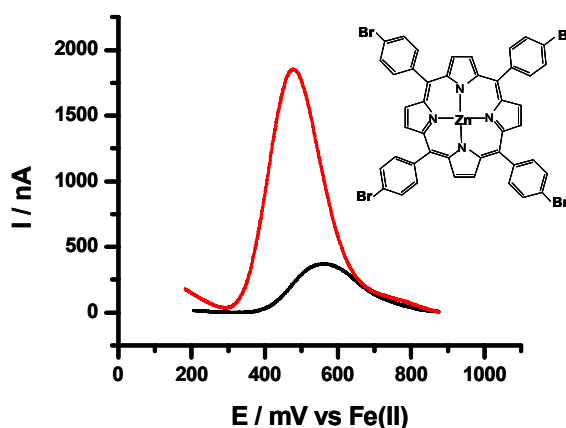
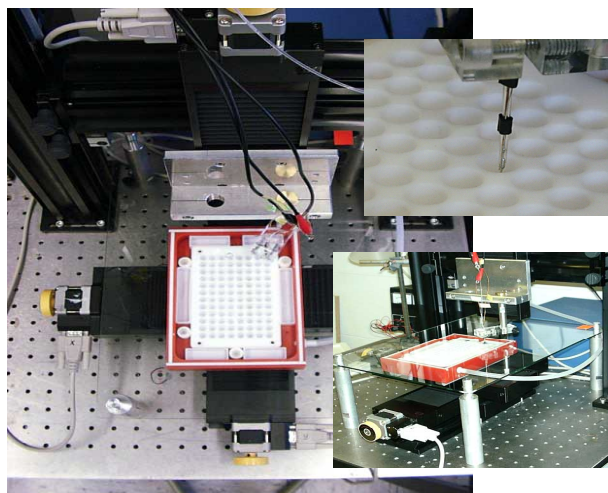
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683

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

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

V. Ryabova, A. Schulte, T. Erichsen, W. Schuhmann *The Analyst* **130** (2005) 1245-1252. Combinatorial screening of a library of metalloporphyrins for electrochemical nitric oxide sensors.

Eine Bibliothek von 83 Metallporphyrinen mit unterschiedlichen Substitutionsmustern in der Mesophenylposition und Variationen im Zentralmetallion wurden mittels einer parallelen Synthesestrategie in kleinen Mengen synthetisiert. Mit Hilfe eines speziell angepassten elektrochemischen Robotiksystems mit integrierten 96-Well Mikrotiterplatten und einem in x-, y-, und z-Richtung mit hoher Präzision positionierbaren Elektrodenbündel konnten die Metallporphyrine in einer automatischen Sequenz auf einer Mikroelektrode durch Dipcoating abgeschieden und hinsichtlich ihrer katalytischen Aktivität zur Oxidation von NO untersucht werden. Das Screening der Substanzbibliothek erlaubte erste Aussagen zum Einfluss der Substituenten auf die elektrokatalytischen Eigenschaften der Porphyrin-modifizierten NO-Sensoren und der Qualität der untersuchten Katalysatormaterialien. Im Vergleich zu manuell durchgeführten Untersuchungen zur Evaluierung von Sensoren hat die vorgeschlagene automatische Strategie zur Sensorfertigung und Untersuchung Vorteile hinsichtlich der Geschwindigkeit und insbesondere der Reproduzierbarkeit.



A library of 83 metalloporphyrins with varying substitution pattern at the meso position of the porphyrins and altering central metal ions in the core region has been synthesized in small quantities using a parallel synthesis strategy. By means of a specially designed electrochemical robotic device integrating a 96-well microtitre plate and an easily movable assembly of working, counter and reference electrodes, the different porphyrins were automatically applied in sequence to an in-well electrochemical preparation and testing of NO sensors. Screening the entire compound collection suggested initial considerations concerning the influence of varied functionalities of the metalloporphyrins on their electrocatalytic properties for the oxidation of NO and helped identifying the quality of the investigated catalyst candidates. As compared to manually performed quality tests, the proposed strategy of automation has advantages in convenience, rapidity and especially reproducibility avoiding any inaccuracies introduced by manually performing all steps of the complex sensor formation and testing sequence.

Peter Zinn

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

Tel.: ++49-(0)234-3224193; FAX: ++49-(0)234-3214420

email: Zinn@ruhr-uni-bochum.de

P. Zinn, *J. Chem. Inf. Model.* **45** (2005) 880-887. Adaptive Multicomponent Analysis by Genetic Algorithms.

Genetische Algorithmen (GA) liefern robuste Ergebnisse bezüglich eines festgelegten Selektionskriteriums. Als typisches Beispiel wurden Mehrkomponentenanalysen simuliert und die Ergebnisse in unterschiedlichen Simulationssituationen untersucht. Der Vergleich der genetischen Lösungssuche mit klassischen algebraischen Lösungsverfahren liefert weitgehende Übereinstimmung hinsichtlich der erhaltenen Analysenwerte, z. B. Konzentrationen. Wird dagegen die Reproduktion der Messwerte untersucht, z. B. Spektren, ergibt sich ein anderes Bild. Die Spektren der Mischungen (Individuen des GA) werden durch genetische Suche autoadaptiv an das Selektionskriterium (spektrale Kongruenz mit einem vorgegebenen Spektrum) angepasst. Der GA liefert stets optimale Anpassungen an das gewünschte Spektrum und verhält sich robust gegenüber einer Änderung der Konfiguration (Simulationsparameter) des Mehrkomponentensystems. Die Simulationsparameter wie Linearität der Messung, Anzahl und Art der Mischungskomponenten sowie Selektivität innerhalb der Mischungen können praktisch beliebig variiert werden. Dabei werden häufig Imitate mit optimalem Spektrum aber unterschiedlicher Zusammensetzung beobachtet. Solche Imitate können als neue chemische Produkte mit vorgegebener (gewünschter) Eigenschaft interpretiert werden. Wegen des nichtlinearen Charakters der genetischen Suche lässt sich das Verfahren auf beliebige physikalische oder chemische Selektionskriterien (Eigenschaften) ausdehnen und von Mehrkomponentenanalysen prinzipiell auch auf Mehrkomponentenreaktionen ausdehnen.

Simulation Parameters				Results	
measurement linearity + linear/ - nonlinear	component number + known/ - unknown	quality of components + known/ - unknown	selectivity of components + high/ - low	quantity of components + accurate/ - false	spectral congruence + high
+	+	+	+	+	+
+	+	+	-	-	+
+	-	-	+	+	+
+	-	-	-	-	+
-	-	-	-	-	+

The applicability of genetic algorithms for solving multicomponent analyses was systematically examined. As important features of multicomponent systems, the degree of signal overlap (selectivity), the behavior of systems with known and unknown component numbers and qualities, and linear as well as nonlinear relationships between the analytical signal and concentration are varied within the simulations. According to classical methods, recovering concentrations by a genetic algorithm is of limited applicability with the exception of systems at a low degree of signal overlap. On the other hand, the recovery of a probe spectrum in the analytical process always gives satisfactory results independent of the features of the probe system. The genetic algorithm shows autoadaptive behavior in probe spectrum recovery. The quality and quantity of the resulting components may dramatically differ from the given probe, although the resulting spectrum is nearly the same. In such cases, the resulting component mixture can be interpreted as an imitation of the probe. As well as probe spectra, theoretically designed spectra can also be autoadapted by genetic algorithms. Furthermore, a spectral signal is only one single property of a chemical compound or mixture. Because of the nonlinear search characteristic of genetic algorithms, any other chemical or physical property can also be treated as a desired property.

Iris M. Müller

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

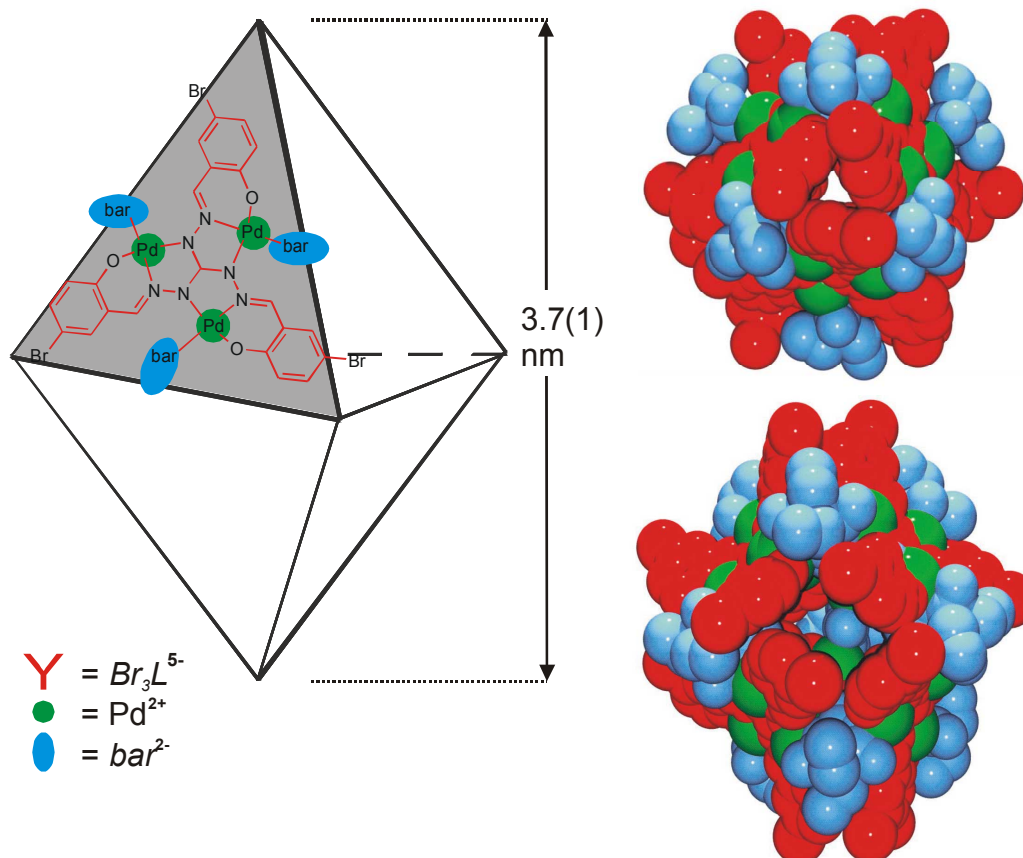
Tel.: ++49-(0)234-3224200; FAX: ++49-(0)234-3214420

email: iris.m.mueller@ruhr-uni-bochum.de

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

I. M. Müller, D. Möller, *Angew. Chem.* **2005**, *117*, 3029 – 3033, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2005**, *44*, 2969 – 2973. Rational Design of a Coordination Cage with Trigonal Bipyramidal Shape, Formed by Thirty Three Building Units

Die supramolekulare Koordinationschemie kann man nach den gebildeten Produkten in zwei große Klassen aufteilen: die Polymere und die diskreten Käfigmoleküle. Doch im Vergleich zu den aufgrund naheliegender Anwendungen bereits intensiv untersuchten Polymeren findet man erst seit den letzten Jahren auch ein verstärktes Interesse an den Käfigmolekülen. Die Verwendung von C_2 - und C_3 -symmetrischen Liganden erlaubt die gezielte Synthese eines Koordinationskäfigs mit der geringeren Symmetrie und äußeren Gestalt einer trigonalen Bipyramide. Die Charakterisierung einer Zwischenstufe mit der äußeren Gestalt eines offenen Tetraeders erlaubt Rückschlüsse auf den Entstehungsmechanismus derartiger nano-dimensionierter Koordinationsverbindungen.



The rapidly growing field of supramolecular coordination chemistry can be divided into two classes according to the products formed. The polymers have been intensively studied owing to their possible technological applications. The rational design of discrete cage molecules can be carried out by following the molecular library method. The use of C_2 - and C_3 -symmetric ligands allows the rational design of a low symmetry coordination cage with the outer shape of a trigonal bipyramid. The characterization of an intermediate with the outer shape of an open tetrahedron provides an insight into the formation mechanism of this class of coordination cages.

Raphael Stoll

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

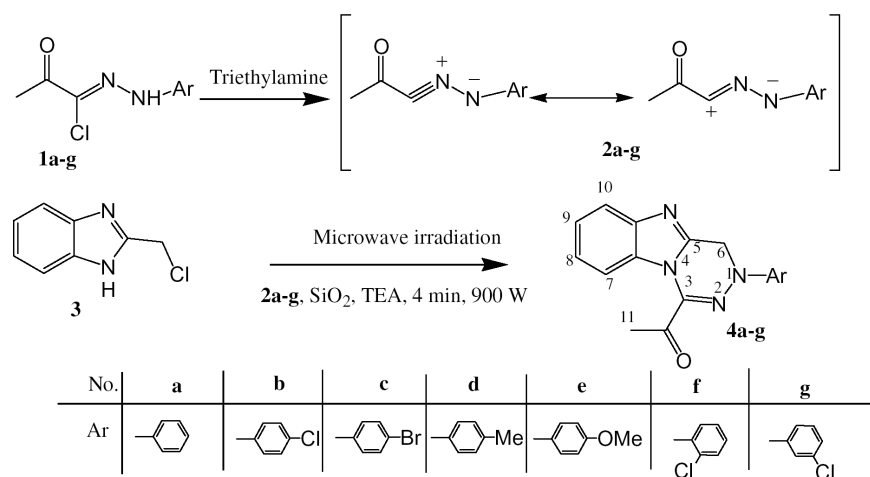
Tel.: ++49-(0)234-3225466; FAX: ++49-(0)234-3205466

email: Raphael.Stoll@ruhr-uni-bochum.de

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

Raid J. Abdel-Jalil, Wolfgang Voelter and Raphael Stoll. *Tetrahedron Letters* **46** (2005), 1725-1726. Microwave-assisted synthesis of 1-aryl-3-acetyl-1,4,5,6-tetrahydrobenzimidazo[1,2-*d*][1,2,4]triazine: first example of a novel ring system.

In dieser Arbeit wurden neuartige hoch-funktionalisierte Benzimidazole in einer zweistufigen Synthese mittels Mikrowellen hergestellt: Der Herstellung der Benzimidazole folgte ein Ringschluss zu neuartigen trizyklischen Systemen. Organische Synthesen mittels Mikrowellen fuhren oftmals zu dramatischen Steigerungen der Ausbeuten von chemischen Umsetzungen. Ausserdem ermoeeglichen loesungsmittelfreie Synthesen mit Mikrowellen die Verwendung von offenen Gefaessen sowie groessere Ansaetze. Viele Benzimidazolderivate sind von grossem Interesse fuer pharmazeutische Anwendungen und spielen eine entscheidende Rolle in Synthesen fusionierter heterozyklischer Systeme.



Novel highly functionalized benzimidazoles were synthesized in two steps by microwave irradiation: construction of the benzimidazole ring followed by ring closure to the new tricyclic system. Microwave-assisted organic syntheses often result in dramatic increases in yields of chemical transformations. Furthermore, microwave-assisted reactions under solvent-less conditions provide access to work with open vessels and to scale up reactions. Various benzimidazole derivatives are of interest for their diverse pharmaceutical uses and they play a vital role in the synthesis of fused heterocyclic systems.

In summary, the synthesis of the new tricyclic benzimidazole system has been accomplished under solvent-free microwave irradiation. The new benzimidazole derivatives with potential biological activities are under active investigations.

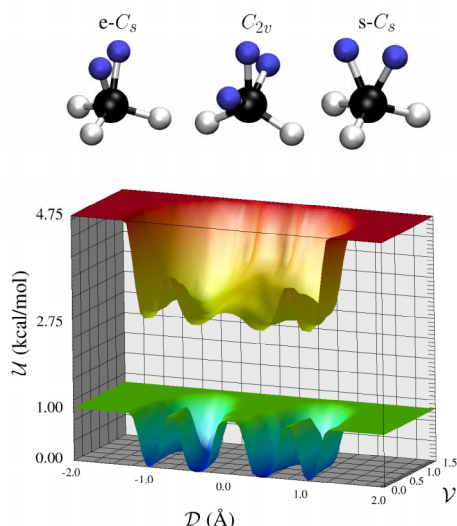
Dominik Marx

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

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

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

O. Asvany, P. Kumar P, B. Redlich, I. Hegemann, S. Schlemmer, D. Marx *Science* **309** (2005) 1219-1222. Understanding the Infrared Spectrum of Bare CH_5^+ , published online in ScienceXpress ("providing rapid electronic publication of selected Science papers based on timeliness and importance of the research").



Die Bestimmung der Struktur von protoniertem Methan ist aufgrund großamplitudiger Schwingungen und Wasserstoffmigration eine Herausforderung. In diesem Beitrag wird das Infrarotspektrum von CH_5^+ basierend auf der ab initio Molekulardynamik berechnet. Über eine Zuweisung des experimentellen Spektrums hinaus unterstützt diese Analyse die Fluxionalität von CH_5^+ und liefert einen dynamischen Mechanismus für die Wasserstoffmigration auf einer flachen effektiven Energiefläche, siehe Abbildung.

Protonated methane continues to elude definitive structural assignment, as large-amplitude vibrations and hydrogen scrambling challenge both theory and experiment. Here, the infrared spectrum of CH_5^+ is computed based on ab initio molecular dynamics. In addition to an assignment of the experimental spectrum the analysis supports the fluxionality of CH_5^+ at experimental conditions and provides a dynamical mechanism for hydrogen scrambling on a flat effective energy surface as shown in the figure.

Animation: <http://www.theochem.rub.de/go/ch5p.html>

Medienecho dieser Arbeit:

- o S. Borman: *Chemistry Highlights 2005*, Chem. & Eng. News **83(51)** (2005), 15-20.
- o S. Borman: *Protonated Methane Probed*, Chem. & Eng. News **83(30)** (2005), 45-48.
- o G. Niedner-Schatteburg: *Ständig in Bewegung*, Physik Journal **4(10)** (2005), 18-19.

Hintergrundinformation zur Analyse und Simulationsmethodik:

P. Kumar, D. Marx Understanding hydrogen scrambling and infrared spectrum of bare CH_5^+ based on ab initio simulations, Phys. Chem. Chem. Phys. **8** (2006), 573-586.

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glanzlichtern:

<http://www.theochem.rub.de/go/media.html>

Nikos L. Doltsinis

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

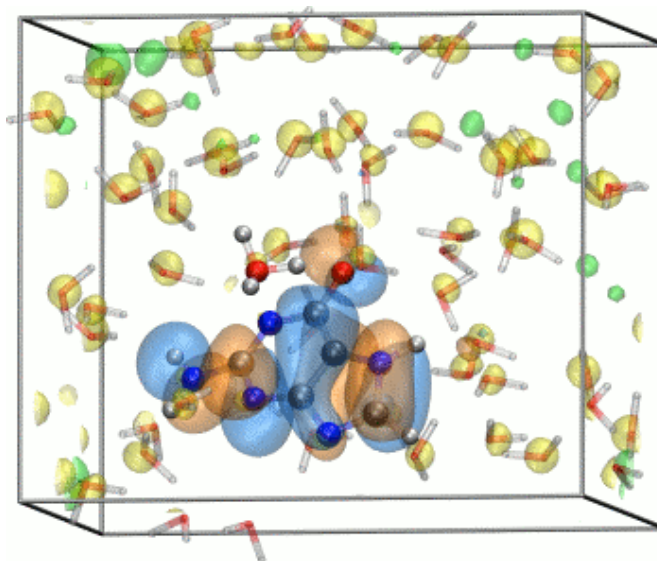
Tel.: ++49-(0)234-3226749; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Nikos.Doltsinis@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

H. Langer, N. L. Doltsinis, and D. Marx. *ChemPhysChem* **6** (2005) 1734-1737. Excited state dynamics and coupled proton-electron transfer of guanine: from the gas phase via microsolvation to aqueous solution.

Der gekoppelte Proton-Elektron-Transfer vom nacktem bis hin zum vollständig gelösten, photoangeregten G wurde mit Ab Initio Molekulardynamik untersucht. In allen Fällen wurde ein Wechsel des Charakters des S_1 -Zustands von $\pi\pi^*$ zu $\pi\sigma^*$ beim Aufbrechen der OH-Bindung des 7H-enol G gefunden. Bei nacktem G wird bei Überwindung einer relativ hohen Barriere entlang der OH-Dissoziationskoordinate eine S_0/S_1 konische Durchschneidung erreicht. In Bulkwasser kommt es dann zu einer solvensunterstützten 7H-enol zu 7H-keto Tautomerisierung. Beim Aufbrechen der OH-Bindung mit einer Koordinations-Zwangsbedingung löst sich ein Proton und ein Elektron. Der S_1 -Zustand ändert sich von $\pi\pi^*$ zu $\pi\sigma^*$, dessen σ^* -Orbital über das Lösungsmittel delokalisiert ist. Nach Grotthuss-Diffusion durch das Wasser rekombiniert das Proton mit G und formt eine NH-Bindung und somit das 7H-keto Tautomer, begleitet von einer Änderung der Anregung zurück zu einem $\pi\pi^*$ -artigen S_1 -Zustand. Nichtadiabatische Simulationen zeigen, dass ein strahlungsloser Zerfall aus dem $\pi\pi^*$ -Zustand um ein Vielfaches wahrscheinlicher ist als aus dem $\pi\sigma^*$ -Zustand.



Coupled proton-electron transfer in the S_1 excited state of naked, microsolvated, and fully solvated G is studied using ab initio molecular dynamics. In all cases, a change of character of the S_1 state from $\pi\pi^*$ to $\pi\sigma^*$ is found upon breaking the OH bond of 7H-enol G. For naked G a S_0/S_1 conical intersection along the OH dissociation coordinate can be reached, if a rather high reaction barrier is overcome. In bulk water, photoexcited G can undergo solvent-assisted isomerization, interconverting the 7H-enol and 7H-keto tautomers. Upon breaking the enol OH bond by means of a coordination constraint, a proton and an electron are detached and the S_1 state changes its character from a solute-localized $\pi\pi^*$ state to $\pi\sigma^*$, the σ^* -orbital being delocalized over the solvent. Following Grotthuss diffusion through the solvent a proton recombines with G to form a NH bond and thus the 7H-keto tautomer accompanied by a change from a back to a $\pi\pi^*$ -like S_1 state. Nonadiabatic simulations reveal that radiationless decay is much more likely to occur in the $\pi\pi^*$ state compared to the $\pi\sigma^*$ state.

Bernd Meyer

Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum

Tel.: +49-(0)234-322-6750, Fax: +49-(0)234-321-4045

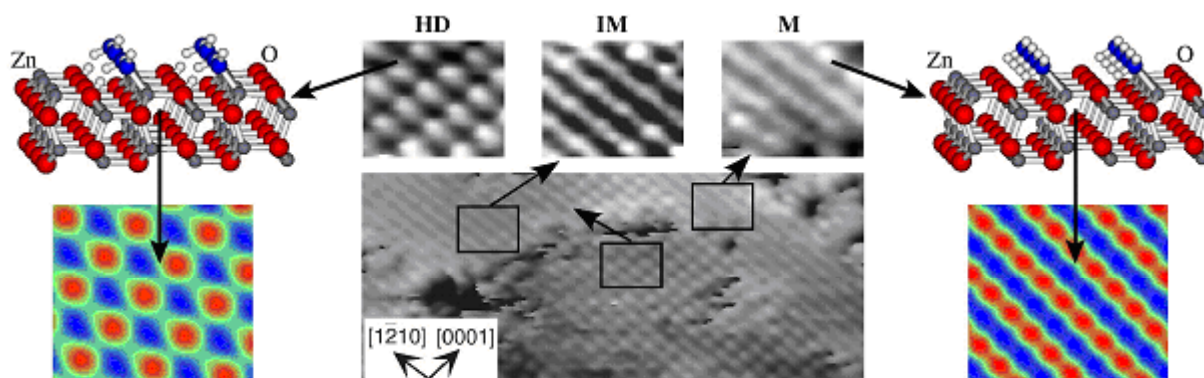
email: bernd.meyer@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

O. Dulub, B. Meyer, U. Diebold, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 136101 (2005). Observation of the Dynamical Change in a Water Monolayer Adsorbed on a ZnO Surface

Kontinuierlich dissoziierende und rekombinierende Wassermoleküle:

Die physikalischen, chemischen und biologischen Prozesse an der Grenzfläche zwischen Wasser und Festkörperoberflächen werden weitgehend durch die Eigenschaften der ersten Wasserlage in Kontakt mit dem Festkörper bestimmt. Für das konkrete Beispiel einer Zink-oxid-Oberfläche zeigen Rastertunnelmikroskopie-Aufnahmen und Dichtefunktional-rechnungen, dass die Wassermoleküle geordnete eindimensionale Reihen bilden. Die Wechselwirkung zwischen benachbarten Molekülen ermöglicht, dass jedes zweite Wassermolekül ein Proton abspalten und an ein Sauerstoffatom der Oberfläche abgeben kann. Bei Raumtemperatur wechseln die Wassermoleküle spontan kontinuierlich zwischen dieser halbdissoziierten Konfiguration (HD) und einer Struktur, in der alle Moleküle weiterhin intakt sind (M). Dieser Prozess kann durch eine Störung der Reihen, z.B. durch diffundierende Protonen, verstärkt werden. Die Dissoziation und Rekombination der Wassermoleküle geschieht so schnell, dass, gemittelt über die Zeit, der Wasserfilm in den STM-Aufnahmen in einem Zwischenzustand (IM) erscheint, in dem die Wassermoleküle weder intakt noch dissoziiert sind.



Watching water molecules associate and dissociate:

When water gets in contact with a solid surface, the first layer of water molecules determines much of the physical, chemical, and biological processes at this interface. For the specific example of a zinc oxide surface, Scanning Tunneling Microscopy and first-principles calculations show that water molecules align themselves in one-dimensional rows. The interaction between neighboring molecules can cause every other one to split off a proton and donate it to a surface oxygen atom. At room temperature, the water molecules spontaneously switch back-and-forth between such a half-dissociated configuration (HD), and one where every molecule is still intact (M). This process is enhanced if the rows are disturbed, e.g., by a proton that diffuses in from a defect. The switching happens so rapidly that, when averaged over time, molecules appear in the STM images to be in an intermediate situation (IM)-neither dissociated nor molecular.

Christof Hättig

AG Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

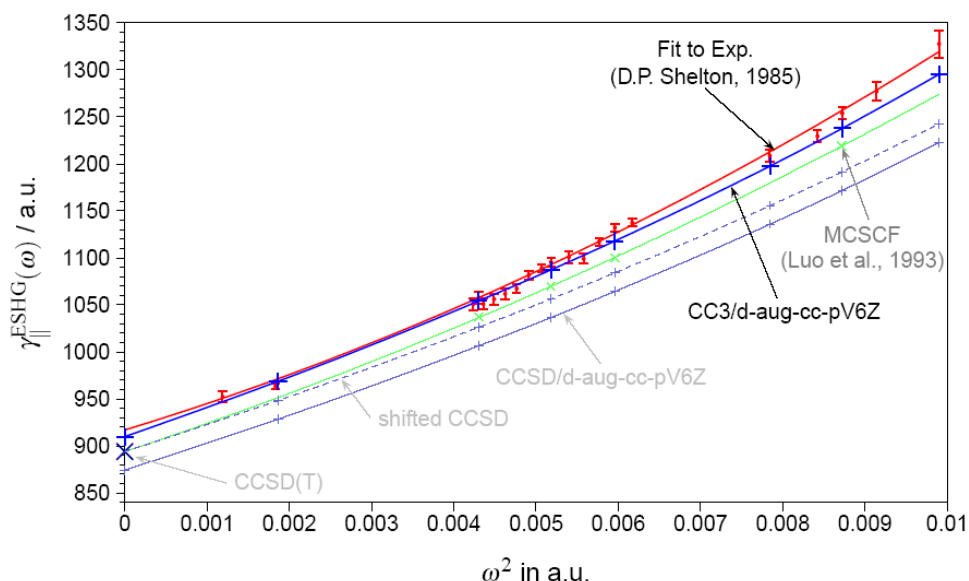
Tel.: ++49-(0)234-32 28082; FAX: ++49-(0)234-32 14045

email: christof.haettig@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

F. Pawłowski, P. Jørgensen, C. Hättig, *Chem. Phys. Lett.* **413** (2005) 272-279. The second hyperpolarizability of the N₂ molecule calculated using the approximate coupled cluster triples model CC3.

Die statische und die frequenzabhängige zweite Hyperpolarisierbarkeit des Stickstoffmoleküls sind mit dem Coupled-Cluster-Modell CC3, welches näherungsweise Dreifachanregungen berücksichtigt, berechnet worden. Das Basissatzlimit der CC3-Methode für die Hyperpolarisierbarkeit wurde durch Extrapolation abgeschätzt. Unter Berücksichtigung der Nullpunktschwingungskorrektur aber unter Vernachlässigung von relativistischen Beiträgen (für die gefunden wurde, dass sie sehr klein sind) ergibt sich als beste Abschätzung für die statische zweite Hyperpolarisierbarkeit des Stickstoffmoleküls ein Wert von 912.9 ± 4.3 a.u. (wobei die geschätzte Fehlergrenze keine dynamischen Elektronenkorrelationseffekte jenseits der CC3-Methode berücksichtigt). Dreifachanregungen liefern in diesem Fall einen wesentlichen Beitrag, der zudem mit der Frequenz zunimmt. Die mit der CC3-Methode berechneten Werte für die frequenzabhängige Hyperpolarisierbarkeit sind in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment: die Abweichungen sind in der Größe von 0.1-2.2%. Die größte durchgeführte CC3-Rechnung verwendete dabei 326 Basisfunktionen.



The static and frequency-dependent second hyperpolarizabilities of the Nitrogen molecule have been calculated using the coupled-cluster approximate triples model CC3. The CC3 basis set limit of the hyperpolarizability has been estimated. Considering the zero-point vibrational correction, but neglecting the relativistic contributions (which are found to be small) the best estimate of the static hyperpolarizability is 912.9 ± 4.3 a.u. (the uncertainty does not account for dynamic electron correlation beyond the CC3 model). The effect of triples is important and increases with frequency. The hyperpolarizabilities calculated at the CC3 level agree well with experiment, the discrepancies being of 0.1-2.2%. The largest CC3 calculations employed 326 basis functions.

Volker Staemmler

Theoretische Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

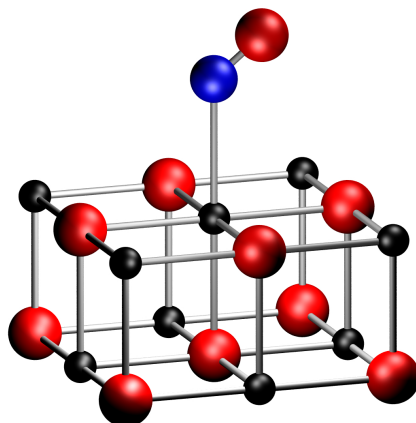
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: staemm@theochem.ruhr-uni-bochum.de

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

V. Staemmler, *Top. Organomet. Chem.* **12** (2005) 219-256. The Cluster Approach for the Adsorption of Small Molecules on Oxide Surfaces

Die richtige Beschreibung schwacher Wechselwirkungen zwischen kleinen Molekülen und oxidischen Oberflächen stellt immer noch eine Herausforderung für die Theorie dar. In dem vorliegenden Übersichtsartikel wird der gegenwärtige Stand der quantenchemischen Cluster-Rechnungen für Adsorptionsgeometrien und –energien diskutiert. Zunächst werden die physikalischen und chemischen Beiträge zum Bindungsmechanismus charakterisiert und die verschiedenen Cluster-Modelle zur Beschreibung von Molekül-Substrat-Wechselwirkungen vorgestellt: Freie, wasserstoff-abgesättigte und eingebettete Cluster. Dann werden die Möglichkeiten und Grenzen der auf dem Gebiet der Oberflächenchemie meist benutzten Elektronenstruktur-Methoden – Dichtefunktional-Theorie, Hartree-Fock-Näherung und Korrelations-Methoden – diskutiert. Zum Schluss werden die bei solchen Rechnungen auftretenden Schwierigkeiten und die erreichbaren Genauigkeiten anhand dreier ausgewählter Beispiele analysiert: Die Physisorption von CO auf der inerten MgO(100)-Oberfläche, die schwache Chemisorption von NO auf NiO(100) und die Wechselwirkung zwischen CO und den thermodynamisch instabilen polaren Oberflächen von ZnO.



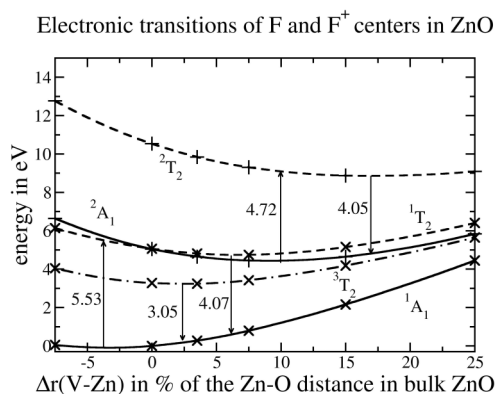
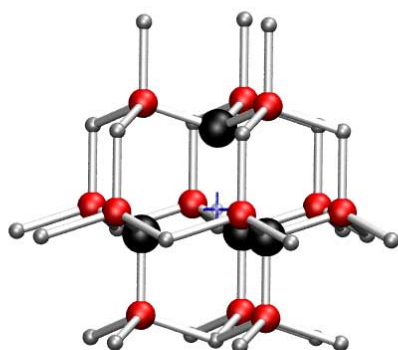
The correct description of the weak interaction between small molecules and oxide surfaces is still a challenge for theory. In the present review, the current status of the cluster approach to the calculation of adsorption geometries and energies by means of quantum-chemical ab initio methods is discussed. In the first part, the physical and chemical contributions to the bonding mechanism are briefly characterized and the different clusters models currently used for treating molecule/surface interactions are presented: Free clusters, hydrogen saturated clusters and embedded clusters. We continue with a description of the possibilities and limitations of the most widely used electronic structure methods – density functional theory, Hartree-Fock approximation, and post-Hartree-Fock methods – when applied in the field of molecule/surface interactions. Finally, the difficulties encountered in real calculations and the accuracy that can be obtained are discussed for three representative examples: The physisorption of CO on the inert MgO(100) surface, the weak chemisorption of NO on NiO(100), and the interaction between CO and the thermodynamically unstable polar surfaces of ZnO.

Karin Fink

Lehrstuhl für Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
(jetzt: Institut für Nanotechnologie, Forschungszentrum Karlsruhe, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen)
Tel.: ++49-(0)7247-82 6411
email: karin.fink@int.fzk.de

K. Fink *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** (2005) 2999-3004. Ab initio cluster calculations for the absorption energies of F and F⁺ centers in bulk ZnO.

Anionenfehlstellen in Oxiden oder Halogeniden werden auch Farbzentren genannt, da sie in vielen Fällen elektronische Anregungen im optischen Bereich aufweisen. Die elektronischen Übergänge von F und F⁺ Zentren in ZnO wurden systematisch mit ab initio Cluster-Rechnungen untersucht. Es zeigte sich, dass sowohl die geometrische Relaxation der Struktur in der Umgebung der Sauerstofffehlstellen als auch Elektronenkorrelation einen wichtigen Einfluss auf die Anregungsenergien haben. Für das F⁺ Zentrum stimmte die berechnete Absorptionsenergie von 3.19 eV sehr gut mit dem experimentellen Wert von 3.03 eV überein. Die für die Emission aus dem ³T₂ Zustand in den ¹A₁ Grundzustand des F-Zentrums berechnete Übergangsenergie von 2.73 eV weicht dagegen deutlich von der experimentell beobachteten grünen Lumineszenz bei 2.38 eV ab. Da außerdem der angeregte Zustand oberhalb der Bandlücke liegt ist davon auszugehen, dass der ³T₂ → ¹A₁ Übergang des F Zentrums nicht die Ursache für die grüne Lumineszenz ist.



Anion vacancies are called F centers (from the german word 'Farbzentrum' = color center), because they often show low-lying electronic states which can be reached by absorption of visible light. We present the results of a series of ab initio calculations on the ground states and the low-lying excited states of the F and F⁺ centers in bulk ZnO. It proved necessary to include the geometric relaxation in the surrounding of the O vacancy as well as electron correlation to obtain reasonable results. The calculated absorption energy for the F⁺ center (3.19 eV) is in excellent agreement with the experimental value of 3.03 eV. For the emission from the ³T₂ state of the F center to the ¹A₁ ground state we obtained a transition energy of 2.73 eV. Experimentally, a green photoluminescence is observed at 2.38 to 2.45 eV. Furthermore, the position of the excited state orbital for the F center excitation was above the band gap due to our calculations. Therefore, we conclude that the ³T₂ to ¹A₁ transition of the F center is not the origin of the experimentally observed green luminescence.

Werner Kutzelnigg

Theoretische Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-447780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214109

e-mail: Werner.Kutzelnigg@rub.de

W.Kutzelnigg and W.Liu, *J. Chem. Phys.* **123**, 241102 (2005)

Quasi-relativistic theory equivalent to fully relativistic theory

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik (QM) wird ein Elektron durch eine 1-komponentige Wellenfunktion (WF) beschrieben. Man benötigt allerdings eine 2-komponentige WF, einen sog. Spinor, wenn man die beiden Einstellmöglichkeiten des Spins α und β berücksichtigen will. In der relativistischen QM ist eine 4-komponentige WF, ein sog. Bispinor ψ_k erforderlich. Das hängt damit zusammen, dass die Dirac-Gleichung, das relativistische Gegenstück zur Schrödingergleichung, sowohl Lösungen hat, die Elektronen, als auch solche, die Positronen beschreiben. Drückt man den Bispinor ψ_k durch die beiden Spinoren φ_k und χ_k aus, die als obere (grosse) und untere (kleine) Komponente bezeichnet werden, so lässt sich zeigen, daß für Elektronen χ_k gem. (1) durch φ_k ausdrückbar ist, wobei der Operator X der impliziten Gleichung (2) genügt. Dabei sind m und c Konstanten, und die Operatoren V , sowie $\vec{\sigma}\vec{p}$ sind bekannt, z.B. ist V die potentielle Energie. Wäre man in der Lage, die Gleichung (2) nach X aufzulösen, dann könnte man χ_k eliminieren und man hätte eine Theorie für Elektronen mit einem 2-komponentigen Spinor φ_k , eine sog. quasi-relativistische (qr) Theorie zur Verfügung. Dies ist jedoch nicht möglich, und man kann – auf Operator-Ebene – nur Näherungslösungen für X und damit nur einen genäherten qr Formalismus konstruieren.

In praxi geht man allerdings meist so vor, dass man sowohl φ_k als auch χ_k in eine Basis entwickelt, wobei die Basen über die sog. kinetische Balance miteinander verknüpft sind. Bezeichnet man die Vektoren der Entwicklungskoeffizienten für φ_k und χ_k als $\vec{a}$ bzw. $\vec{b}$, so gilt für Elektronen die Beziehung (3), wobei die Matrix $\mathbf{X}$ der impliziten Gleichung (4) genügt. In (4) sind die Matrizen $\mathbf{T}, \mathbf{V}, \mathbf{U}$ und $\mathbf{S}$ bekannt, und $\mathbf{X}$ ist unbekannt. Während man die Operator-Gleichung (2) nicht nach X auflösen kann, ist das Entsprechende bei der Matrixgleichung (4) möglich, und zwar mit den Methoden der numerischen Mathematik in beliebiger Genauigkeit. Damit wird – auf Matrix-Ebene – eine numerisch exakte qr Theorie möglich, und alle genäherten qr Formalismen werden obsolet.

$$\chi_k = X\varphi_k \quad (1)$$

$$2mc^2X = c\vec{\sigma}\vec{p} - XV + VX - cX\vec{\sigma}\vec{p}X \quad (2)$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2m}\mathbf{T}^{-1}\vec{a} \quad (3)$$

$$2mc^2\mathbf{X} = 2mc\mathbf{T} + \frac{1}{2m}\mathbf{U}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{V} - c\mathbf{X}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{X} \quad (4)$$

In nonrelativistic quantum mechanics (qm) an electron is described by a 1-component wave function (wf). One needs a 2-component wf, a so called spinor, if one wants to account for the two spin orientations α and β . In relativistic qm a 4-component wf, a bispinor ψ_k is required. This is because the Dirac-equation, the relativistic counterpart of the Schrödinger equation, has solutions for both electrons and positrons. If one expresses the bispinor ψ_k in terms of the two spinors φ_k and χ_k , called the upper (large) and lower (small) component, one can show that for electrons χ_k can be expressed through φ_k by means of (1), with the operator X satisfying the implicit equation (2). Here m and c are constants, and the operators V , as well as $\vec{\sigma}\vec{p}$ are known, V is e.g. the potential energy. If one were able to resolve eqn. (2) for X , one could eliminate χ_k , and achieve a quasi-relativistic (qr) theory for electrons only. Unfortunately, this is not possible, and one can – at operator level – only construct approximative solutions for X and for a qr formalism.

In practice one usually proceeds by expanding both φ_k and χ_k in a basis, with the two basis sets connected via the so-called kinetic balance condition. Let the vectors of the expansion coefficients of φ_k and χ_k be $\vec{a}$ and $\vec{b}$ respectively, then for electrons there is the relation (3), with the matrix $\mathbf{X}$ satisfying the implicit eqn. (4). In (4) the matrices $\mathbf{T}, \mathbf{V}, \mathbf{U}$ and $\mathbf{S}$ are known, and $\mathbf{X}$ is unknown. While one cannot resolve the operator eqn. (2) for X , the solution of the matrix eqn. (4) for $\mathbf{X}$ is possible with arbitrary accuracy, using methods of numerical mathematics. So a numerically exact qr theory becomes possible at matrix level, making all existing approximative qr formalisms obsolete.

Martin Muhler

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

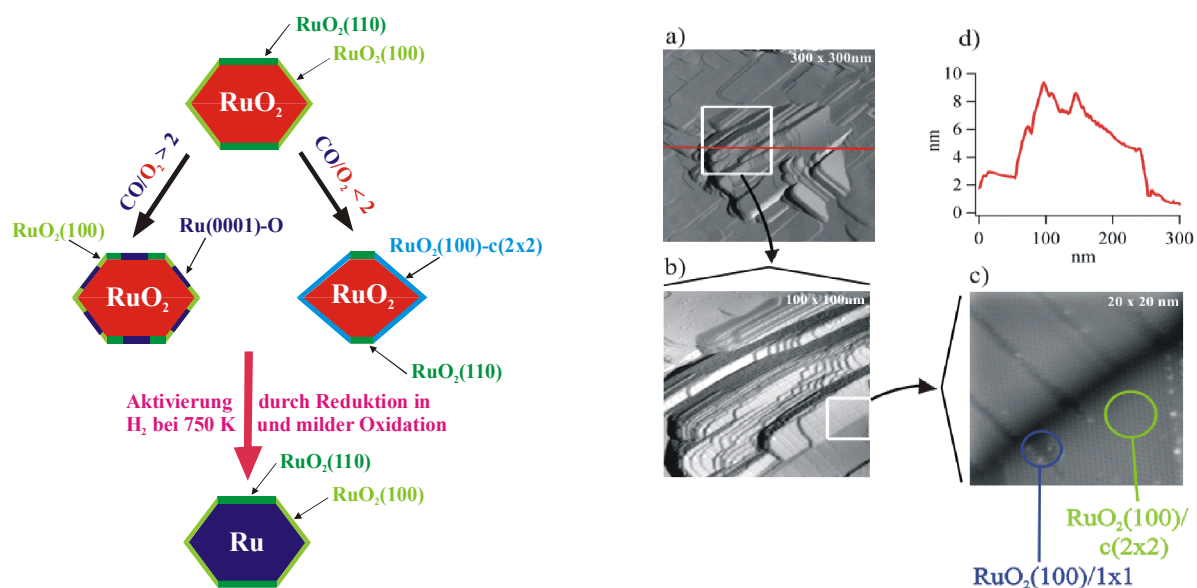
Tel.: ++49-(0)234-3228754; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

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

J. Aßmann, D. Crihan, M. Knapp, E. Lundgren, E. Löffler, M. Muhler, V. Narkhede, H. Over, M. Schmid, A.P. Seitsonen, P. Varga, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 917-920. Understanding the Structural Deactivation of Ruthenium Catalysts on an Atomic Scale under both Oxidizing and Reducing Conditions

Rutheniumkatalysatoren desaktivieren bei der Oxidation von Kohlenmonoxid sowohl unter oxidierenden als auch reduzierenden Bedingungen. Wir konnten diese Phänomene durch die kombinierte Anwendung von kinetischen, spektroskopischen und strukturellen Methoden auf polykristalline RuO_2 -Pulverproben und einkristalline $\text{RuO}_2(110)$ -Filme aufklären und ein Schale-Kern-Modell aufstellen: Der Oxidationsgrad an der Oberfläche hängt vom CO/CO_2 -Verhältnis und von der Temperatur ab. Die inaktiven $\text{RuO}_2(100)$ - $c(2 \times 2)$ -Facetten (hellblau) bilden sich unter oxidierenden Bedingungen ($\text{CO}/\text{O}_2 < 2$) aus, während die ebenfalls inaktiven $\text{Ru}(0001)$ -O-Oberflächen (dunkelblau) unter reduzierenden Bedingungen ($\text{CO}/\text{O}_2 > 2$) entstehen. Der aktivste Zustand ist ein ultradünner RuO_2 -Film (hell- und dunkelgrün, Dicke 1 – 2 nm) auf einem metallischen Ruthenium-Kern. Dieser Zustand wird durch eine vollständige Reduktion der RuO_2 -Partikel gefolgt von einer milden Reoxidation unter 500 K erreicht.



Ru-based catalysts used for CO oxidation suffer from deactivation both under oxidizing and reducing conditions. We were able to elucidate this phenomenon by applying kinetic, spectroscopic and structural techniques both to polycrystalline RuO_2 powder and to $\text{RuO}_2(110)$ single-crystalline films resulting in a shell-core model: the degree of surface oxidation is determined by the CO/O_2 reactant feed ratio and the temperature. The inactive $\text{RuO}_2(100)\text{-}c(2 \times 2)$ (light blue) surface facets are formed under oxidizing conditions ($\text{CO}/\text{O}_2 < 2$), whereas low-activity metallic ruthenium surfaces ($\text{Ru}(0001)\text{-O}$) (dark blue) are exposed under net reducing conditions ($\text{CO}/\text{O}_2 > 2$). The most active state is an ultrathin RuO_2 (light and dark green: thickness 1 – 2 nm) layer supported on a metallic ruthenium core. This state is achieved by complete reduction of the RuO_2 particle followed by a mild re-oxidation below 500 K.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

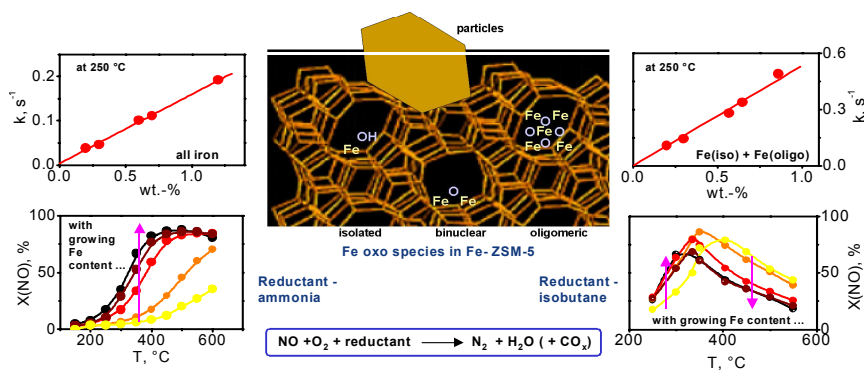
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

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

M. Schwidder, M. Santhosh Kumar, A. Brückner, W. Grünert, *Chem. Comm.* (2005) 805-807.
Active sites for NO reduction over Fe-ZSM-5 catalysts. M. Schwidder, M. Santhosh Kumar, K. Klementiev, M. M. Pohl, A. Brückner, W. Grünert, *J. Catal.* **231** (2005) 314-330.
Selective Reduction of NO with Fe-ZSM-5 Catalysts of Low Fe content I. Relations between Active Site Structure and Catalytic Performance

Eisenoxid-Träger-Katalysatoren stehen gegenwärtig an der Schwelle eines technischen Einsatzes für die Stickoxidminderung in Dieselabgasen (selektive katalytische Reduktion mit NH_3 oder Kohlenwasserstoffen). Eisenmodifizierte Zeolithe gehören zu den aktivsten Katalysatoren für diese Reaktionen. In Fe-ZSM-5 bilden sich eine Vielzahl unterschiedlicher Fe-Oxo-Spezies aus, was die Aufklärung der katalytischen Zentren sehr erschwert. Durch Kombination katalytischer mit spektroskopischen Studien (EXFAS; UV-Vis und EPR in Kooperation mit dem ACA Berlin) konnte gezeigt werden, dass verschiedene Spezies (einschl. isolierter Fe-Zentren) die NO-Reduktion katalysieren. Wird als Reduktionsmittel Isobutan eingesetzt, ist jede Aggregation des Eisens zu vermeiden, weil oligomere Cluster und Oxidpartikeln die Totaloxidation des Kohlenwasserstoffs katalysieren. NH_3 wird dagegen in Gegenwart hochdisperser Fe-Spezies von Sauerstoff nur wenig angegriffen. Dies erklärt das exzellente katalytische Verhalten von Fe-Zeolithen mit diesem Reduktionsmittel.



Supported iron oxide catalysts are at present considered for technical application in NO_x abatement for Diesel engines (selective catalytic reduction of NO_x by NH_3 or hydrocarbons). Zeolite-supported Fe catalysts are among the most active in this field. In ZSM-5, iron can be present in a variety of species, which complicates the identification of the active sites. Combining catalytic with spectroscopic studies (EXAFS; UV-Vis and EPR in cooperation with ACA Berlin) we were able to show that several types of Fe oxo species (including isolated sites) catalyse NO reduction. For the isobutane reductant, any aggregation of the Fe oxo species is deleterious since oligomeric and particulate species catalyse total hydrocarbon oxidation. NH_3 appears to be less prone to oxidation over highly disperse Fe sites, which explains the excellent performance of Fe zeolites in NO_x reduction with this reductant.

Michael Hollmann

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

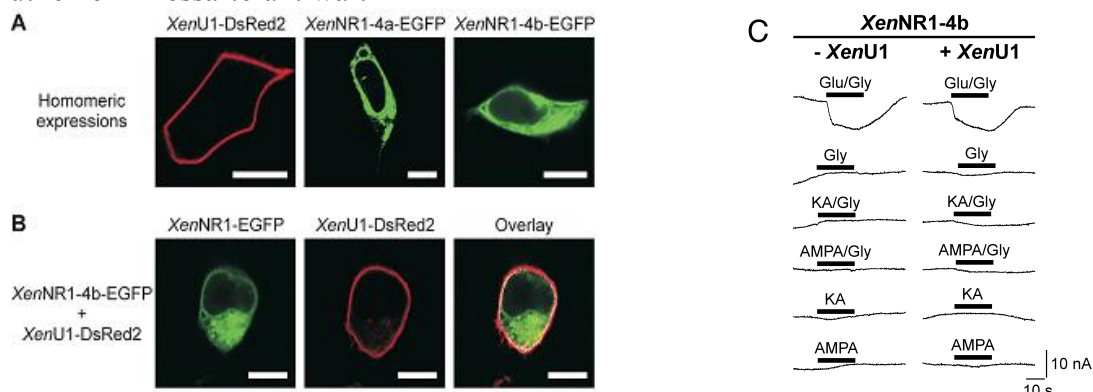
Tel.: ++49-(0)234-3224225; FAX: ++49-(0)234-3214244

email: michael.hollmann@ruhr-uni-bochum.de

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

C. Schmidt, M. Werner, M. Hollmann, *Mol. Pharmacol.* **69** (2005) 119-29. Revisiting the postulated "unitary glutamate receptor": Electrophysiological and pharmacological analysis in two heterologous expression systems fails to detect any evidence for its existence.

Im Jahr 1996 stellte die Arbeitsgruppe von Eric Barnard die umstrittene Hypothese auf, dass ein sogenannter "unitary glutamate receptor" existiert, der die elektrophysiologischen und pharmakologischen Eigenschaften aller drei klassischen Glutamaterezeptorunterfamilien in sich vereinigt. Da dieser Rezeptor aus dem *Xenopus*-NMDA-Rezeptoruntereinheit *XenNR1-4b* sowie dem *Xenopus*-Kainatbindprotein *XenU1* bestehen sollte, klonierten wir die beiden cDNAs und überprüften die Behauptung durch Koexpression der beiden Proteine in HEK-Zellen und Froschoozyten mit anschließender Messung der gebildeten Ionenkanäle. Beide Proteine werden exprimiert (siehe fluoreszenzmarkierte Proteine in Abb. A) und sind in der Zellmembran von HEK-Zellen kolokalisiert (Abb. B, weisse Bereiche im Overlay-Bild), sodass eine Interaktion prinzipiell möglich ist. Trotzdem lassen sich über die durch Glutamat/Glycin beim homomeren *XenNR1-4b* aktivierbaren Ströme (Abb. C, linke Spalte) hinaus keinerlei spezielle Ionenkanaleigenschaften feststellen, insbesondere nicht die behaupteten ungewöhnlichen Kainat- und AMPA-induzierten Ströme (Abb. C, rechte Spalte). Wir schlussfolgern, dass der postulierte "unitary glutamate receptor" nicht existiert und vermutlich ein Messartefakt war.



In 1996 the group of Eric Barnard published the contentious hypothesis that a so-called "unitary glutamate receptor" existed that united the electrophysiological and pharmacological properties of all three classical glutamate receptor subfamilies. As this receptor was reported to consist of the *Xenopus* NMDA receptor subunit *XenNR1-4b* and the *Xenopus* kainate binding protein *XenU1*, we cloned both cDNAs in an effort to reproduce and verify the postulated special ion channel properties. To this end we coexpressed the two proteins in HEK cells as well as *Xenopus* oocytes and analyzed the resulting ion channels. We found that both proteins are expressed (see fluorescently labelled proteins in Fig. A) and are colocalized in the plasma membrane (Fig. B, white areas in the overlay picture). However, no ionic currents beyond those elicited by glutamate/glycine also at the homomeric *XenNR1-4b* subunit alone (Fig. C, left column) could be detected. In particular, none of the reported unusual AMPA-or kainate-induced currents were ever seen (Fig. C, right column). We conclude that the postulated "unitary glutamate receptor" does not exist, and that the published reports probably were based on experimental artifacts.

Rolf Heumann

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

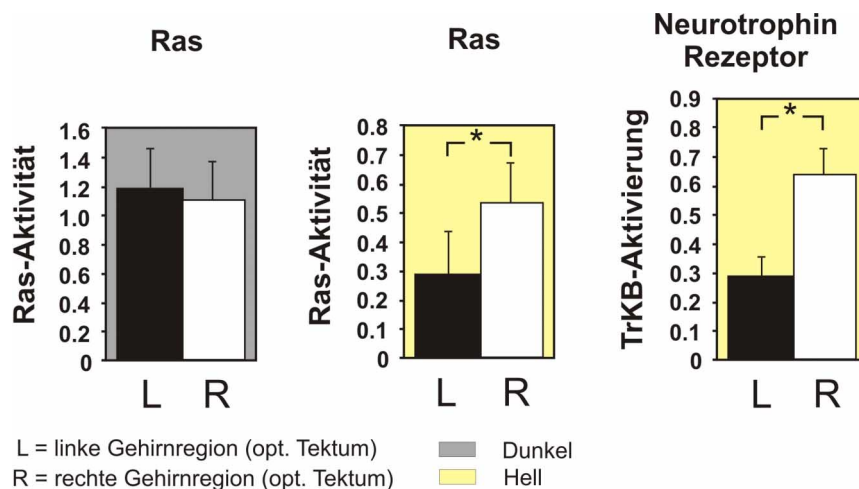
Tel.: ++49-(0)234-322 4230; FAX: ++49-(0)234-3214105

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

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

M. Manns, O. Güntürkün, R. Heumann, A. Blöchl, *Eur. J. Neurosci* **22** (2005) 2180-2186.
Photic inhibition of TrkB/RAS activity in the pigeon's tectum during development: impact on brain asymmetry formation.

Neurotrophe Faktoren sind Proteine, die durch Aktivierung ihrer Trk-Rezeptoren zentrale Funktionen von Nervenzellen steuern, wie das Zellvolumen, die Morphologie von Neuriten und die Ausbildung von synaptischen Verschaltungen. Wir haben früher gezeigt, dass die Wirkung solcher neurotrophen Funktionen innerhalb der Nervenzelle durch das Signalprotein „Ras“ vermittelt werden. Hier stellten wir die Frage, ob äußere Umweltreize die Aktivität des Ras im Gehirn regulieren und, ob diese zur asymmetrischen Reizverarbeitung des Gehirns beitragen. Während der Entwicklung von Taubeneiern ist das Embryo immer mit dem gleichen Auge dem Licht zugewendet. In Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Biopsychologie haben wir gefunden, dass die Aktivität des Neurotrophinrezeptors TrkB und des nachgeschalteten Ras in der durch Licht stimulierten linken Gehirnregion ein Tag nach dem Schlupf herabreguliert wird, während die im Dunkeln gehaltenen Taubeneier keine Veränderungen aufweisen (Bild). Diese Ergebnisse zeigen, dass die Neurotrophinrezeptor-/Ras-Aktivität im Gehirn eine Schlüsselfunktion für das Verständnis der durch Licht ausgelösten Asymmetrie bei der Verarbeitung von Sehprozessen im Gehirn darstellt.



Neurotrophic factors bind to their cognate TrkB-receptors in the brain, thereby regulating a large number of neuronal properties, such as cell volume, dendritic morphology and synaptic connectivity. Using a genetic mouse model expressing permanently activated *Ras* in neurons, we have previously shown that neurotrophic functions are mediated via the intracellular signaling protein *Ras*. We now asked if environmental stimuli such as light could modulate *Ras* activity during normal brain development, thereby imprinting brain asymmetry. Here, we investigated the visual system of the pigeon because their left tectum is normally light stimulated during embryonic development. In collaboration with the Biopsychology group in Bochum we have established that due to the asymmetric embryonic light input there is an inhibition of TrkB/Ras activity in the left tectum, while dark treated eggs do not show any changes. We conclude that TrkB/Ras signaling corresponds to developmental processes leading to an asymmetric functional architecture of the pigeon's visual system.

Bernhard Hovemann

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

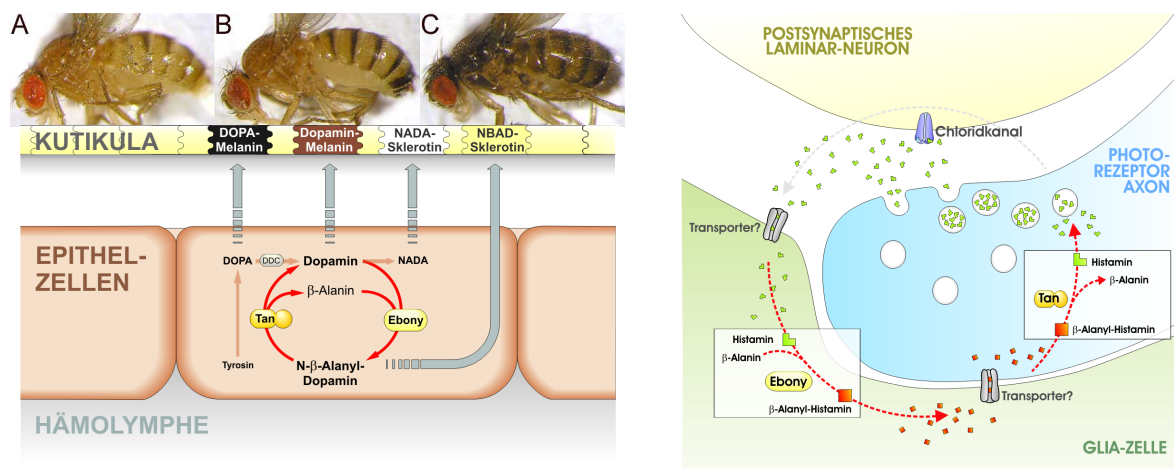
Tel.: ++49-(0)234-3224235; FAX: ++49-(0)234-3204235

email: bernhard.hovemann@rub.de

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

J.R. True, S.-D. Yeh, B.T. Hovemann, T. Kemme, I.A. Meinertzhagen, T.N. Edwards, S.-R. Liou, Q. Han, J. Li, *PloS Genetics* 1 (2005) 551-562. *Drosophila tan* Encodes a Novel Hydrolase Required in Pigmentation and Vision.

Tan und Ebony nehmen in der Melanin- und Sklerotinbiosynthese eine zentrale Funktion ein indem sie ein bestimmtes Verhältnis zwischen Dopamin und N- β -Alanyldopamin (NBAD) einstellen. Der Verlust einer Enzymaktivität zeigt sich direkt in der Färbung der Fliegen (*tan*- und *ebony*-Mutante in A und C im Vergleich zum Wildtyp in B). Die biochemische Charakterisierung des Ebony Proteins hatte gezeigt, dass es neben Dopamin in der Kutikula *in vitro* auch andere biogene Amine mit β -Alanin konjugieren kann. Wir haben jetzt das *tan*-Gen identifiziert. Die biochemische Charakterisierung des Tan-Proteins zeigt die erwartete Hydrolasefunktion und schließt damit eine Lücke im Verständnis der Pigmentbildung in Insekten. Darüber hinaus spaltet Tan auch das Konjugationsprodukt N- β -Alanylhistamin im *Drosophila* Auge. Damit wird unsere Modellvorstellung eines Histamin Neurotransmitterkreislaufs über Histamin/N- β -Alanylhistamin (NBAH) zwischen Photorezeptoraxon und Epithelglia experimentell gestützt (<http://www.pm.ruhr-uni-bochum.de/pm2005/msg00375.htm>).



Tan and Ebony play a central role in the biosynthesis of melanin and sclerotin by adjusting the ratio of dopamine and N- β -alanyldopamine (NBAD). The loss of either enzymatic function is directly reflected in the body color of the flies (*tan* and *ebony* mutants in A and C compared to wildtype in B). The biochemical characterization of the Ebony protein had shown its ability to not only conjugate dopamine with β -alanine in the cuticle but also other biogenic amines with β -alanine *in vitro*. We now have identified the *tan* gene. The biochemical characterization of the Tan protein revealed the expected hydrolytic function and thus closes a gap in our understanding of pigment formation in insects. Additionally, Tan also hydrolyzes the conjugate N- β -alanylhistamine in the *Drosophila* eye. This lends experimental support to our model of a neurotransmitter cycle via histamine/N- β -alanylhistamine (NBAH) between the axons of photo receptors and epithelial glia cells.

Andrea Blöchl

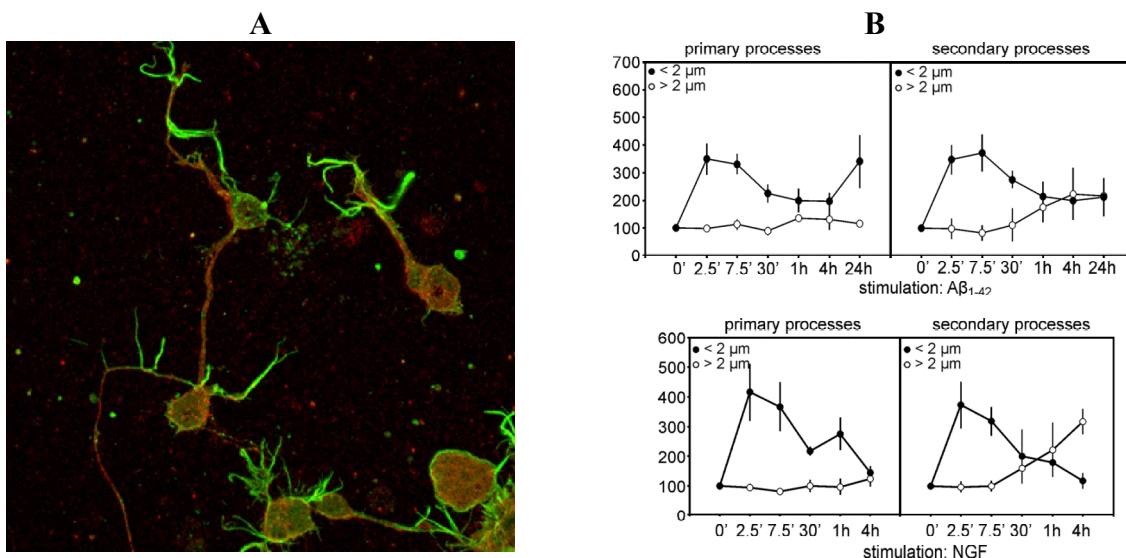
Biochemie II; NC7/132, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: andrea.bloechl@rub.de

K. Susen, A. Blöchl, *J. Mol. Med.* **83**, (2005) 720-735. Low concentrations of aggregated beta-amyloid induce neurite formation via the neurotrophin receptor p75

Aggregiertes β -Amyloid (A β) ist für die Neurodegeneration im Gehirn von Alzheimer Patienten verantwortlich. Schon vor mehreren Jahren wurde erkannt, dass es an den Neurotrophin-Rezeptors p75 bindet und ihn aktiviert. Wir haben die durch A β induzierte Signaltransduktion untersucht und herausgefunden, dass niedrige Konzentrationen an A β nicht neurotoxisch sind, sondern ähnlich wie der Nervenwachstumsfaktor NGF trophisch wirken und den Ras-Erk Signalweg induzieren. Ferner konnten wir in neuronalen Kulturen des Kleinhirns von neugeborenen Ratten mit A β ein Auswachsen neuer Neuriten und eine Verzweigung und Verlängerung bestehender Neuriten auslösen (A, in grün). Dieses Neuritenwachstum weist geringe, aber bedeutsame Unterschiede zu dem von NGF verursachten Neuritenwachstum auf. Während NGF vor allem längere Fortsätze induzierte, führte A β zu einer stärkeren Ausbildung von Wachstumskegeln und kurzen Fortsätzen (B), die für die aus Tierversuchen mit A β bekannte fehlerhafte neuronale Vernetzung und damit vielleicht auch für den Gedächtnisverlust-einem Frühsymptom der Alzheimerschen Krankheit-verantwortlich sein könnte.



Aggregated β -amyloid (A β) is responsible for the neurodegeneration in Alzheimer's disease. It binds to the neurotrophin receptor p75 and activates it. We examined the corresponding signaling process in different cell lines and could demonstrate that low concentrations of A β (25 nM) are not neurotoxic but have trophic effects and that they induce the Ras-Erk pathway similar to the neurotrophin nerve growth factor (NGF). In addition, A β led to quick formation, branching and elongation of neurites in neuronal cultures of the cerebellum of newborn rats (A, in green). But while NGF promoted neurite branching and elongation, A β was less effective in neurite elongation, and counts of small processes and of growth cones remained clearly elevated after 24h stimulation (B); these peculiarities might be linked to aberrant neuronal connections reported for an animal model of Alzheimer disease and might cause the memory loss observed in early stages of Alzheimer's disease.

Katrin Sommer

Didaktik der Chemie, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum
email: katrin.sommer@rub.de, <http://www.ruhr-uni-bochum.de/didachem/>

18 von 30

10. Rund um die Gelatine: Nachweise, Herstellung und Eigenschaften

M 12 Enzymatischer Abbau der Gelatine

Wenn die Götter speisen ...

... schmeckt das meist sehr gut und ist gar nicht aufwändig herzustellen (siehe Rezept).



Foto: GME-Gelatine-Manufactures of Europe



Warum geliert Gelatine jedoch nicht mit allen Fruchtsäften? Führen Sie folgenden Versuch mit Gummibärchen durch:

Schülerversuch ⌚ Vorbereitung: 10 min ⌚ Durchführung: 35 min+ mind. 24 h

Chemikalien	Entsorgung	Geräte
☐ Ananasfrucht, frisch		☐ Mixer und Plastikgefäß
☐ 50-80 ml Aceton (F)	B 3	☐ Messer
☐ Essigsäure (w = 96 %) (F)	B 1	☐ Geschirrtuch
☐ dest. Wasser		☐ Trichter
☐ Indikatorpapier		☐ Filterpapier
☐ 2 Gummibärchen		☐ Messzylinder (100 ml)
		☐ 2 Erlenmeyerkolben (250 ml)
		☐ 2 Bechergläser (100 ml)
		☐ Glasstab
		☐ Waage
		☐ Spatel

Vorüberlegung

In der Ananasfrucht ist eine Substanz namens Fruchtbromelain enthalten. Informieren Sie sich mithilfe von Nachschlagewerken oder im Internet über Fruchtbromelain. Notieren Sie Ihre Erkenntnisse!

RAAbits Chemie

10. Rund um die Gelatine: Nachweise, Herstellung und Eigenschaften

19 von 30

Versuchsdurchführung

Gewinnung von Fruchtbromelain:

- Die Ananas wird geschält und in kleinere Stücke zerteilt. Anschließend werden die Ananasstückchen mit einem Mixer püriert. Durch Abgießen durch ein Haarsieb oder ein Geschirrtuch (gut ausdrücken!) erhält man den reinen Ananassaft.
- 50 ml dieses Saftes werden in einem Erlenmeyerkolben mit 50 ml Aceton versetzt. Das Fruchtbromelain fällt als Niederschlag aus. Dieser wird abfiltriert und für den folgenden Versuch verwendet.

Die Reaktion von Fruchtbromelain mit Gelatine:

- In einem Becherglas werden 10 ml Essigsäure mit dest. Wasser versetzt, bis ein pH-Wert von 4,5 erreicht ist (Glasstab, Indikatorpapier). Die Essigsäurelösung wird zur Hälfte in ein zweites Becherglas gegeben.
- In eines der Bechergläser fügt man 0,20 g des selbst hergestellten Fruchtbromelains hinzu (bitte kennzeichnen!), das zweite Becherglas dient als Blindprobe.
- Anschließend gibt man in jedes Becherglas ein Gummibärchen (Hauptinhaltsstoff Gelatine) und lässt beide Bechergläser über einen Zeitraum von 24 Stunden bei Raumtemperatur stehen.

Aufgaben

- Notieren Sie Ihre Beobachtungen!
- Erklären Sie Ihre Beobachtungen mithilfe Ihrer Vorüberlegungen und Ihren Kenntnissen über Gelatine.
- Warum kann man aus Ananassaft und Gelatine keine Götterspeise herstellen?
- Arzneimittel mit Bromelainextrakten werden z.B. zur Behandlung von Blutergüssen eingesetzt. Worin liegt die Wirkung dieser Medikamente?

Roth, D.; Sommer, K.: *Rund um die Gelatine, Nachweise, Herstellung und Eigenschaften*.
In: RAAbits Chemie, Raabe Verlag, Stuttgart 2005, 30 S.

RAAbits Chemie

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	39
Anorganische Chemie 2	39
Organische Chemie 1	41
Organische Chemie 2	42
Physikalische Chemie 1	43
Physikalische Chemie 2	45
Analytische Chemie	45
Theoretische Chemie	49
Technische Chemie	51
Biochemie 1	52
Biochemie 2	53
Didaktik der Chemie	54
 Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB)	 55
Dissertationen an der Fakultät für Chemie 2005	56

Anorganische Chemie 1

- J. T. Chantson, M. V. Varga Falzacappa, S. Crovella, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **690** (2005) 4564-4572. Antibacterial Activities of Ferrocenoyl- and Cobaltocenium-Peptide Bioconjugates.
- S. I. Kirin, D. Wissenbach, N. Metzler-Nolte, *New. J. Chem.* **29** (2005) 1168-1173. Convenient one pot synthesis and solution structure of unsymmetrical 1,n'-disubstituted ferrocene peptides.
- S. I. Kirin, P. Dübon, T. Weyhermüller, E. Bill, N. Metzler-Nolte, *Inorg. Chem.* **44** (2005) 5405-5415. Amino Acid and Peptide Bioconjugates of Copper(II) and Zinc(II) Complexes with a Modified N,N-Bis(2-picolyl)amine Ligand.
- A. Maurer, H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2005) 3207-3210. Synthesis and Electrochemical Characterization of Metallocene-PNA Oligomers.
- F. Noor, A. Wüstholtz, R. Kinscherf, N. Metzler-Nolte, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 2429-2432. A cobaltocenium peptide bioconjugate shows enhanced cellular uptake and nuclear localization. *Angew. Chem.* **117** (2005) 2481-2485. Ein Peptid-Cobaltocenium-Biokonjugat mit verbesserter Aufnahme in Zellen und Anreicherung im Zellkern.
- C. Tönshoff, K. Merz, G. Bucher, *Org. Biomol. Chem.* **3** (2005) 303-308. Azidocryptands-synthesis, structure, and complexation properties.
- R. Pietschnig, K. Merz, *Appl. Organomet. Chem.* **19** (2005) 206-207. Fluoro-bis-isopropyl-(2,4,6-tris-isopropylphenyl)silane, $i\text{-Pr}_2(2,4,6\text{-i-Pr}_3\text{C}_6\text{H}_2)\text{SiF}$.
- M. Driess, J. Aust, K. Merz, *Eur. J. Inorg. Chem.* **5** (2005) 866-871. From dinuclear zirconium(+3)-phosphido complexes $\{[\text{Cp}_2\text{ZrP(H)R}]_2\}$ to the first neutral zirconocene-phosphinidene dimers $[(\text{Cp}_2\text{ZrPR})_2]$ by P-H dehydrogenation.
- R. Pietschnig, K. Merz, S. Schaefer, *Heteroatom Chem.* **16** (2005) 169-174. Synthesis, charge distribution, and dimerization behavior of lithium alkynylselenolates.
- A.P. Milanov, R. Bhakta, M. Winter, K. Merz, A. Devi, *Acta Cryst. C: Crystal Structure Commun.* **C61** (2005) m370-m372. Bis(2-butyl-N,N'-diisopropylamidinato)dichloro-hafnium(IV).
- R. Pietschnig, S. Spirk, F. Belaj, Ferdinand; K. Merz, *Eur. J. Inorg. Chem.* **11** (2005) 2151-2155. Synthesis and structure of a 2,4-unsubstituted cis/trans-1,3-disilacyclobutane by dehydrofluorination of a highly hindered fluorosilane.
- M. Driess, N. Muresan, K. Merz, M. Paech, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 6734-6737. Formation of a bowl-shaped, pentacyclic phosphonium cage by methylation of a nucleophilic phosphinidene.
- M. Driess, N. Muresan, K. Merz, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 6738-6741. A novel type of pentacoordinate silicon complexes and unusual ligand coupling by intramolecular electron transfer.
- G. Dyker, M. Mastalerz, I. Mueller, K. Merz, K. Koppe, *Eur. J. Org. Chem.* **23** (2005) 4963-4966. Solvent-dependent pseudopolymorphism of tripyridoxycalix[4]arene: Cone versus partial-cone conformation.

Anorganische Chemie 2

- A. Devi, R. Schmid, J. Muller, R. A. Fischer, *Topics in Organometallic Chemistry* (Vol. Ed. R. A. Fischer) **9** (2005) 49-80. Materials chemistry of group 13 nitrides.

- Y. Kim, A. Baunemann, H. Parala, A. Devi, R. A. Fischer, *Chem. Vap. Dep.* **11** (2005) 294-297. Metal-organic CVD of conductive and crystalline hafnium nitride films.
- M. Mukinovic, G. Brenner, J. Khanderi, S. Spoellmann, R. A. Fischer, M. Tafipolsky, T. Cadenbach, R. Schmid, *Chem. Vap. Dep.* **11** (2005) 1306-316. A multiscale simulation approach for the MOCVD of GaN using a single-molecule precursor in a vertical stagnation flow reactor.
- A. Baunemann, D. Rische, A. Milanov, Y. Kim, M. Winter, C. Gemel, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2005) 3051-3055. Tantalum complexes with all nitrogen coordination sphere: mixed amido-, imido-, guanidinato complexes of tantalum and their thermal behaviour.
- S. Hermes, F. Schröder, R. Chelmowski, C. Wöll, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 13744-13745. Selective Nucleation and Growth of Metal-Organic Open Framework Thin Films on Patterned COOH/CF₃-Terminated Self-Assembled Monolayers on Au(111).
- S. Hermes, M. Schröter, R. Schmid, L. Khodeir, M. Muhler, A. Tissler, R. W. Fischer, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **44** (2005) 6237-6241. Metal@MOF: Loading of highly porous coordination polymers host lattices by metal organic chemical vapor deposition.
- E. Maile, R. A. Fischer, *Chem. Vap. Dep.* **11** (2005) 409-414. MOCVD of the cubic zinc nitride phase, Zn₃N₂, using Zn[N(SiMe₃)₂]₂ and ammonia as precursors.
- T. Cadenbach, C. Gemel, R. Schmid, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 17068-17078. Mechanistic Insights into an Unprecedented C-C Bond Activation on a Rh/Ga Bimetallic Complex: A Combined Experimental/Computational Approach.
- Buchin, T. Steinke, C. Gemel, T. Cadenbach, R. A. Fischer, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **631** (2005) 2756-2762. Synthesis and Characterization of the Novel Al^I Compound Al(C₅Me₄Ph): Comparison of the Coordination Chemistry of Al(C₅Me₅) and Al(C₅Me₄Ph) at d¹⁰ Metal Centers.
- T. Steinke, M. Cokoja, C. Gemel, A. Kempter, A. Krapp, G. Frenking, U. Zenneck, R. A. Fischer, *Angew. Chem.* **117** (2005) 3003-3007. C-H-aktivierte Isomere von [M(AlCp*)₅] (M=Fe, Ru).
- T. Steinke, C. Gemel, M. Winter, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **11** (2005) 1636-1646. The Clusters [M_a(ECp*)_b] (M=Pd, Pt; E=Al, Ga, In): Structures, Fluxionality, and Ligand Exchange Reaction.
- H. Liang, W. Xia, H. Soltani-Ahmadi, O. Schluter, R. A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Commun.* (2005), 282-284. The two-step chemical vapor deposition of Pd(allyl)Cp as an atom-efficient route to synthesize highly dispersed palladium nanoparticles on carbon nanofibers.
- A. Kempter, C. Gemel, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **44** (2005) 163-165. Insertion of Ga(DDP) into the Au-Cl bond of (PPh₃)AuCl: A first structurally characterized Au-Ga bond.
- F. Hipler, R. A. Fischer, J. Müller, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** (2005) 731-737. Matrix-isolation pyrolysis investigation of mercapto-functionalized 1,3,4-thiadiazoles: thermal stability of thiadiazole lubricant additives.
- M. Cokoja, C. Gemel, T. Steinke, F. Schroeder, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2005) 44-54. Insertion reactions of GaCp*, InCp* and In[C(SiMe₃)₃] into the Ru-Cl bonds of [(p-cymene)Ru^{II}Cl₂]₂ and [Cp*Ru^{II}Cl]₄.

- T. Steinke, C. Gemel, M. Cokoja, M. Winter, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2005) 55-62. Novel RhCp*/GaCp* and RhCp*/InCp* cluster complexes
- M. Tafipolsky, R. Schmid, *J. Comput. Chem.* **26** (2005) 1579-1591. Calculations of rotational partition functions by an efficient Monte Carlo importance sampling technique.
- M. Tamm, A. Kunst, T. Bannenberg, E. Herdtweck, R. Schmid, *Organomet.* **24(13)** (2005) 3163-3171. Cycloheptatrienyl-Cyclopentadienyl-Zirconium Sandwich Complexes: Structure and Bonding.
- R. Schmid, D. Basting, *J. Phys. Chem. A* **109(11)** (2005) 2623-2630. Gas Phase Chemistry in Gallium Nitride CVD: Theoretical Determination of the Arrhenius Parameters for the First Ga-C Bond Homolysis of Trimethylgallium.
- Milanov, R. Bhakta, M. Winter, K. Merz, A. Devi, *Acta Cryst. C* **61** (2005) m370. Synthesis and structure of Bis(2-butyl-N,N'-diisopropylamidinato)dichloro-hafnium(IV)
- R. Thomas, S. Regnery, P. Ehrhart, R. Waser, R. Bhakta, U. Patil, A. Devi, *Ferroelectrics* **327** (2005) 111. High-k dielectric materials by metalorganic chemical vapor deposition: Growth and characterization
- R. Bhakta, E. Gemel, J. Müller, A. Devi, *Proc. Electrochem. Soc.* **9** (2005) 312. Gas phase decomposition studies on the MOCVD precursor [Ti(OC₃H₇)₄] using matrix-isolation FTIR spectroscopy
- C. Kang, J. H. Lee, D. Y. Jung, J. H. Boo, A. Devi, R. Bhakta, R. A. Fischer, S. H. Hong, *Proc. Electrochem. Soc.* **9** (2005) 320. MOCVD of TiO₂ thin films on OTS modified Si(100) substrates by micro-contact printing: Selective growth and new characterisation technique with micro-Raman spectroscopy
- C. Kang, A. Baunemann, Y. Kim, J. H. Lee, D. Y. Jung, A. Devi, H. Parala, R. A. Fischer, J. H. Boo, *Proc. Electrochem. Soc.* **9** (2005) 326. Selective growth of tantalum nitride and hafnium nitride thin films on OTS patterned Si(100) substrates by MOCVD method
- U. Patil, H.-W. Becker, M. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *Proc. Electrochem. Soc.* **9** (2005) 913. Volatile single source precursors for the MOCVD of metal silicate thin films.
- R. Thomas, U. Patil, P. Ehrhart, A. Devi, R. Waser, *Proc. Electrochem. Soc.* **9** (2005) 944. Zirconium dioxide thin films for high-k applications by MOCVD from novel mononuclear precursors.
- A. Devi, R. Bhakta and A. Milanov, Metalorganic precursors for CVD and related techniques (ALD)"; *German Patent*: DE 10 2005 030 9151 and *US Patents*: US 60/696,072, US 60/730,906 – (2005).

Organische Chemie 1

- S. A. Ivanov, S. Vauléon, S. Müller, *FEBS J.* **272** (2005) 4464-4474. Efficient RNA ligation by reverse-joined hairpin ribozymes and engineering of twin ribozymes consisting of conventional and reverse-joined hairpin ribozyme units.
- S. Vauléon, S. A. Ivanov, S. Gwiazda, S. Müller, *ChemBioChem* **6** (2005) 2158-2162. Site-specific fluorescent and affinity labeling of RNA mediated by an engineered twin ribozyme.

Organische Chemie 2

- K. Schroeder, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2005) 496-504. Sterically Hindered Carbonyl O-oxides and Dioxiranes-(6-tert-Butyl-2,3,4- trimethylphenyl) phenylcarbonyl O-oxide and (6-tert-Butyl-2,3,4-trimethylphenyl)phenyldioxirane.
- A. Sánchez-García, M. Studentkowski, L. A. Montero, W. Sander, *ChemPhysChem* 6 (2005) 618-624. Non-Covalent Complexes Between Dimethyl Ether and Formic Acid-an Ab initio and Matrix isolation Study.
- M. Gantenberg, W. Sander, *Spectrochim. Acta A* (2005) 902-909. Aggregation of Acetic and Propionic Acid in Argon Matrices-a Matrix Isolation and Computational Study.
- G. Bucher, M. L. G. Borst, A. W. Ehlers, K. Lammertsma, S. Ceola, M. Huber, D. Grote, W. Sander, *Angew. Chem.* 117 (2005) 3353-3356. *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 3289-3293. Infrared, UV/Vis, and W-band EPR Spectroscopic Characterization and Photochemistry of Triplet Mesitylphosphinidene.
- C. Lu, G. Bucher, W. Sander, *ChemPhysChem* 6 (2005) 2607-2618. Time-Resolved and Steady-State Studies on the Photochemistry of Oxidized and Reduced Lipoic Acid.
- C. Kolano, G. Bucher, O. Schade, D. Grote, W. Sander, *J. Org. Chem.* **70** (2005) 6609-6615. Generation and Characterization of the Selenocysteiny radical: Direct Evidence from TR-UV/Vis, TR-EPR and TR-FTIR Spectroscopy.
- S. Venkataramani, M. Winkler, W. Sander, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 6306-6311. 1,2,3-Tridehydrobenzene.
- G. Bucher, M. Kühn, J. F. Roelcke, *Z. Naturforsch.* **60b** (2005) 1-6. Peroxides and Chromium Compounds– the Ether Test for Identity
- C. Tönshoff, K. Merz and G. Bucher, *Org. Biomol. Chem.* **3** (2005) 303-308. Azidocryptands – Synthesis, Structure, and Complexation Properties
- G. Bucher, C. Tönshoff, A. Nicolaides, *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 6883-6892. Photochemistry of an Azido-Functionalized Cryptand: Controlling the Reactivity of an Extremely Long-Lived Singlet Aryl Nitrene by Complexation to Alkali Cations
- M. Schmittel, A. A. Mahajan, G. Bucher, *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 5324-5325. Photochemical Myers-Saito and C²-C⁶ Cyclizations of Enyne-Allenes – Direct Detection of Intermediates in Solution
- G. Bucher, C. Lu, W. Sander, *ChemPhysChem* 6 (2005), 2607-2618. The Photochemistry of Lipoic Acid: Photoionization and Observation of a Triplet Excited State of a Disulfide
- H. F. Bettinger, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 6922-6924. The Reactivity of Defects at the Sidewalls of Single-Walled Carbon Nanotubes: The Stone-Wales Defect.
- H. F. Bettinger, *ChemPhysChem.* **6** (2005) 1169-1174. How Good is Fluorine as a Hydrogen Bond Acceptor in Fluorinated Single-Walled Carbon Nanotubes?
- H. F. Bettinger, H. Peng, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 23218-23224. Thermolysis of Fluorinated Single-Walled Carbon Nanotubes: Identification of Gaseous Decomposition Products by Matrix Isolation Infrared Spectroscopy.
- H. F. Bettinger, *Chem. Commun.* (2005) 2756-2757. Generation of Iodobenzoborirene, a Boraaromatic Cyclopropabenzene Derivative.
- G. Dyker, D. Hildebrandt, *J. Org. Chem.* **70** (2005) 6093-6096. Total Synthesis of Heliophenanthrone.

- G. Dyker, M. Mastalerz, I. Müller, *Eur. J. Org. Chem.* (2005) 3801-3812. Electron-rich Cavitands *via* Fourfold Sonogashira Cross-Coupling Reaction of Calix[4]arenes and Bromopyridines-Effect of the Nitrogen Position on Complexation Abilities
- G. Dyker, M. Mastalerz, I. M. Müller, K. Merz, K. Koppe, *Eur. J. Org. Chem.* (2005) 4963-4966. Solvent Dependent Pseudopolymorphism of Trispyridoxycalix[4]arene: *cone-* versus *partial-cone* Conformation.
- G. Dyker, in: Handbook of C-H Transformations, *Ed.* G. Dyker, Wiley-VCH (2005) 137-141. Comparison of Classical and Fancy Catalysts in Friedel-Crafts-Type Reactions.
- G. Dyker, in: Handbook of C-H Transformations, *Ed.* G. Dyker, Wiley-VCH (2005) 235-238. Palladium-Catalyzed Arylation of Cyclopentadienyl Compounds.
- G. Dyker, in: Handbook of C-H Transformations, *Ed.* G. Dyker, Wiley-VCH (2005) 427-430. Heck-Type Reactions with Migrating Double Bond.
- G. Dyker, in: Handbook of C-H Transformations, *Ed.* G. Dyker, Wiley-VCH (2005) 465-469. CH Transformation at Functionalized Alkanes *via* Palladacycles.
- M. Acet, C. Mayer, O. Muth, A. Terheiden, G. Dyker, *J. Crystal Growth* **285** (2005) 365-371. Formation of extended ordered monolayers of FePt nanoparticles.

Physikalische Chemie 1

- S. Söhnchen, K. Hänel, A. Birkner, G. Witte, Ch. Wöll, *Chem. Mat.* **17** (2005) 5297-5304. Molecular beam deposition of perylene on copper: formation of ordered phases
- A. Niklewski, T. Strunskus, G. Witte, Ch. Wöll, *Chem. Mat.* **17**, 4 (2005) 861-868. Metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD) of palladium: spectroscopic study of cyclopentadienyl-allyl-palladium deposition on a palladium substrate
- M. Kurtz, J. Strunk, O. Hinrichsen, M. Muhler, K. Fink, B. Meyer, Ch. Wöll, *Angewandte Chemie* **117** (2005) 2850-2854. Aktive Zentren an Oxidoberflächen: Die ZnO-katalysierte Methanolsynthese aus CO und H₂
M. Kurtz, J. Strunk, O. Hinrichsen, M. Muhler, K. Fink, B. Meyer, Ch. Wöll, *Angewandte Chemie, Int. Ed.* **44** (2005) 2790-2794. Active sites on oxide surfaces: ZnO-catalyzed synthesis of methanol from CO and H₂
- S. Müllegger, S. Mitsche, P. Pölt, K. Hänel, A. Birkner, C. Wöll, A. Winkler, *Thin Solid Films* **484** (2005) 408-414. Substrate structure dependence of the growth modes of p-quaterphenyl thin films on gold
- G. Witte, S. Lukas, P.S. Bagus, Ch. Wöll, *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 263502. Vacuum level alignment at organic/metal junctions: "Cushion" effect and the interface dipole
- O. Yu. Khyzhun, T. Strunskus, W. Grünert, Ch. Wöll, *J. Electr. Spectrosc.* **149** (2005) 45-50. Valence band electronic structure of V₂O₅ as determined by resonant soft X-ray emission spectroscopy
- N. Lin, D. Payer, A. Dmitriev, T. Strunskus, Ch. Wöll, J.V. Barth, K. Kern, *Angew. Chemie, Intern. Ed.*, **44** (2005) 1488-1491. Two-dimensional adatom gas bestowing dynamic heterogeneity on surfaces
- P. Cyganik, M. Buck, J. D. E. T. Wilton-Ely, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. B* **109** **21** (2005) 10902-10908. Stress in self-assembled monolayers: the case of ω -biphenyl-alkane thiols on Au(111)

- Q.-H. Wu, M. Gunia, T. Strunskus, G. Witte, M. Muhler, Ch. Wöll, *Chem. Vapor Dep.* **11** (2005) 355-361. Deposition of palladium from cyclopentadienyl-allyl-palladium precursor on differently pretreated Si-based substrates: The role of surface Si-OH and Si-H species studied by x-ray photoelectron spectroscopy
- A. Käfer, L. Ruppel, G. Witte, Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 166602-1-166602-4. Role of molecular conformations in rubrene thin film growth.
- O.P. Tkachenko, K.V. Klementiev, M.W.E. van den Berg, N. Koc, M. Bandyopadhyay, A. Birkner, Ch. Wöll, H. Gies, W. Grünert, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 20979-20988. The reduction of copper in porous matrices I. stepwise and autocatalytic reduction routes
- Y. Wang, B. Meyer, X. Yin, M. Kunat, D. Langenberg, F. Traeger, A. Birkner und Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 266104. Hydrogen Induced Metallicity on the ZnO (10 $\bar{1}$ 0) Surface
- Ch. Grunwald, J. Kuhlmann, Ch. Wöll, *Langmuir* **21** (2005) 9017-9019. In deuterated water the unspecific adsorption of proteins is significantly slowed down: Results of an SPR-study using model organic surfaces
- S. Hermes, F. Schröder, R. Chelmowski, Ch. Wöll, R.A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **127** 40 (2005) 13744-13745. Selective nucleation and growth of metal-organic open framework thin films on patterned COOH/CF₃ terminated self assembled monolayers on Au(111)
- P.S. Bagus, K. Hermann, Ch. Wöll, *J. Chem. Phys.* **123** (2005) 184109. The interaction of C₆H₆ and C₆H₁₂ with Noble Metal Surfaces: Electronic Level alignment and the Origin of the Interface dipole
- W. Xia, D.Su, A. Birkner, L. Ruppel, Y. Wang, Ch. Wöll, J. Qian, Ch. Liang, G. Marginean, W.Brandl, M. Muhler, *Chem. Mater.* **17** (2005) 5737-5742. Chemical Vapor Deposition and Synthesis on Carbon Nanofibers: Sintering of Ferrocene-Derived Supported Iron Nanoparticles and the Catalytic Growth of Secondary Carbon Nanofibers
- D. Käfer and G. Witte, *PCCP* **7** (2005) 2850-2853. Growth of crystalline rubrene films with enhanced stability
- J. K. Praefcke, C. Herrmann, *Biospektrum* **11** (2005) 44-47. Isotherme Titrationskalorimetrie (ITC) zur Charakterisierung biomolekularer Wechselwirkungen.
- M. Spoerner, A. Nuehs, P. Ganser, C. Herrmann, A. Wittinghofer, H. R. Kalbitzer, *Biochemistry* **44** (2005) 2225-2236. Conformational states of Ras complexed with the GTP-analogs GppNHp or GppCH₂p: implications for the interaction with effector proteins.
- S. Wohlgemuth, C. Kiel, A. Krämer, L. Serrano, A. Wittinghofer, C. Herrmann, *J. Mol. Biol.* **348** (2005) 741-758. Recognizing and Defining true Ras Binding Domains I: Biochemical Analysis.
- S. Kunzelmann, G. J. K. Praefcke, C. Herrmann, *Methods in Enzymology* **404** (2005) 512-527. Nucleotide binding and self-stimulated GTPase activity of human Guanylate-Binding Protein 1 (hGBP1).
- Pautsch, M. Vogelsgesang, J. Tränkle, C. Herrmann, K. Aktories, *EMBO J.* **24** (2005) 3670-3680. Crystal structure of the C3bot-RalA complex reveals a novel type of action of a bacterial exoenzyme.
- J. H. Tränkle, C. Herrmann, in: „*Protein-Protein Interactions: A Molecular Cloning Manual*” (2nd Edition, E. A. Golemis & P. D. Adams, eds.), Cold Spring Harbor Laboratory Press, 2005, 229-251. Calorimetry based approaches in analysis of protein: protein interactions.

Physikalische Chemie 2

- K. von Haeften, M. Havenith, *American Scientific Publishers* (2005) Electronic Excitations in Liquefied Rare Gases, Editors W.F. Schmidt and E. Illenberger . He droplets: A fluid with unusual properties
- R. Schiwon, G. Schwaab, E. Bründermann, M. Havenith, *Appl. Phys. Lett.* **86** (2005) 201116. also selected for: *Vir. J. Bio. Phys. Res.* **9(10)** (2005). THz cavity enhanced attenuated total reflection spectroscopy
- Bergner, U. Heugen, E. Bründermann, G. Schwaab, D. R. Chamberlin, E. E. Haller, M. Havenith, *Rev. Sci. Instr.* **76** 1 (2005) also selected for: *Vir. J. Bio. Phys.* **9 (11)** (2005). New p-Ge THz spectrometer for the study of solutions: THz absorption spectroscopy of water
- M. Havenith, G. Schwaab, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* **219** (2005) 1053. Attacking a small beast: Ar-CO, a Prototype for Intermolecular Forces
- M. Havenith, Handbook of Hydrogen Transfer, Volume 1: Physical and chemical aspects of hydrogen transfer, Editors: Hynes und Limbach, Wiley-VCH. Coherent proton tunneling in hydrogen bonds of isolated molecules: aspects 2
- K. von Haeften, A. Metzelthin, S. Rudolph, V. Staemmler, M. Havenith, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 21531. High resolution spectroscopy of NO in helium droplets: A prototype for open shell molecular interactions in a quantum solvent
- J.-S. Samson, G. Wollny, A. Bergner, A. Hecker, G. Schwaab, A. D. Wieck, E. Bründermann, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys* **8** (2006) 753 Online publication 22. November 2005. Setup of a scanning near field microscope (SNIM): Imaging of sub-surface nano-structures in gallium-doped silicon
- S. Ebbinghaus, K. Schröck, J.C. Schauer, E. Bründermann, M. Heyden, G. Schwaab, M. Böke, J. Winter, M. Tani, M. Havenith, *Plasma Sources Science and Technology* **15** (2006) 72 Online publication 21. December 2005. THz time domain spectroscopy as a new tool for plasma diagnostics
- H. Weingärtner *Diffusion in Condensed Matter* (P. Heitjans and J. Kärger, eds.) Springer, Berlin Chapter **14** 2005 555-578. The molecular description of mutual diffusion processes in liquid mixtures.
- H. Weingärtner, E. U. Franck, *Angew. Chem.* **117** (2005) 2730-2752. Überkritisches Wasser als Lösungsmittel. *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 2672-2692. Supercritical water as a solvent.
- A. Wakai, A. Oleinikova, M. Ott, H. Weingärtner, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 17028-17030. How polar are ionic liquids? Determination of the static dielectric constant of an imidazolium-based ionic liquid by microwave dielectric spectroscopy.
- H. Weingärtner, U. Klask, G.M. Schneider *Z. Phys. Chem.* **219** (2005) 1261-1271. Solute diffusion in supercritical solvents – Diffusion coefficients D_{12}^{∞} and diffusion – viscosity relationship for the aromatic model solute biphenyl in carbon dioxide.

Analytische Chemie

- T. van Almsick, A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **631** (2005) 19-20. $[\text{Ge}_4\text{O}_6\text{Te}_4]^{4-}$, an adamantanoid oxotellurido germanate(IV) with a central Ge_4O_6 core.

- T. van Almsick, A. Loose, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **631** (2005) 21-23. Solvothermal synthesis and structure of the $[\text{Ge}_2\text{Se}_7]^{4-}$ anion in $(\text{enH}_2)[\{\text{Mn}(\text{en})_2(\text{enH})\}_2(\mu\text{-en})]_2(\text{Ge}_2\text{Se}_7)_2$ and $[\text{Mn}(\text{dien})_2]_2\text{Ge}_2\text{Se}_7$.
- M. Heller, O. Teichert, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **631** (2005) 709-714. Copper(I) pseudohalide coordination polymers containing macrocyclic methylcycloarsoxane $(\text{CH}_3\text{AsO})_n$ ($n = 4, 5$) or 1,7-dithia-18-crown-6 bridging units.
- A. Ray, D. Maiti, M. Ali, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Indian J. Chem.* **A44** (2005) 261-264. Synthesis and structural characterization of a novel homo-binuclear complex $[\text{Cu}(\text{dinemac})(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Cu}(\text{dipic})_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Assembly of discrete cationic and anionic components in a 1D chain through H bonding.
- T. Koley, R. Wortmann, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **E61** (2005) o1090-o1092. 4-Phenylpyridinium betaine of squaric acid.
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **631** (2005) 1746-1748. Methanolothermal synthesis and structures of the quaternary Group 14-Group 15 caesium selenidometalate $\text{Cs}_3\text{AsGeSe}_5$ and $\text{Cs}_4\text{Ge}_2\text{Se}_6$.
- S. Gencaslan, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2005) 3840-3849. Bifunctional bioorganometallic iridium(III)-platinum(II) complexes incorporating both intercalative and covalent DNA binding capabilities.
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) i225 – i227. Tetraesium strontium catena-nonaselenidotristannate(IV).
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) i240 – i242. Hexaesium nonaselenidotetraantimonate(III) hemihydrate.
- A. Chakraborty, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, P. Banerjee, *Polyhedron* **24** (2005) 771-776. Self-Assembly of $[\text{M}(\text{Hida})_2]$ (Hida = iminodiacetate; M = Pd and Pt) in a 2D network via extensive hydrogen bonded interactions. Synthesis, X-ray crystal structure, spectral and thermal studies.
- P. Gupta, A. Das, F. Basuli, A. Casteneiras, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, S. Bhattacharya, *Inorg. Chem.* **44** (2005) 2081-2088. Variable coordination mode of chloranilic acid. Synthesis, structure and electrochemical properties of some osmium complexes.
- A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) m2234 – m2236. Bis[tris(ethylenediamine)manganese(II)](di- μ -tellurido)bis[ditelluridostannate(IV)] (monoclinic modification).
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) m2348 – m2350. Bis(trimethylammonium) decaselenidotetragermanatomanganate(II).
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) m2431 – m2433. Bis[(1,4,7,10,13,16-hexaoxocyclooctadecane)caesium(I)] di- μ_2 -diselenido-bis[selenidoarsenate(III)].
- A. Ray, D. Maiti, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, S. Mondal, M. Mukherjee, S. Gao, M. Ali, *Inorg. Chim. Acta* **358** (2005) 3471 – 3477. Synthesis and characterization of two novel isostructural polymeric 1D mono-halo-bridged octahedral copper(II) chains with a diaza diamine ligand.
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) m2661 – m2663. Caesium dimethyldiselenidoarsenate(V).
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) i280 – i281. Tricaesium tetraselenidoarsenate(V) monohydrate.

- T. Kolev, M. Spittler, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **E61** (2005) o4292 – o4294. 1-(Aminocarbonyl)ethylammonium hydrogensquarate monohydrate.
- B. B. Ivanova, M. G. Arnaudov, H. Mayer-Figge, *Polyhedron* **24** (2005) 1624 – 1630. Molecular spectral analysis and crystal structure of the 4-aminopyridinium tetrachloropalladate(II) complex salt.
- B. B. Ivanova, H. Mayer-Figge, *J. Coord. Chem.* **58** (2005) 653 – 659. Crystal structure and solid state IR-LD analysis of a mononuclear Cu(II) complex of 4-aminopyridine.
- T. van Almsick, *Acta Cryst.* **E61** (2005) o4229 – o4230. Trimethylarsonium iodide.
- S. Borgmann, G. Hartwich, A. Schulte, W. Schuhmann, in „*Perspectives in Bioanalysis, Vol. 1. Electrochemistry of nucleic acids and proteins. Towards electrochemical sensors for genomics and proteomics*” (E. Palecek, F. Scheller, J. Wang, eds.) Elsevier, Amsterdam, 2005, 599-655. Chapter 17. Amperometric enzyme sensors based on direct and mediated electron transfer.
- S. Borgmann, W. Schuhmann, I. Radtke, R. Heumann, *BioForum* **28**(12) (2005) 24-26. Signalpfade in der Tumorangione. Elektrochemische Robotik zur Untersuchung der Stickstoffmonoxid Ausschüttung aus Blutgefäßen.
- Wartelle, W. Schuhmann, A. Blöchl, F. Bedioui, *Electrochim. Acta* **50** (2005) 4988-4994. Integrated compact biocompatible hydrogel-based amperometric sensing device for easy screening of drugs involved in nitric oxide production by adherent cultured cells
- S. Alpeeva, A. Vilkanauskite, B. Ngounou, E. Csöregi, I. Yu. Sakharov, M. Gonchar, W. Schuhmann *Microchim. Acta* **152** (2005) 21-27. Bi-enzyme alcohol biosensors based on genetically engineered alcohol oxidase and different peroxidases.
- M. Etienne, J. Oni, A. Schulte, G. Hartwich, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **50** (2005) 5001-5008. Solvent-free electrodeposition of polypyrrole as a base for the preparation of carbonised platinum microelectrodes.
- T. Erichsen, S. Reiter, W. Märkle, C. Tittel, V. Ryabova, E. M. Bensen, G. Jung, B. Speiser, W. Schuhmann, *Rev. Sci. Instr.* **76** (2005) 062204. Combinatorial microelectrochemistry. Development and evaluation of an electrochemical robotic system.
- R. Charan Reddy, F. Turcu, A. Schulte, A. M. Kayastha, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **77** (2005) 5063-5067. Fabrication of a potentiometric/amperometric bifunctional enzyme microbiosensor.
- V. Ryabova, A. Schulte, T. Erichsen, W. Schuhmann *The Analyst* **130** (2005) 1245-1252. Combinatorial screening of a library of metalloporphyrins for electrochemical nitric oxide sensors.
- G. Gazaryan, L. Gorton, T. Ruzgas, E. Csöregi, W. Schuhmann, L. M. Lagrimini, D. M. Khushpul'yan, V. I. Tishkov, *J. Anal. Chem.* **60** (2005) 558-566. Tobacco peroxidase as a new reagent for amperometric biosensors
- N. Diab, J. Oni, W. Schuhmann, *Bioelectrochem.* **66** (2005) 105-110. Electrochemical nitric oxide sensor preparation: A comparison of two electrochemical methods of electrode surface modification.
- J. Castillo, A. Blöchl, S. Denninson, W. Schuhmann, E. Csöregi, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 2116-2119. Glutamate detection from nerve cells using a planar electrodes array integrated in a microtiter plate.
- I. Turyan, M. Etienne, W. Schuhmann, D. Mandler, *Electroanalysis* **17** (2005) 538-542. Improved resolution of local metal deposition by integrating the non-optical shear force with the scanning electrochemical microscopy.

- K. Schröck, A. Schulte, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **17** (2005) 489-494. Visualisation of complex reaction profiles with potentiometric and amperometric microsensors
- J. Oni, N. Diab, S. Reiter, W. Schuhmann, *Sensors & Actuators B* **105** (2005) 208-213. Metallophthalocyanine-modified glassy carbon electrodes: Effects of film formation conditions on electrocatalytic activity towards the oxidation of nitric oxide
- K. Eckhard, O. Schlüter, V. Hagen, B. Wehner, T. Erichsen, W. Schuhmann, M. Muhler, *Applied Catalysis A: General* **281** (2005) 115-120. Spatially resolved mass spectrometry as a fast semi-quantitative tool for testing heterogeneous catalyst libraries under reducing stagnant-point flow conditions
- F. Turcu, G. Hartwich, D. Schäfer, W. Schuhmann *Macromolecular Rapid Communication* **26** (2005) 325-330. Ink-jet microdispensing for the formation of gradients of immobilised enzyme activity
- J. Castillo, S. Isik, A. Blöchl, N. Pereira-Roderigues, F. Bedioui, E. Csöregi, W. Schuhmann, J. Oni, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 1559-1565. Simultaneous detection of the release of glutamate and nitric oxide from adherently growing cells using an array of glutamate and nitric oxide selective electrodes
- S. Isik, L. Berdondini, J. Oni, A. Blöchl, M. Koudelka-Hep, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 1566-1572. Cell-compatible array of three-dimensional tip electrodes for the detection of nitric oxide release
- O. Smutok, G. Gayda, M. Gonchar, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 1285-1290. A novel L-lactate-selective biosensor based on flavocytochrome b₂ from methylotrophic yeast *Hansenula polymorpha*.
- P. Zinn, *J. Chem. Inf. Model.* **45** (2005) 880-887. Adaptive Multicomponent Analysis by Genetic Algorithms.
- I. Müller, D. Möller, C. A. Schalley; *Angew. Chem.* **117** (2005) 485 – 488. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **44** (2005) 480 – 484. Rational Design of Tightly Closed Coordination Tetrahedra Stable in the Solid State, in Solution and in the Gas Phase.
- I. M. Müller, S. Oczko; *Z. Anorg. Allg. Chem.* **631** (2005) 110 – 114. Ein- und zweikernige Übergangsmetallkomplexe mit Methylcycloarsoxan
- I. M. Müller, D. Möller; *Eur. J. Inorg. Chem.* (2005) 257 – 263. A New Ligand for the Formation of Triangular Building Blocks in Supramolecular Chemistry.
- I. M. Müller, D. Möller, K. Föcker; *Chem. Eur. J.* **11** (2005) 3318 – 3324. From a Monomer to a Protein-Sized and Doughnut-Shaped Coordination Oligomer – the Influence of Side Chains of C₃-Symmetric Ligands in the Supramolecular Chemistry.
- I. M. Müller, D. Möller; *Angew. Chem.* **117** (2005) 3029 – 3033. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* (2005) **44** 2969 – 2973; Rational Design of a Coordination Cage with Trigonal Bipyramidal Shape, Formed by Thirty Three Building Units
- G. Dyker, M. Mastalerz, I. M. Müller; *Eur. J. Org. Chem.* (2005) 3801 – 3812. Electron-rich Cavitands *via* Fourfold Sonogashira Cross-Coupling Reaction of Calix[4]arenes and Bromopyridines-Effect of the Nitrogen Position on Complexation Abilities
- G. Dyker, M. Mastalerz, I. M. Müller, K. Merz, K. Koppe; *Eur. J. Org. Chem.* (2005) 4963 – 4966. Solvent dependent pseudopolymorphism of Trispyridoxycalix[4]arene: *cone-* vs *partial-cone* conformation
- Raid J. Abdel-Jalil, W. Voelter, R. Stoll. *Tetrahedron Letters* **46** (2005) 1725-1726. Microwave-assisted synthesis of 1-aryl-3-acetyl-1,4,5,6-tetrahydrobenzimidazo[1,2-*d*][1,2,4]triazine: first example of a novel ring system.

Theoretische Chemie

- M. Benoit and D. Marx, *ChemPhysChem (Communication)* **6** (2005) 1738-1741. The Shapes of Protons in Hydrogen Bonds Depend on the Bond Length.
- H. Langer, N. L. Doltsinis, and D. Marx, *ChemPhysChem (Communication)* **6** (2005) 1734-1737. Excited-State Dynamics and Coupled Proton-Electron Transfer of Guanine: From the Gas Phase via Microsolvation to Aqueous Solution.
- M. Konopka, R. Rousseau, I. Stich, and D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 096102. Electronic Origin of Disorder and Diffusion at a Molecule-Metal Interface: Self-Assembled Monolayers of CH₃S on Cu(111).
- O. Asvany, P. Kumar P, B. Redlich, I. Hegemann, S. Schlemmer, and D. Marx, *Science* **309** (2005) 1219-1222. Understanding the Infrared Spectrum of Bare CH₅⁺, published online 30 June 2005 [DOI:10.1126/science.1113729]. in ScienceXpress Reports ("providing rapid electronic publication of selected Science papers based on timeliness and importance of the research"); see also coverage in the media: S. Borman: Chemistry Highlights 2005. *Chem. & Eng. News* **83(51)**, 15-20, (2005). S. Borman: Protonated Methane Probed: Researchers obtain the first broad-frequency infrared spectrum of the CH₅⁺ carbocation, *Chem. & Eng. News* **83(30)**, 45-48, (2005). G. Niedner-Schatteburg: Im Brennpunkt: Ständig in Bewegung, *Physik Journal* **4(10)**, 18-19 (2005).
- M. Stubbs and D. Marx, *Chem. Eur. J.* **11** (2005) 2651-2659. Aspects of Glycosidic Bond Formation in Aqueous Solution: Chemical Bonding and the Role of Water.
- R. L. Markwick, N. L. Doltsinis, and D. Marx, *J. Chem. Phys.* **122** (2005) 054112. Targeted Car-Parrinello molecular dynamics: Elucidating double proton transfer in formic acid dimer.
- R. Asher, N. L. Doltsinis, and M. Kaupp, *Magn. Reson. Chem.* **43** (2005) S237-S247. Extended Car-Parrinello molecular dynamics and electronic g-tensors study of benzosemiquinone radical anion.
- N. L. Doltsinis and K. Fink, *J. Chem. Phys.* **122** (2005) 087101. Comment on "Excitations in photoactive molecules from quantum Monte Carlo" [*J. Chem. Phys.* **121** (2004) 5836].
- T. V. Gerya, W. V. Maresch, M. Burchard, V. Zakhartchouk, N. L. Doltsinis, and T. Fockenberg, *Eur. J. Mineral.* **17** (2005) 269-283. Thermodynamic modeling of quartz solubility and speciation of silica in aqueous fluid up to 1300°C and 20 kbar based on the chain reaction formalism.
- Y. Wang, B. Meyer, X. Yin, M. Kunat, D. Langenberg, F. Traeger, A. Birkner, and Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 266104. Hydrogen Induced Metallicity on the ZnO(10-10) Surface.
- O. Dulub, B. Meyer, and U. Diebold *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 136101. Observation of the Dynamical Change in a Water Monolayer Adsorbed on a ZnO Surface.
- M. Kurtz, J. Strunk, O. Hinrichsen, M. Muhler, K. Fink, B. Meyer, and Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 2790-2794. Active Sites on Oxide Surfaces: ZnO-Catalyzed Synthesis of Methanol from CO and H₂. Aktive Zentren an Oxidoberflächen: Die ZnO-katalysierte Methanolsynthese aus CO und H₂. *Angew. Chem.* **117** (2005) 2850-2854.
- N. L. Doltsinis and D. S. Kosov, *J. Chem. Phys.* **122** (2005) 144101. Plane wave/pseudopotential implementation of excited state gradients in density functional linear response theory: A new route via implicit differentiation.
- W. Andreoni, D. Marx, and M. Sprik, *ChemPhysChem* Volume **6** (September 12, 2005) Issue 9, Pages 1671-1947. Parrinello Festschrift: From Physics via Chemistry to Biology.

- W. Andreoni, D. Marx, and M. Sprik, *ChemPhysChem* **6** (2005) 1671-1676. A Tribute to Michele Parrinello: From Physics via Chemistry to Biology (Editorial of the “Parrinello Festschrift”).
- J. Kongsted, T. Bondo Pedersen, M. Strange, A. Osted, A. E. Hansen, K. V. Mikkelsen, F. Pawlowski, P. Jørgensen, C. Hättig, *Chem. Phys. Lett.* **401** (2005) 385-392. Coupled cluster calculations of the optical rotation of S-propylene oxide in gas phase and solution.
- C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** (2005) 59-66. Optimization of auxiliary basis sets for RI-MP2 and RI-CC2 calculations: Core-valence and quintuple- ζ basis sets for H to Ar and QZVPP basis sets for Li to Kr.
- H. Fliegl, C. Hättig, W. Klopper, *J. Chem. Phys.* **122** (2005) 084107. Coupled-cluster theory with simplified linear r_{12} corrections: The CCSD(R12) model.
- A. J. A. Aquino, H. Lischka, C. Hättig, *J. Phys. Chem. A* **109** (2005) 3201-3208. Excited-State Intramolecular Proton Transfer: A Survey of TDDFT and RI-CC2 Excited-State Potential Energy Surfaces.
- F. Pawlowski, P. Jørgensen, C. Hättig, *Adv. Quant. Chem.* **48** (2005) 9-21. The Cauchy moments of Ne, Ar, and Kr atoms calculated using the approximated coupled cluster triples model CC3.
- S. Høst, P. Jørgensen, A. Köhn, F. Pawlowski, W. Klopper, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **123** (2005) 094303. Frequency-dependent hyperpolarizabilities of the Ne, Ar, and Kr atoms using the approximate coupled cluster triples model CC3.
- F. Pawlowski, P. Jørgensen, C. Hättig, *Chem. Phys. Lett.* **413** (2005) 272-279. The second hyperpolarizability of the N₂ molecule calculated using the approximate coupled cluster triples model CC3.
- S. Coriani, D. Marchesan, C. Hättig, P. Jørgensen, T. Helgaker, J. Gauss, *J. Chem. Phys.* **123** (2005) 184107. The accuracy of *ab initio* molecular geometries for systems containing second-row atoms.
- A. L. Sobolewski, W. Domcke, C. Hättig, *Proceed. Natl. Acad. Sci. USA* **102** (2005) 17903-17906. Tautomeric selectivity of the excited-state lifetime of guanine-cytosine basis pairs: the role of electron and proton transfer processes.
- C. Hättig, *Adv. Quant. Chem.* **50** (2005) 37-60. Structure optimizations for excited states with correlated second-order methods: CC2, CIS(D_∞), and ADC(2).
- H. Fliegl, C. Hättig, W. Klopper, *J. Chem. Phys.* **60** (2005) 044112. Coupled-cluster response theory with linear r_{12} corrections: The CC2-R12 model for vertical excitation energies.
- K. Fink, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7** (2005) 2999-3004. Ab initio cluster calculations for the absorption energies of F and F⁺ centers in bulk ZnO.
- V. Ischenko, S. Polarz, D. Grote, V. Stavarache, K. Fink, M. Driess, *Adv. Funct. Mater.* **15** (2005) 1945-1954. Zinc oxide nanoparticles with defects.
- K. von Haeften, A. Metzelthin, S. Rudolph, V. Staemmler, M. Havenith, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 215301. High Resolution Spectroscopy of NO in Helium Droplets: A Prototype for Open Shell Molecular Interactions in a Quantum Solvent
- V. Staemmler, *Top. Organomet. Chem.* **12** (2005) 219-256. The Cluster Approach for the Adsorption of Small Molecules on Oxide Surfaces.
- W. Kutzelnigg, D. Mukherjee, *Phys. Rev. A* **71** (2005) 022502. Minimal parametrization of a quantum mechanical n -electron state.

- W. Kutzelnigg, *Angew. Chem.* **117** (2005) 3866. Hans Bethe (1906-2005) und die Ligandenfeldtheorie.
- W. Kutzelnigg W. Liu, *J. Chem. Phys.* **123** (2005) 241102. Quasirelativistic theory equivalent to fully relativistic theory.

Technische Chemie

- M. Kurtz, J. Strunk, O. Hinrichsen, M. Muhler, K. Fink, B. Meyer, C. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 2790-2794. Active sites on oxide surfaces: ZnO-catalyzed synthesis of methanol from CO and H₂.
- C. Liang, W. Xia, H. Soltani-Ahmadi, O. Schlüter, R. A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Commun.* (2005) 282-284. The two-step chemical vapor deposition of Pd(allyl)Cp as an atom-efficient route to synthesize highly dispersed palladium nanoparticles on carbon nanofibers.
- J. Aßmann, D. Crihan, M. Knapp, E. Lundgren, E. Löffler, M. Muhler, V. Narkhede, H. Over, M. Schmid, A. P. Seitsonen, P. Varga, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 917-920. Understanding the Structural Deactivation of Ruthenium Catalysts on an Atomic Scale under both Oxidizing and Reducing Conditions.
- K. Eckhard, O. Schlüter, V. Hagen, B. Wehner, T. Erichsen, W. Schuhmann, M. Muhler, *Appl. Catal. A: General* **281** (2005) 115-120. Spatially resolved mass spectrometry as a fast semi-quantitative tool for testing heterogeneous catalyst libraries under reducing stagnant-point flow conditions.
- W. Xia, O. Schlüter, C. Liang, M. van den Berg, M. Guraya, M. Muhler, *Catal. Today* **102-103** (2005) 34-39. The synthesis of structured Pd/C hydrogenation catalysts by the chemical vapor deposition of Pd(allyl)Cp onto functionalized carbon nanotubes anchored to vapor grown carbon microfibers.
- W. Xia, D. Su, R. Schlögl, A. Birkner, M. Muhler, *Adv. Mater.* **17** (2005) 1677-1679. Conical Carbon Filaments with Axial Cylindrical Channels and Open Tips.
- V. Narkhede, J. Aßmann, M. Muhler, *Z. Phys. Chem.* **219** (2005) 979-995. Structure-Activity Correlations for the Oxidation of CO over Polycrystalline RuO₂ Powder Derived from Steady-State and Transient Kinetic Experiments.
- R. Naumann d' Alnoncourt, M. Bergmann, J. Strunk, E. Löffler, O. Hinrichsen, M. Muhler, *Thermochimica Acta* **434** (2005) 132-139. The coverage-dependent adsorption of carbon monoxide on hydrogen-reduced copper catalysts: the combined application of microcalorimetry, temperature-programmed desorption and FTIR spectroscopy.
- S. Hermes, M.-K. Schröter, R. Schmid, L. Khodeir, M. Muhler, A. Tissler, R.W. Fischer, R.A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **44** (2005) 2-5. Metal@MOF: Loading of Highly Porous Coordination Polymers Host Lattices By Metal Organic Chemical Vapor Deposition.
- Q-H. Wu, M. Gunia, T. Strunskus, G. Witte, M. Muhler, Ch. Wöll, *Chem. Vap. Deposition* **11** (2005) 355-361. Deposition of Palladium from a Cyclopentadienyl-allyl-palladium Precursor on Si-Based Substrates with Various Pretreatments: The Role of Surface Si-OH and Si-H Species Studied by X-Ray Photoelectron Spectroscopy.
- N. Hoffmann, M. Muhler, *Catal. Lett.* **103** (2005) 155-159. On the mechanism of the oxidative amination of benzene with ammonia to aniline over NiO/ZrO₂ as cataloreactant.
- W. Xia, D. Su, A. Birkner, L. Ruppel, Y. Wang, C. Wöll, J. Qian, C. Liang, G. Marginean, W. Brandl, M. Muhler, *Chem. Mater.* **17** (2005) 5737-5742. Chemical Vapor Deposition

and Synthesis on Carbon Nanofibers: Sintering of Ferrocene-Derived Supported Iron Nanoparticles and the Catalytic Growth of Secondary Carbon Nanofibers.

- M. Schwidder, M. Santhosh Kumar, A. Brückner, W. Grünert, *Chem. Comm.* (2005) 805-807. Active sites for NO reduction over Fe-ZSM-5 catalysts.
- Yu Stakheev, O. P. Tkachenko, K. V. Klementiev, W. Grünert, G. O. Bragina, I. S. Mashkovski, L. M. Kustov, *Kinetika i Kataliz* **46** (2005) 122-130 (*Kinetics and Catalysis* **46** (2005) 114-122. Formirovanie malykh metallicheskich chastic rhodia na poverkhnosti uglerodnovo nositelya. (Formation of small Rhodium Metal Particles on the Surface of a Carbon Support.)
- M. Schwidder, M. Santhosh Kumar, K. Klementiev, M. M. Pohl, A. Brückner, W. Grünert, *J. Catal.* **231** (2005) 314-330. Selective Reduction of NO with Fe-ZSM-5 Catalysts of Low Fe content I. Relations between Active Site Structure and Catalytic Performance.
- M. Bandyopadhyay, A. Birkner, M. W. E. van den Berg, K. V. Klementiev, W. Schmidt, W. Grünert, H. Gies, *Chem. Mater.* **17** (2005) 3820-3829. Synthesis and Characterization of mesoporous MCM-48 containing TiO₂ nanoparticles.
- S. Polarz, F. Neues, M.W.E. van den Berg, W. Grünert, L. Khodeir, *J. Am. Chem. Soc.* **127** (2005) 12028 -12034. Mesosynthesis of ZnO-silica composites for methanol nanocatalysis
- Yu. Khyzhun, T. Strunskus, W. Grünert, Ch. Wöll, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **149** (1-3) (2005) 45-50. Valence band electronic structure of V₂O₅ as determined by resonant soft X-ray emission spectroscopy.
- P. Tkachenko, K. V. Klementiev, M. W. E. van den Berg, N. Koc, M. Bandyopadhyay, A. Birkner, C. Wöll, H. Gies, W. Grünert, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 20979-20988. Reduction of Copper in Porous Matrices. Stepwise and Autocatalytic Reduction Routes.
- Indris, R. Amade, P. Heitjans, M. Finger, A. Haeger, D. Hesse, W. Grünert, A. Börger, K. D. Becker, *J. Phys. Chem. B* **109** (2005) 23274-23278. Preparation by High-energy milling, Characterization and Catalytic Properties of Nanocrystalline TiO₂.
- K. V. Klementiev, G. Goerigk, O. P. Tkachenko, A. Yu. Stakheev, W. Grünert, *Hasylab report* 2005. ASAXS Study of Carbon-Supported Pd, Pt and Rh Catalysts.
- Z. Hou, N. Theyssen, W. Leitner, K. V. Klementiev, W. Grünert, *Hasylab report* 2005. Preparation of Pd Nanoparticles in an Organic-Inorganic Mesoporous Hybrid material: a XAFS Study.
- M. W. E. van den Berg, K. V. Klementiev, O. Korsak, H. Gies, W. Grünert, *Hasylab report* 2005. XAFS studies during low-temperature CO oxidation with a size-confined Au/TiO₂ catalyst.

Biochemie 1

- N. Strutz-Seeböhm, G. Seeböhm, A.F. Mack, H.-J. Wagner, L. Just, T. Skutella, U.E. Lang, G. Henke, M. Striegel, M. Hollmann, N. Rouach, R.A. Nicoll, J.A. McCormick, J. Wang, D. Pearce, F. Lang, *J. Physiol. (London)* **565(2)** (2005) 381-390. Regulation of GluR1 abundance in hippocampal neurons by serum- and glucocorticoid-inducible kinase 3. IF = 4.35
- N. Strutz-Seeböhm, G. Seeböhm, E. Shumilina, A.F. Mack, H.-J. Wagner, A. Lampert, F. Grahmmer, G. Henke, L. Just, T. Skutella, M. Hollmann, F. Lang, *J. Physiol. (London)* **565(2)** (2005) 391-401. Glucocorticoid adrenal steroids and glucocorticoid inducible kinase isoforms in the regulation of GluR6 expression. IF = 4.35

- Y. Ko, T. Han, H. Lu, Z.-L. Ma, J. Chen, M. Rothe, A. Florin, S. Fronhoffs, P. Albers, A. Sachinidis, H. Vetter, A. Kaminski, P. Behrens, A. Wellmann, N. Wernert, *Int. J. Mol. Med.* **15**(2) (2005) 183-196. A novel component of the ubiquitin pathway, ubiquitin carboxyl extension protein 1 is overexpressed in prostate cancer. IF = 3.19
- A.F. Okuducu, V. Janzen, Y. Ko, J.C. Hahne, H Lu, Z.-L. Ma, P. Albers, A. Sahin, A. Wellmann, P. Scheinert, N. Wernert, *Int. J. Oncol.* **27**(5) (2005) 1273-1282. Cellular retinoic acid-binding protein 2 is down-regulated in prostate cancer. IF = 3.06
- C. Schmidt, M. Werner, M. Hollmann, *Mol. Pharmacol.* **69**(1) (Epub Oct.7, 2005) 119-29. Revisiting the postulated "unitary glutamate receptor": Electrophysiological and pharmacological analysis in two heterologous expression systems fails to detect any evidence for its existence. IF = 5.08

Biochemie 2

- M. Manns, O. Güntürkün, R. Heumann, A. Blöchl *Eur. J. Neurosci* **22** (2005) 2180-2186. Photic inhibition of TrkB/RAS activity in the pigeon's tectum during development: impact on brain asymmetry formation.
- S. Borgmann, W. Schuhmann, I. Radtke, R. Heumann, *BioForum* **28** (12) (2005) 24-26. Signalfade in der Tumorangione. Elektrochemische Robotik zur Untersuchung der Stickstoffmonoxid Ausschüttung aus Blutgefäßen
- U. Gartner, A. Alpar, J. Behrbohm, R. Heumann, T. Arendt, *Neuroreport*. **16** (2005);49-52. Enhanced Ras activity promotes spine formation in synRas mice neocortex.
- K.F. Störtkuhl, R. Kettler, S. Fischer, B.T. Hovemann, *Chem.Senses* **30** (2005) 81-87. An Increased Receptive Field of Olfactory Receptor Or43a in the Antennal Lobe of *Drosophila* Reduces Benzaldehyde-driven Avoidance Behavior.
- J.R. True, S.-D. Yeh, B.T. Hovemann, T. Kemme, I.A. Meinertzhagen, T.N. Edwards, S.-R. Liou, Q. Han, J. Li, *PloS Genetics* **1** (2005) 551-562. *Drosophila* tan Encodes a Novel Hydrolase Required in Pigmentation and Vision.
- T.N. Edwards, S.-D. Yeh, B. Hovemann, T. Kemme, I.A. Meinertzhagen, S.-R. Liou, Q. Han, J. Li, J.R. True, in " *Neurobiology of Drosophila* " (L. Griffith, D. Van Vactor eds.) Cold Spring Harbor, New York **59** (2005). *Drosophila* Tan Encodes A Novel Hydrolase Required for Melanin Pigmentation and Histamine Metabolism.
- T. Kemme, B.T. Hovemann, in " *Neurobiology of Drosophila* " (L. Griffith, D. Van Vactor eds.) Cold Spring Harbor, New York **116** (2005). Histamine As Neurotransmitter in *Drosophila* Vision: Its Cycling Pathway Via Carcine.
- K. Susen and A. Blöchl, *J. Mol. Med.* **83** (2005) 720-735. Low concentrations of aggregated beta-amyloid induce neurite formation via the neurotrophin receptor p75.
- J. Castillo, S. Isik, A. Blöchl, N. Pereira-Roderigues, F. Bedioui, E. Csöregi, W. Schuhmann, J. Oni, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 1559-1565. Simultaneous detection of the release of glutamate and nitric oxide from adherently growing cells using an array of glutamate and nitric oxide selective electrodes.
- S. Isik, L. Berdondini, J. Oni, A. Blöchl, M. Koudelka-Hep, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 1566-1572. Cell-compatible array of three-dimensional tip electrodes for the detection of nitric oxide release.
- J. Castillo, A. Blöchl, S. Denninson, W. Schuhmann, E. Csöregi, *Biosensors & Bioelectronics* **20** (2005) 2116-2119. Glutamate detection from nerve cells using a planar electrodes array integrated in a microtiter plate.

- C. Wartelle, W. Schuhmann, A. Blöchl, F. Bedioui, *Electrochim. Acta* **50** (2005) 4988-4994. Integrated compact biocompatible hydrogel-based amperometric sensing device for easy screening of drugs involved in nitric oxide production by adherent cultured cells.

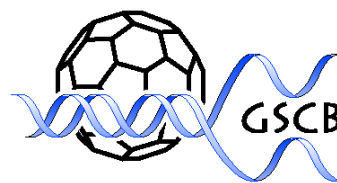
Didaktik der Chemie

- D. Roth, K. Sommer, *RAAbits Chemie* (2005) 30S. Rund um die Gelatine, Nachweise, Herstellung und Eigenschaften.



Ruhr Universität Bochum
Fakultät für Chemie

IPP made in Germany 
International Postgraduate Programmes
Internationale Promotionsprogramme



Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB)

Die fakultätsweite Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB) bietet jungen Wissenschaftlern das komplette Spektrum der modernen Chemie: vom Design und der Aufklärung molekularer Strukturen bis hin zu neuen Materialien und den Biowissenschaften. Kernstück der GSCB ist ein strukturierter Promotionsstudiengang, der auf einem international kompatiblen 3(+1) Modell basiert: Studierende mit einem sehr guten Bachelor- oder Fachhochschulabschluß können nach einem einjährigen Vorbereitungsstudium direkt in das dreijährige Forschungsstudium zum *Dr. rer. nat.* einsteigen, für welches normalerweise ein Diplom- bzw. Master-Abschluß Voraussetzung ist. Die Doktoranden der GSCB profitieren von einem anspruchsvollen Curriculum, englischsprachigen Lehrveranstaltungen und internationalem Umfeld. Sie werden darüber hinaus fachlich und außerfachlich intensiv betreut. Für ausländische Doktoranden bietet die GSCB spezielle Deutschkurse, Unterstützung bei Einreise, Behördengängen und Wohnungssuche an.

Ziel der GSCB ist es, eine qualitativ hochwertige Ausbildung in angemessener Zeit zu ermöglichen und optimale Bedingungen für die Spitzenforschung zu schaffen. Als *Internationales Promotionsprogramm* (IPP) und ausgewiesenes Zentrum wissenschaftlicher Exzellenz erhält die GSCB eine fünfjährige Anschubfinanzierung des Deutschen Akademischen Austauschdienstes und der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Programms „Promotion an Hochschulen in Deutschland“.

Die Graduate School hat derzeit 120 Mitglieder (Stand 03/2005), von denen 30% ausländischer Herkunft sind, und wird voraussichtlich im Wintersemester 2005/2006 mit insgesamt 180-200 Doktoranden im Promotionsstudiengang ihren Vollausbau erreichen.

Weitere Infos:

Dr. Thomas Koch
Wissenschaftlicher Koordinator
Graduate School of Chemistry and Biochemistry
Ruhr-Universität Bochum (NC 02/169)
D-44780 Bochum

FON: +49 (0) 234 32 24374 oder 26908
FAX: +49 (0) 234 32 14749

URL: www.ruhr-uni-bochum.de/gscb

Promotionen in der Fakultät für Chemie
01.01.2005 bis 31.12.2005

Baumert, Birgit

Untersuchungen zum Schädigungsverhalten von ultra-dünnen Plasma-Polymer-Beschichtungen auf mechanisch belasteten Metallsubstraten

1. Referent: Prof. Dr. M. Stratmann

Disputation: 27.06.2005

Belger, Sascha

Elektrochemische Messtechniken zur globalen und lokalen Korrosionsuntersuchung an Nickel-Titan-Formgedächtnislegierungen

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 09.12.2005

Bergner, Andreas

Infrarot Mikro- und Nanomikrospektroskopie

1. Referent: Prof. Dr. M. Havenith-Newen

Disputation: 28.01.2005

Berndt, Alexander

Darstellung, spektroskopische und strukturelle Charakterisierung des Uhrenproteins und Blau-licht-Photorezeptors CRYPTOCHROM

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 21.07.2005

Bhakta, Raghunandan

Rational Development of Precursors for MOCVD of TiO₂: Precursor Chemistry, Thin Film Deposition, Mechanistic Studies

1. Referent: Prof. Dr. R. A. Fischer

Disputation: 02.02.2005

Böhmer, Thomas

Functional and structural dissection of Nup107 and Nup133, two members of the Nup107-160 subcomplex, linchpin of the vertebrate nuclear pore complex

1. Referent: Prof. Dr. W.-H. Kunau

Disputation: 28.04.2005

Brinkhoff, Daniela

Gezielter Aufbau von Koordinationskäfigen unter Verwendung C₃-symmetrischer Liganden

1. Referent: Dr. I. Müller

Disputation: 04.11.2005

Chakrabarti, Partha Pratim

Biochemical and biophysical analysis of the GTPase activating proteins of the small guanine nucleotide binding protein Rap1 and RheB

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 27.06.2005

Chlopek, Krzysztof

Experimental study on iron complexes containing N,N'-coordinated o-diiminobenzosemiquinonate n radicals

1. Referent: Prof. Dr. K. Wieghardt

Disputation: 11.05.2005

Ehse, Sylvia

Isothermale in vitro Selektion und Amplifikation zur Untersuchung von Evolutionsvorgängen

1. Referent: Prof. Dr. J. S. McCaskill

Disputation: 08.07.2005

Fiegen, Dennis Franz-Josef

Struktur-Funktionsbeziehungen der Rho- und der Plexin-Proteinfamilien

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 13.07.2005

Gemel, Eliza

Insights into the CVD process of heavier group 13 nitrides with intramolecularly coordinated single-source precursors. A matrix isolation study

1. Referent: Prof. Dr. R. A. Fischer

Disputation: 03.02.2005

Grabert, Klaus

Regulation of interneuronal voltage-gated potassium channels Kv3.1b and Kv3.2 and the calcium-binding protein parvalbumin in the rat visual cortex

1. Referent: Prof. Dr. P. Wahle

Disputation: 29.04.2005

Grunwald, Christian

Proteinadsorption an organischen Modelloberflächen

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Disputation: 06.12.2005

Hamdan, Abdullah

Infrared spectroscopy of methane dDimer

1. Referent: Prof. Dr. M. Havenith-Newen

Disputation: 13.12.2005

Hänel, Kathrin

Charakterisierung des Wachstums polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe auf ausgewählten Kupfer- und Goldoberflächen

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Disputation: 09.12.2005

Heidenblut, Anna

Genexpressionsanalyse an Vorläuferzellen des Pankreaskarzinoms

1. Referent: Prof. Dr. St. Hahn

Disputation: 27.01.2005

Hemsath, Lars

Modulare Elemente in den Signaltransduktionswegen kleiner GTPasen

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 14.07.2005

Hoffmann, Dennis

Entwicklung von tumorspezifischen replikations-kompetenten Adenoviren

1. Referent: Prof. Dr. med. K. Überla

Disputation: 25.01.2005

Hoffmann, Nora

Kinetische und spektroskopische Untersuchungen von Übergangsmetalloxid-Katalysatoren zur Direktaminierung von Aromaten

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 14.07.2005

Kapre, Ruta

Experimental study on transition metal complexes containing N,S'-,S,S'-and O,O'-coordinated n radicals

1. Referent: Prof. Dr. K. Wieghardt

Disputation: 15.07.2005

Kruppa, Thomas

Gasphasenepoxidierung von Propen mit Wasserstoffperoxid

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 11.05.2005

Maile, Eva

Beiträge zur precursorchemischen Präparation von Cu/ZnO und Pd/ZnO Trägerkatalysatoren

1. Referent: Prof. Dr. R. A. Fischer

Disputation: 03.02.2005

Mastalerz, Michael

Funktionalisierte CALIX[4]arene: Synthese und supramolekulare Eigenschaften

1. Referent: Prof. Dr. G. Dyker

Disputation: 27.10.2005

Maywald, Matthias

Methodenentwicklung zur Anwendung genetischer Optimierungsstrategien auf semisynthetische Enzyme

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Disputation: 15.07.2005

Mehlmann, Heinz

Kombinatorische Bibliotheken und Bindungsstudien von γ -Peptiden aus Glutaminsäure-Derivaten

1. Referent: Prof. Dr. M. Feigel

Disputation: 28.10.2005

Mera, Gabriela

Contributions to the synthesis of silicon-rich oligocarbosilanes and their use as precursors for electrically conductive films

1. Referent: Prof. Dr. M. Drieß

Disputation: 17.03.2005

Muresan, Nicoleta Mihaela

Unusual main group element complexes with tridentate diketoamine ligands

1. Referent: Prof. Dr. M. Drieß

Disputation: 03.02.2005

Muth, Enrico

Gold- und Palladium-katalysierte Alkylierungen und Arylierungen elektronenreicher Aromaten

1. Referent: Prof. Dr. G. Dyker

Disputation: 27.01.2005

Naumann d'Alnoncourt, Raoul M. C.

The coverage-dependent adsorption of carbon monoxide on copper catalysts studied by a combination of adsorption microcalorimetry, temperature-programmed desorption and Fourier transform infrared spectroscopy

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 31.01.2005

Ngounou Djomeni, Bertrand

Optimierung von Elektrodepositionslacken als Basis für die nicht-manuelle Herstellung amperometrischer Biosensoren

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 28.04.2005

Nowacki, Sandra

DPC4-Zielgenidentifikation mittels Microarray-Technologie

1. Referent: Prof. Dr. St. Hahn

Disputation: 11.07.2005

Ott, Magnus

Eigenschaften niedrigschmelzender Salze

1. Referent: Prof. Dr. H. Weingärtner

Disputation: 02.11.2005

Patil, Urmila

Precursors for metal organic chemical vapor deposition (MOCVD) of ZrO_2 and HfO_2 thin films as gate dielectrics in complementary metal-oxide-semiconductor (CMOS) devices

1. Referent: Prof. Dr. R. A. Fischer

Disputation: 04.02.2005

Patzke, Volker

Selbstreplizierende 3'-5'-Thiol-Oligodesoxynucleotidderivate: Zum Einfluss peptidischer Abgangsgruppen auf die Oligonucleotidreplikation

1. Referent: Prof. Dr. G. von Kiedrowski

Disputation: 04.11.2005

Popkirova, Boriana

Die Isoprenfunktion von Ras-Erkennungssignal bei der Interaktion mit Guaninnukleotid-Austauschfaktoren, Translokationsfaktoren und modifizierenden Enzymen

1. Referent: Priv.-Doz. Dr. J. Kuhlmann

Disputation: 26.01.2005

Radacz, Yvonne

Rekonstitution epithelialer Eigenschaften und Funktionen von Kolonkarzinomzellen nach Reexpression des Tumorsuppressors Smad4

1. Referent: Prof. Dr. St. Hahn

Disputation: 09.06.2005

Ray, Kallol

Do S,S' -coordinated *o*-dithiobenzosemiquinonate(1-) radicals exist in coordination compounds? A combined experimental and computational study

1. Referent: Prof. Dr. K. Wieghardt

Disputation: 25.01.2005

Reiter, Sabine

Elektrochemische Kombinatorik als Grundlage für die Entwicklung biologischer Assays

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 28.04.2005

Ritzkopf, Inga

Kupfer-Katalysatoren für die Methanol-Dampfreformierung

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 27.04.2005

Rocks, Oliver

A de-/reacylation cycle controls the localisation and compartmentalised activity of palmitoylated Ras

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 24.01.2005

Rose, Rolf

Strukturelle und biochemische Untersuchungen zur Interaktion zwischen dem Formin mDia1 und Rho-Proteinen

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 19.07.2005

Schneider, Toni

Gerichtete Evolution als Methode zur Erzeugung enantioselektiver Cylohexanonmonoxygenasen (CHMOs) für die Katalyse von Baeyer-Villiger-Reaktionen

1. Referent: Prof. Dr. M. T. Reetz

Disputation: 20.01.2005

Schwidder, Michael

Beiträge zur Identifizierung der aktiven Zentren in Fe/ZSM-5-DeNOx-Katalysatoren

1. Referent: Prof. Dr. W. Grünert

Disputation: 31.01.2005

Stahl, Insa

Analyse und Klassifizierung selbstreplizierender Minimalsysteme auf der Grundlage einer Diels-Alder-Ligationschemie

1. Referent: Prof. Dr. G. von Kiedrowski

Disputation: 19.07.2005

Steinke, Tobias

Beiträge zur Koordinationschemie der niedervalenten Aluminium, Gallium und Indium-Organyle E'Cp* an Übergangsmetallen

1. Referent: Prof. Dr. R. A. Fischer

Disputation: 03.02.2005

Wegert, Thomas

Untersuchungen zur transienten Wechselwirkung von RNA und Proteinkomplexen

1. Referent: Prof. Dr. B.-J. Benecke

Disputation: 11.05.2005