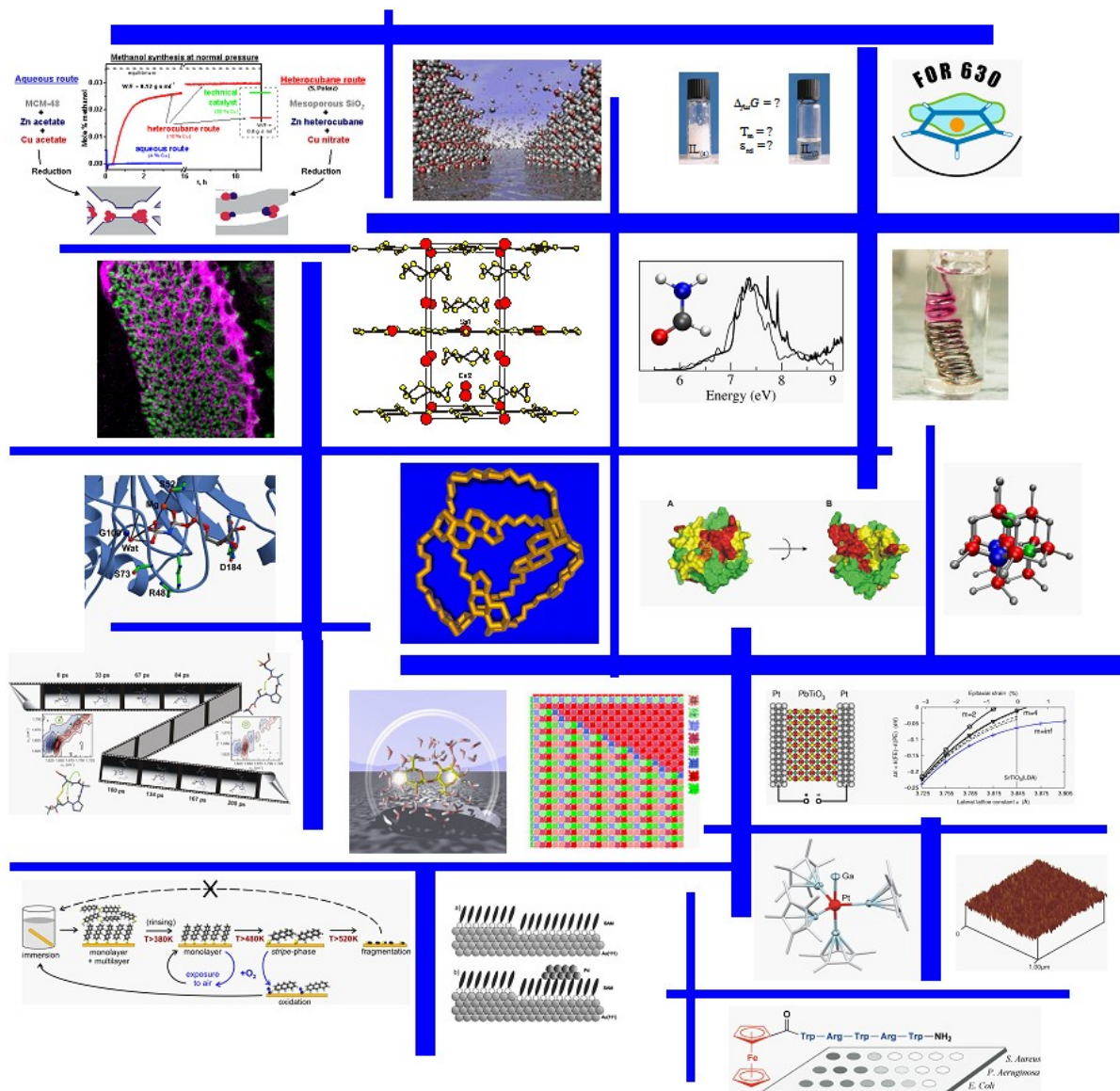


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2006



Research 2006

Faculty of Chemistry and Biochemistry

Ruhr-Universität Bochum

Vorwort des Dekans der Fakultät für Chemie und Biochemie

Prof. Dr. Roland Fischer

Die Fakultät bewegt sich, hat Schwung gewonnen und schiebt sich Stück um Stück vor. Erinnern wir uns an die Jahre 1997/1998 in der die Kommission des „Expertenrates“ die Chemie in Nordrhein-Westfalen unter die Lupe nahm, die Fakultät mitten im Generationswechsel steckte, die Asbestsanierung des Hauses bei 80% lag, der Rückbau stockte und der Einbruch bei den Anfängerzahlen die Aussichten verdüsterte. Wer hätte damals darauf gewettet, dass wir mit „Systemchemie der Grenzflächen“ eines der wichtigen, neuen Forschungsdepartments auf dem Campus aufstellen werden? Die Forschungsleistung der Chemie und Biochemie trägt heute ganz entscheidend zur Positionierung der Gesamtuniversität im Rennen um die ersten Plätze in der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder bei. Die Zeiten haben sich gewendet.

Wer diesen Forschungsbericht zur Hand nimmt, die *highlights* überfliegt und die Publikationslisten durchblättert, der hält vor allem ein Dokument der Leistung, der Freude und der Begeisterung unserer jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, der Doktoranden und Doktorandinnen in Händen. Aus Studienanfängern wurden Wissenschaftler, die auf internationaler Bühne mitreden. Über 200 Promovenden sind in der *Graduate School of Chemistry and Biochemistry* eingeschrieben. Vom DAAD im Rahmen des PHD-Programms ab 2002 gefördert und zum Jahreswechsel 2006/2007 verstetigt, war nicht zuletzt unser Konzept der strukturierten Promotionsförderung Maßstab für die Ruhr-University Research School und macht die Fakultät auch im europäischen Hochschulraum profiliert sichtbar: Die Einrichtung von INTCHEM (2006-2010) als *early research training site* im Rahmen des Marie-Curie Programms der EU steht beispielhaft für diese Entwicklung.

So zahlreich sind die kooperativen, drittmittelgeförderten Forschungsprojekte an denen Mitglieder der Fakultät beteiligt sind oder als Initiatoren und Sprecher die Einwerbung maßgeblich erwirkt haben, dass dem interessierten Leser die Übersicht und die weiteren Informationen dazu auf der Homepage der Fakultät unter <http://www.ruhr-uni-bochum.de/chemie/forschung> empfohlen sind. Herausgehoben ist gewiss der Sonderforschungsbereich 558 über „Metall-Substratwechselwirkungen in der Heterogenen Katalyse“, der hervorragend begutachtet im Juni 2006 in die dritte Förderperiode einzog. Ebenso spannend ist die neu eingerichtete Forschergruppe 618 „Aggregation kleiner Moleküle mit präzisen Methoden verstehen - Experiment und Theorie im Wechselspiel“, die organisch/physikalische Chemie, Molekülphysik und Spektroskopie mit Quantenchemie und auf höchstem Niveau verknüpft. Die konsequent interdisziplinäre Strukturentwicklung der Fakultät macht sich auch an der Berufung von Kollegen Nils Metzler-Nolte auf den Lehrstuhl für Anorganische Chemie I fest (FOR 630, „Bioorganometallchemie“). Das Fach rückt näher an die Biowissenschaften heran. Komplementär dazu erfolgte die Besetzung der assoziierten Professur durch Kollegin Anja-Verena Mudring mit Brückenfunktion zu den Materialwissenschaften.

Im Ranking 2006 des Centrums für Hochschulentwicklung liegt die Fakultät im oberen Drittel der über 50 erfassten Standorte. Im Leistungsvergleich zeigt sich klar unser Potenzial für den Anschluss an die Top 10 in Deutschland. Fakten dazu sind die seit Jahren steigende Drittmittelleistung, die kontinuierlich hohen Absolventenzahlen bei den Promotionen und die entsprechend starke Publikationsaktivität. Diese günstige Perspektive ruht auf stetig wachsenden Studierendenzahlen in allen Studiengängen. Die Fakultät hat eine nominelle Auslastung ihrer Lehrkapazität von 98.1% erreicht! So wesentlich internationale Sichtbarkeit in der Forschung ist, so wichtig ist regionale Vernetzung an der Schnittstelle Schule/Universität. Die Etablierung des neuen Masterstudiengangs für angehende Lehrerinnen und Lehrer und die gelungene Verschränkung professionsspezifischer Ausbildungsmodule mit den Chemieprojekten im Schülerlabor für 2000 Gäste im Jahr sind Meilensteine dafür.

Die Fakultät ist auf gutem Wege. Glück auf.

Roland Fischer

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1	
Prof Dr. Nils Metzler Nolte (Bioanorganische Chemie)	5
Prof. Dr. Anja-Verena Mudring (Festkörperchemie und Materialien)	6
Dr. U. Schatzschneider	7
Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2	
Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials)	8
Dr. Rochus Schmid	9
JP Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	10
Lehrstuhl für Organische Chemie 1	
Prof. Dr. Martin Feigel	11
Prof. Dr. John McCaskill	12
Lehrstuhl für Organische Chemie 2	
Prof. Dr. Wolfram Sander	13
PD Dr. Holger Bettinger	14
PD Dr. Götz Bucher	15
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	16
Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1	
Prof. Dr. Christof Wöll	17
PD Dr. Gregor Witte	18
Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	19
Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2	
Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	20
Prof. Dr. Hermann Weingärtner (Physikalische Chemie der Flüssigkeiten)	21
Prof. (em.) Dr. Gerhard Schneider	22
Lehrstuhl für Analytische Chemie	
Prof. Dr. William S. Sheldrick	23
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)	24
JP Dr. Raphael Stoll	25
Dr. Dirk Wolters	26
Dr. Michael Bron	27
Lehrstuhl für Theoretische Chemie	
Prof. Dr. Dominik Marx	28
PD Dr. Nikos L. Doltsinis	29
PD Dr. Bernd Meyer	30
Prof. Dr. Christof Hättig	31
Prof. Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie)	32
PD Dr. Karin Fink	33
Prof. (em.) Dr. Werner Kutzelnigg	34
Lehrstuhl für Technische Chemie	
Prof. Dr. Martin Muhler	35
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	36
Lehrstuhl für Biochemie 1	
Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	37
Prof. Dr. Bernd-Joachim Benecke	38
Lehrstuhl für Biochemie 2	
Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	39
PD Dr. Irmgard Dietzel-Meyer	40
Prof. Dr. Bernd Hovemann	41
Didaktik der Chemie	
Prof. Dr. Katrin Sommer	42

Verbundprojekte

Sonderforschungsbereich 558 „Metal-substrate interactions in heterogeneous catalysis“	43
Forschergruppe 630 „Biologische Funktion von Organometallverbindungen"	44
Forschergruppe 618 „Die Aggregation kleiner Moleküle mit präzisen Methoden	45
verstehen - Experiment und Theorie im Wechselspiel“	
Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB).....	46

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	47
Anorganische Chemie 2	49
Organische Chemie 1	51
Organische Chemie 2	51
Physikalische Chemie 1	52
Physikalische Chemie 2	54
Analytische Chemie	55
Theoretische Chemie	58
Technische Chemie	60
Biochemie 1	63
Biochemie 2	63
Didaktik der Chemie	64
 Promotionen an der Fakultät für Chemie und Biochemie 2006	 65

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

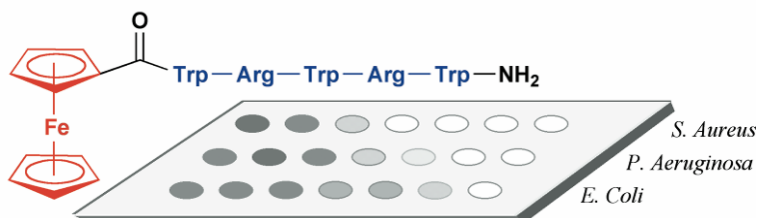
Tel.: ++49-(0)234-3224153; FAX: ++49-(0)234-3214378

email: Nils.Metzler-Nolte@rub.de;

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac1/>

J. T. Chantson, M. V. Verga Falzacappa, S. Crovella, N. Metzler-Nolte, *ChemMedChem* **1** (2006), 1268-1274. Solid Phase Synthesis, Characterization and Anti-bacterial Activities of Metallocene-Peptide Bioconjugates.

Auf das Metall kommt es an! Die zunehmende Resistenz von Mikroorganismen gegen gängige Antibiotika stellt eine Bedrohung dar, aus der unmittelbar die Notwendigkeit zur Entwicklung neuer, innovativer Wirkstoffe mit anti-bakterieller Wirkung abgeleitet werden kann. In dieser Arbeit präsentieren wir Metall-Peptid-Biokonjugate als eine neue Klasse von anti-bakteriellen Wirkstoffen. Durch die Konjugation von Metallocenen an den *N*-Terminus der Peptide erhöht sich nicht nur die anti-bakterielle Potenz. Darüber hinaus, und fast noch wichtiger, ändert sich auch die Spezifität gegen Gram-positive bzw. Gram-negative Bakterien. In einem MIC Assay (MIC - minimum inhibitory concentration) zeigt das unten abgebildete Ferrocen-Pentapeptid-Konjugate gegen Gram-positive *Staphylococcus aureus* eine Aktivität, die sogar besser ist als die des natürlich vorkommenden, 20 Aminosäuren langen Pilsulin 2. Im Kampf gegen multi-resistente *S. aureus* (MRSA) Erreger, die vor allem in Krankenhäusern zu einer ernsten Bedrohung werden, stellen derartige Metallocen-Peptidkonjugate eine interessante neue Strategie dar.



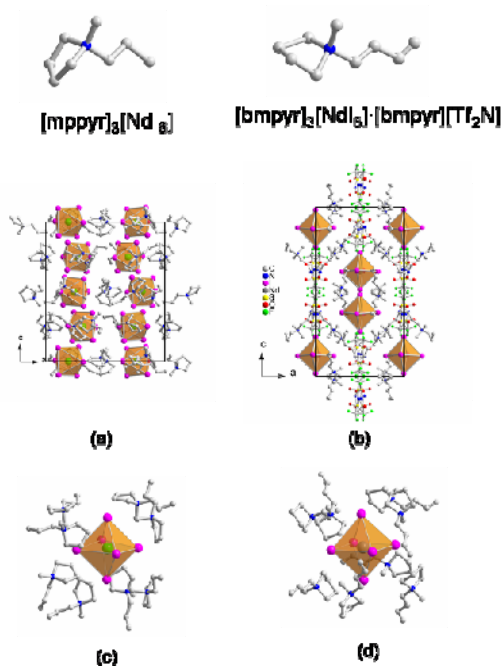
The metal matters! Rapidly growing resistance of the bugs against common anti-bacterial drugs is a major concern. Therefore, there is an urgent need for novel, innovative compounds with anti-bacterial activity. In this work, metal-peptide bioconjugates are introduced as a new class of anti-bacterial agents. Attaching an organometallic group to the *N*-terminus of peptides does not only enhance the anti-bacterial activity. Moreover, and more importantly, it changes specificity against Gram-positive or Gram-negative bacteria. The ferrocene-pentapeptide conjugate shown above has an activity against the Gram-positive *Staphylococcus aureus* which is even better than the naturally occurring anti-biotic twenty amino acid peptide Pilsulin 2, as shown by a MIC assay (MIC - minimum inhibitory concentration). Given the health concern resulting from multi-drug resistant *S. aureus* (MRSA) strains, the incorporation of metallocenes may provide a novel line of attack.

Anja-Verena Mudring

Anorg. Chem. I – Festkörperchemie und Materialien;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3229028; FAX: ++49-(0)234-3214951
email: anja.mudring@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.anjamudring.de>

A. Babai, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **25** (2006) 4874. Crystal engineering in ionic liquids. The crystal structures of $[\text{mppyr}]_3[\text{NdI}_6]$ and $[\text{bmpyr}]_4[\text{NdI}_6][\text{Tf}_2\text{N}]$,

Ionische Flüssigkeiten sind nach einer allgemeinen Definition Salze mit einem Schmelzpunkt unterhalb von 100 °C. RTILs (room temperature ionic liquids) sind selbst bei Raumtemperatur flüssig. Diese neue und wachsende Klasse von Verbindungen (zumeist organischer) Salze erfährt derzeit steigendes Interesse als grüne Solvenzien für Organokatalyse und –synthese, für elektrochemische Anwendungen und zur Trennung von z.B. *f*-Elementen. Einer der großen Vorteile Ionischer Flüssigkeiten besteht darin, dass viele physikalische und chemische Eigenschaften über die Wahl der Kation-Anion-Kombination gesteuert werden können. Einkristalle von $[\text{mppyr}][\text{NdI}_6]$ (mppyr = N-Methyl-N-propylpyrrolidinium) und $[\text{bmpyr}][\text{NdI}_6][\text{Tf}_2\text{N}]$ (bmpyr = N-Butyl-N-methylpyrrolidinium, Tf_2N = Bis(trifluorosulfonyl)amid) sind die ersten Beispiele inwieweit durch das Kation die Verbindungsbildung in Ionischen Flüssigkeiten gesteuert werden kann. Abhängig von der Länge der Alkylkette am Pyrrolidiniumkation (C3 oder C4) wird ein Anion der Ionischen Flüssigkeit $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$ entweder in die Kristallstruktur eingebaut oder nicht.



ILs (ionic liquids) are, by a common definition, salts that melt below 100°C. RTILs (room temperature ionic liquids) are even liquid at room temperature. This new and rapidly expanding class of compounds of (mostly organic) salts is currently gaining tremendous interest and importance as “green” solvents for organic catalysis and synthesis, for electrochemical applications as well as for *f*-element separation. One of the important features of this class of solvents is that many physical and chemical properties can be tuned by the choice of the respective cation and anion. Single crystals of $[\text{mppyr}][\text{NdI}_6]$ (mppyr = N-methyl-N-propylpyrrolidinium) and $[\text{bmpyr}][\text{NdI}_6][\text{Tf}_2\text{N}]$ (bmpyr = N-butyl-N-methylpyrrolidinium, Tf_2N = Bis(trifluorosulfonyl)amide) are first surprising examples of how the cation of an ionic liquid determines the compound formation from an ionic liquid. Depending upon the variation of the

length of the alkyl chain of the quaternary pyrrolidinium cation (C3 and C4, respectively), incorporation of the anion of the ionic liquid, $[\text{Tf}_2\text{N}]^-$, can either be evoked or suppressed.

Ulrich Schatzschneider

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

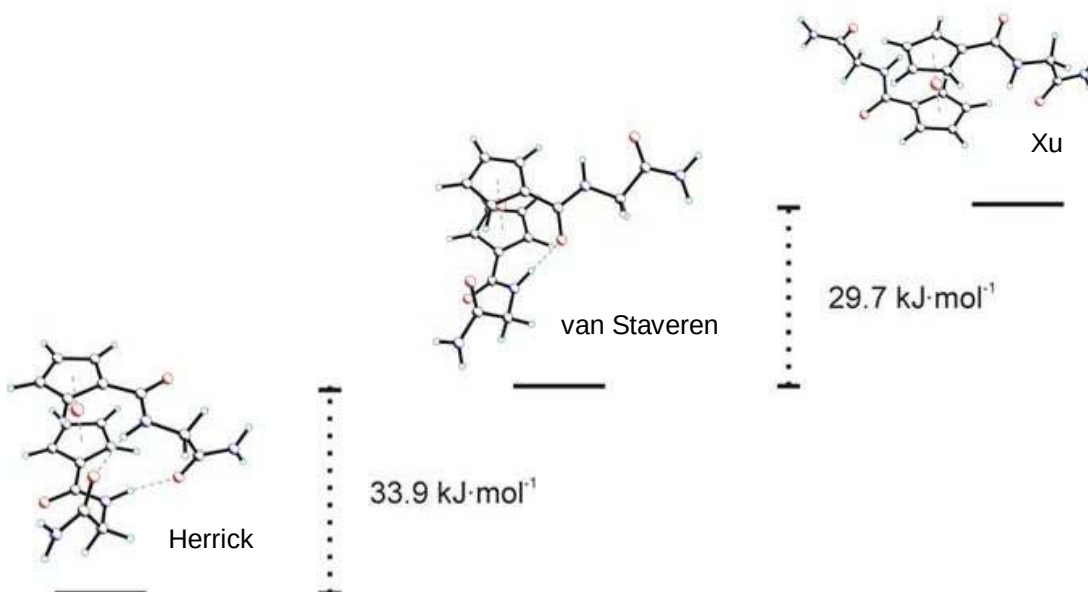
Tel.: ++49-(0)234-3224187; FAX: ++49-(0)234-3214387

email: ulrich.schatzschneider@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac1/uli>

S.I. Kirin, U. Schatzschneider, X. de Hatten, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, J. *Organomet. Chem.* **691** (2006) 3451-3457. 1,*n*'-Disubstituted ferrocenoyl peptides: Conformational analysis by CD spectroscopy, X-ray crystallography, and DFT calculations.

1,*n*'-Ferrocenoylamino acids are important building blocks for "turn mimics" in peptides. Intramolecular hydrogen bonds between the two peptide strands can stabilize conformations showing helical chirality. We have calibrated the results of density functional theory calculations against data from X-ray crystal structure determination. At the B3LYP/Lanl2DZ-Niveau werden die Strukturparameter generell akkurat reproduziert. Eine systematische Untersuchung des Konformationsraumes zeigt, daß die "Herrick-Konformation" mit zwei Wasserstoffbrücken im Einklang mit dem Experiment die niedrigste Energie aufweist. Die "van Staveren"- und "Xu"-Konformationen liegen 33.9 und 63.6 kJ·mol⁻¹ höher in der Energie, was gut mit der experimentellen Bindungsenthalpie des Wasser von ~ 23 kJ·mol⁻¹ pro Wasserstoffbrücke übereinstimmt. Verschiedene Orientierungen der Aminosäure-Seitenketten führen dagegen nur zu sehr viel kleineren Energiedifferenzen (< 10 kJ·mol⁻¹).



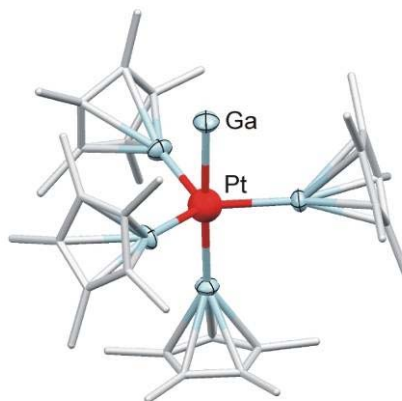
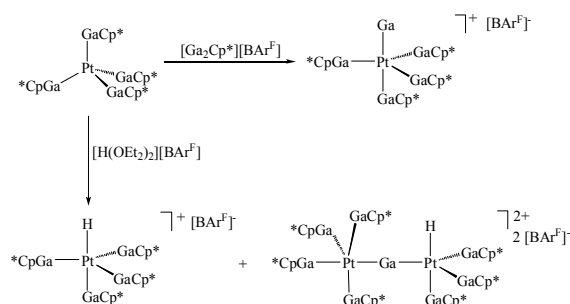
1,*n*'-Ferrocenoyl amino acids are important building blocks for turn mimics in peptides. Intramolecular hydrogen bonding between the two peptide strands can stabilize conformations showing helical chirality. In this work, we have calibrated the results of density functional theory calculations against data from X-ray crystal structure determination. At the B3LYP/Lanl2DZ level, bond distances and angles are generally accurately reproduced. Exploring the conformational space at this level of theory, we found the "Herrick conformation" with two hydrogen bonds lowest in energy in accordance with experiment. The "van Staveren" and "Xu" conformations are higher in energy by 33.9 and 63.6 kJ·mol⁻¹, respectively, which agrees well with the bonding enthalpy of water experimentally estimated to be ~ 23 kJ·mol⁻¹ per hydrogen bond. Different orientations of the amino acid side chains lead to much smaller differences in energy (< 10 kJ·mol⁻¹).

Roland A. Fischer

Anorg. Chem. II - Organometallics and Materials;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel. ++49-(0)234-3224166; Fax. ++49-(0)234-3214174
Email: Roland.Fischer@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.rub.de/acii2/>

B. Buchin, C. Gemel, T. Cadenbach, I. Fernández, G. Frenking, R. A. Fischer, *Angew. Chem.* **118** (2006) 5331-5334. "Nacktes" Ga^+ und In^+ als reine Acceptorliganden: Struktur und Bindungsverhältnisse von $[\text{GaPt}(\text{GaCp}^*)_4][\text{BAR}^{\text{F}}]$. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **45** (2006), 5207-5210. "Naked" Ga^+ and In^+ as Pure Acceptor Ligands: Structure and Bonding of $[\text{GaPt}(\text{GaCp}^*)_4][\text{BAR}^{\text{F}}]$.

Die Umsetzung von $[\text{Pt}(\text{GaCp}^*)_4]$ mit der Ga^+ Quelle $[\text{Ga}_2\text{Cp}^*][\text{BAR}^{\text{F}}]$ ($\text{Cp}^*=\text{C}_5\text{Me}_5$; $\text{BAR}^{\text{F}}=\text{B}\{\text{C}_6\text{H}_3(3,5-\text{CF}_3)_2\}_4$) resultiert in der Verbindung $[\text{PtGa}(\text{GaCp}^*)_4][\text{BAR}^{\text{F}}]$ in der ein „nacktes“ Gallium-Atom terminal an das Platinzentrum koordiniert. Das Kation $[\text{PtGa}(\text{GaCp}^*)_4]^+$ weist eine leicht verzerrte trigonal-bipyramidale Struktur mit Ga^+ in axialer Position auf. DFT-Berechnungen ergaben, dass der Ga^+ Ligand als σ -Akzeptor fungiert und die Pt-Ga-Bindung ferner durch starke π -Wechselwirkungen stabilisiert wird. Das inerte Elektronenpaar von Ga^+ besitzt hauptsächlich s-Charakter und geht keinerlei koordinative Bindungen ein. Diese Situation ist gegensätzlich zu der bei GaCp^* , welches ein schwacher π -Akzeptor ist und mit dem freien Elektronenpaar am Gallium als starker σ -Donor fungiert. Ga^+ kann koordinationschemisch somit als Analogon zum Proton, H^+ , betrachtet werden.



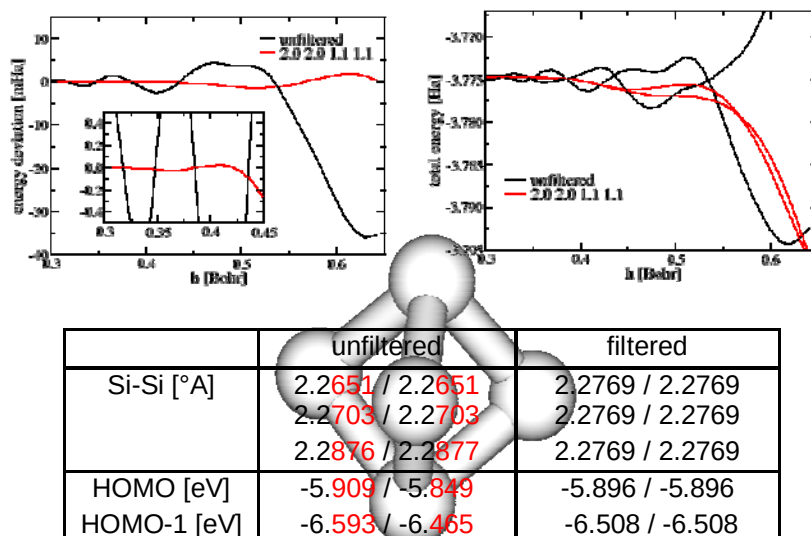
The reaction of $[\text{Pt}(\text{GaCp}^*)_4]$ with the Ga^+ source $[\text{Ga}_2\text{Cp}^*][\text{BAR}^{\text{F}}]$ ($\text{Cp}^*=\text{C}_5\text{Me}_5$; $\text{BAR}^{\text{F}}=\text{B}\{\text{C}_6\text{H}_3(3,5-\text{CF}_3)_2\}_4$) leads to the complex $[\text{PtGa}(\text{GaCp}^*)_4][\text{BAR}^{\text{F}}]$, which exhibits a “naked gallium” atom terminally coordinated to a platinum center. The cation $[\text{PtGa}(\text{GaCp}^*)_4]^+$ exhibits a slightly distorted trigonal-bipyramidal structure with the Ga^+ ligand in an axial position. DFT calculations reveal that the Ga^+ ligand serves as a σ -acceptor, and the Pt-Ga bond is additionally supported by strong π -interactions. The electron pair of Ga^+ possesses mainly s-character and does not participate in coordinative bonding. This situation is in contrast to GaCp^* , which is a rather weak π -acceptor and acts as a strong σ -donor through pronounced involvement of the lone pair at the Ga atom. From the viewpoint of coordination chemistry, Ga^+ resembles the proton, H^+ .

Rochus Schmid

Anorg. Chem. II - Organometallics and Materials;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel. ++49-(0)234-3224166; Fax. ++49-(0)234-3214174
Email: rochus.schmid@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.rub.de/aci2/schmid/>

M. Tafipolsky, R. Schmid, *J. Chem. Phys.* **124** (2006) 174102/1-174102/9. A general and efficient Pseudopotential Fourier Filtering Scheme for Real Space Methods using Mask Functions.

Realraum-Elektronenstrukturmethoden sind eine relativ neue Entwicklung. Ihre Vorteile sind unter anderem die Einfachheit der Algorithmen, Parallelisierbarkeit, sowie die Freiheit in der Wahl der Randbedingungen. Im Gegensatz zu etablierten Ebene Wellen-Methoden tritt jedoch der sog. „Eierschachtel“-Effekt auf, eine artifizielle Ortsabhängigkeit der Energie, die von hohen Fourier-Komponenten in den Pseudopotentialen herrührt. Wir schlagen eine effizientes Verfahren zur Filterung von Pseudopotentialen speziell für Realraum-Methoden vor. Es basiert auf der „mask function“-Methode, ist leicht zu implementieren, effizient und genau. Ein wesentlicher Vorteil ist, daß mit einem einheitlichen Parametersatz für verschiedene Pseudopotentiale gearbeitet werden kann. Ein ausgewogener Parametersatz wurde entwickelt und validiert. Am Beispiel eines Si_5 Clusters und dem C_{60} Molekül wurde gezeigt, daß die artifizielle Symmetriebrechung von Bindungslängen wie Orbitalenergien durch das Filter-Schema deutlich reduziert werden kann.



Real space electronic structure methods are a relatively new development. They have a number of advantages like simplicity of algorithms, parallelizability and freedom in the choice of boundary conditions. However, in contrast to the established plane wave methods they are plagued by the so called “egg box” effect, an artificial positional energy dependence, which is due to high Fourier components in the pseudo potentials. We proposed an efficient Fourier filtering scheme for pseudo potentials especially for real space calculations. It is based on the so called mask function method, is easy to implement, efficient, and accurate. A major advantage of the approach is that a generic set of parameters can be used for different pseudo potentials. A balanced parameter set is derived and validated. On the example of a Si_5 cluster and the C_{60} molecule it is demonstrated that the artificial symmetry breaking of both bond lengths and orbital energies can substantially be reduced by the filtering scheme.

Anjana Devi

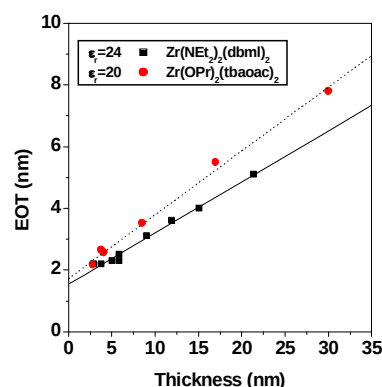
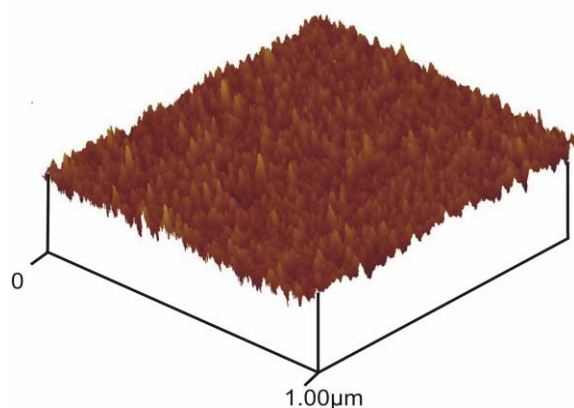
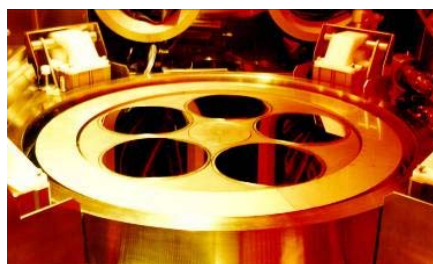
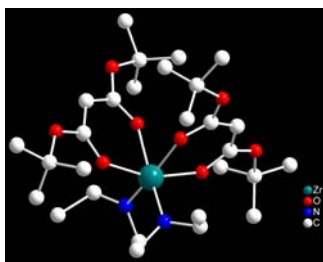
AG Chemie Anorganischer Materialien; Lehrstuhl für Anorganische Chemie II,
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

R. Thomas, A. Milanov, R. Bhakta, U. Patil, M. Winter, P. Ehrhart, R. Waser, A. Devi, *Chem. Vap. Deposition* **12** (2006) 295-300. Liquid injection MOCVD of ZrO_2 thin films using zirconium bis(diethylamido)-bis(di-tert-butylmalonato) as a novel precursor,

Die Stabilisierung des hoch reaktiven Amidkomplexes des Zirkondiethylamids mit Malonaten als chelatbildenden Liganden resultierte in einem stabilen sechsfach koordinierten monomeren Komplex, der für CVD Anwendungen geeignet erscheint. Dieser neue Zirkonbis(diethylamido)bisDi-tert-butylmalonato)-Precursor, $[\text{Zr}(\text{NEt}_2)_2(\text{dbml})_2]$, wurde in einem MOCVD Reaktor für Industrieanwendungen für ZrO_2 Dünnschichtabscheidungen charakterisiert und getestet. Elektrische Eigenschaften wurden auf Pt/ ZrO_2 / SiO_x /Si Kondensator Strukturen untersucht. Die relative Dielektrizitätskonstante erreichte den Rohwert von 24 und die Leckströme für typische 4nm dicke Schichten lagen unterhalb von 10^{-4} A/cm^2 bei einer Vorspannung von -1 V. Daher zeigen die Precursor viel versprechende Eigenschaften für mögliche Anwendungen bei der Abscheidung von high-k Gate oxidischen (MIS) und high-k dielektrischen (MIM) Strukturen.



The stabilization of the highly reactive amide complexes of Zirconium diethylamide with malonates as chelating ligands lead to a stable six coordinated monomeric complex which show promise for CVD applications. This novel precursor Zirconium bis(diethylamido)bis(di-tert-butylmalonato), $[\text{Zr}(\text{NEt}_2)_2(\text{dbml})_2]$, was characterized and tested in a production type MOCVD reactor for ZrO_2 thin film deposition. Electrical properties were investigated for Pt/ ZrO_2 / SiO_x /Si capacitor structures. Relative dielectric permittivity reached the bulk value of 24 and leakage currents for typically 4nm thick films were below 10^{-4} A/cm^2 at a bias of -1V. Hence, the precursor shows promising properties for possible application for the deposition of high-k gate oxide (MIS) and high-k dielectric (MIM) structures.

Martin Feigel

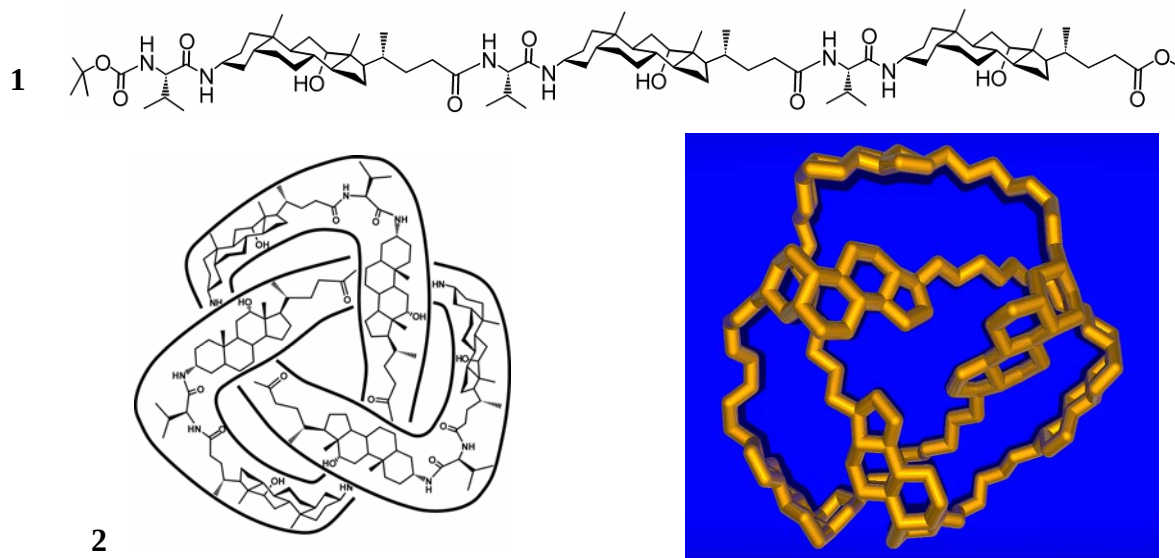
Organische Chemie - Naturstoffchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3226239; FAX: ++49-(0)234-3214497

email: feigel@indi-f.nsc.rub.de

M. Feigel, R. Ladberg, S. Engels, R. Herbst-Irmer, R. Fröhlich *Angew. Chem.* **118** (2006) 5827-5831. Ein Kleeblattknoten aus Aminosäuren und Steroiden. *Angew. Chem. Int. Ed.* **45** (2006) 5698-5702. A Trefoil Knot Made of Amino Acids and Steroids.

Bisher sind nur wenige molekulare Systeme bekannt, in denen Makrocyclen die Topologie eines Knotens besitzen. Die erste erfolgreiche Synthese derartiger Strukturen verwendete Kupfer-Phenanthrolin-Komplexe, um die benötigte Kettenüberkreuzungen zu induzieren; alternative Wege basieren auf DNA Oligonucleotiden oder auf der Reaktion von 2,6-Pyridine-Dicarbonsäurechloriden und p-Aminodiphenylmethanen. Erstmals wird in der vorliegenden Arbeit gezeigt, daß die Cyclisierung eines Peptids zu molekularen Knoten führen kann. So erhält man nach Entschützung und Aktivierung des linearen Hexapeptids **1** aus Valin und Aminocholansäure unter Cyclodimerisierung den Macrocyclus **2** in 26% Ausbeute. Die Verbindung hat nach NMR-Daten und nach Röntgenbeugung die Topologie eines Kleeblattknotens. Der Knoten besitzt eine polare innere und eine unpolare äußere Oberfläche. Die Position der Seitenketten der Aminosäuren wird durch die Sequenz bestimmt. Wir erwarten, daß derartige Systeme molekulare Gäste sequenzabhängig einschließen und evtl. sogar katalytisch umwandeln.



A few chemical systems are known in which cyclic molecules adopt the topology of a knot. The first successful synthetic approach to this type of knotted cycles used copper-phenanthroline complexes to achieve the necessary chain crossing, an alternative method is based on DNA oligonucleotides or uses the condensation of 2,6-pyridine-dicarboxylic acid chloride and a p-diamino-diphenylmethane derivatives. The present study demonstrates that peptides can be cyclized to form a molecular knots. Deprotection and activation of the linear precursor **1** made from valine and an amino cholanic acid yields the macro cycle **2** in 26% yield. The compound has the topology of a trefoil knot based on nmr data and on a X-ray structure analysis. The knot is bowl shaped and has a non polar outer and a polar inner surface. The spatial arrangement of the side chains of the amino acids is determined by the sequence. We are looking forward whether similar knots are able to encapsulate and transform molecular guests.

John McCaskill

Biomolecular Information Processing; Ruhr-Universität Bochum; D-44780

Tel: ++49-(0)231-97426420; FAX: ++49-(0)231-97426426

Email: John.McCaskill@ruhr-uni-bochum.de

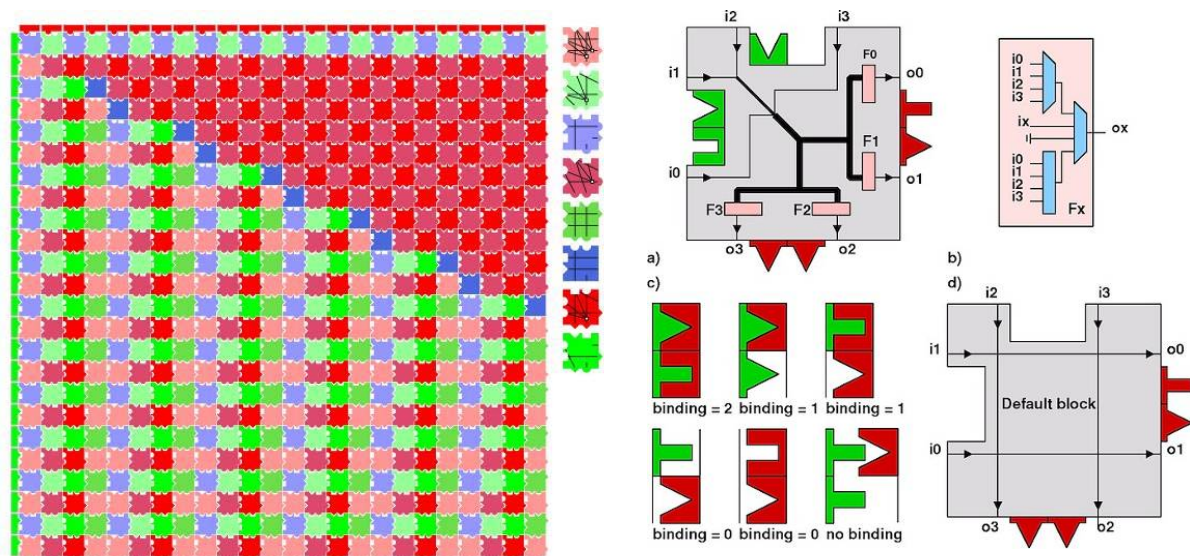
<http://www.biomip.ruhr-uni-bochum.de/>

M.A. Bedau, A. Buchanan, G. Gazzola, M. Hanczyc, T. Maeke, J.S. McCaskill, I. Poli, and N.H. Packard, *Artificial Evolution (Springer-Verlag Berlin)* **3871** (2006) 201-212. Evolutionary design of a DDPD model of ligation.

R.M. Füchslin, T. Maeke, U. Tangen and J.S. McCaskill, *Advances in Complex Systems* **9(1-2)** (2006) 1-29. Evolving inductive generalization via genetic self-assembly.

Genetic self-assembly is a technique for building complex systems by self-assembly from a small set of genetically encoded types of components. One particularly important case is circuit design, and here we have completed the full evolution of complex circuits from scratch, focusing primarily on the example of digital multipliers.

We have demonstrated the ability of genetic self-assembly to find general scalable solutions to complex tasks such as multiplication, in contrast with earlier efforts to evolve multiplier circuits. We have analysed this ability to generalize and applied the approach to other circuit problems.



„Genetic Self-Assembly“ ist eine Technik für den Bau komplexer Systeme durch genetisch kodierte selbst-assemblierende Komponenten. Besonders hervorzuheben ist das Schaltkreisdesign. Hier wurde der vollständige Entwicklungszyklus komplexer Schaltkreise ausgeführt, unter spezieller Berücksichtigung digitaler Multiplizierer.

Es konnte gezeigt werden, dass es möglich ist, mit Hilfe von „Genetic Self-Assembly“ allgemeine skalierbare Lösungen für komplexe Aufgaben wie die digitale Multiplikation zu finden, im Gegensatz zu früheren Versuchen, Multiplizierer-Schaltkreise zu evolvieren. Wir analysierten die Fähigkeit der Methode zur Generalisierung und für die Anwendung auf andere Schaltkreis-Design-Probleme.

Wolfram Sander

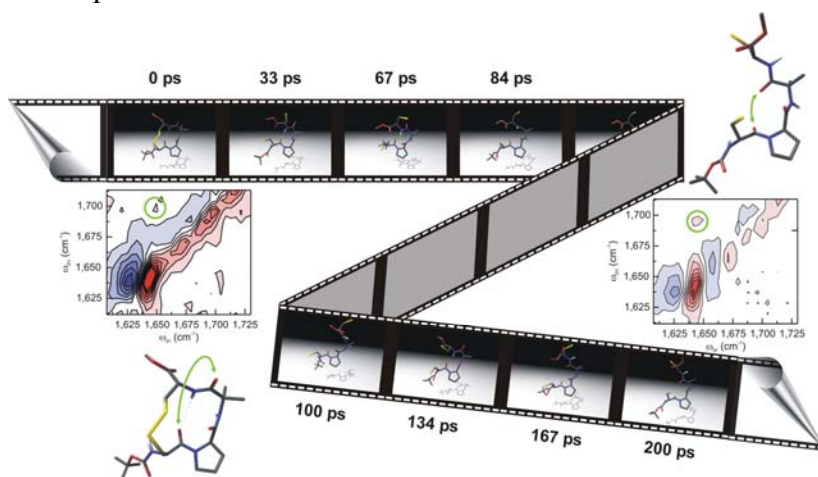
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: wolfram.sander@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2>

C. Kolano, J. Helbing, M. Kozinski, W. Sander, P. Hamm, *Nature* (2006) **444**, 469 – 472.
Ultrafast β -Turn Opening Observed by Transient 2D-IR Spectroscopy

Proteine, die molekularen Maschinen unserer Zellen, schaffen es, ihre Struktur und somit ihre Funktion binnen Pikosekunden zu verändern. Mit der zweidimensionalen Infrarotspektroskopie ist es einem Team aus Züricher und Bochumer Forschern erstmals gelungen, diese sehr schnellen Bewegungen von Peptiden – kurzen Proteinstücken – zu filmen. Die Methode erlaubt es zu bestimmen, ob zwei molekulare Gruppen im Peptid zu einem bestimmten Zeitpunkt benachbart sind oder nicht und eignet sich daher für die experimentelle Überprüfung von theoretischen Modellen. Es ist gelungen, die superschnelle Veränderung eines kleinen Peptids sichtbar zu machen; sie „filmten“ buchstäblich das Peptid, während es sich von einer Struktur in eine andere umwandelte. Verwendung fand hierbei eine neuartige spektroskopische Methode, die so genannte zweidimensionale Infrarotspektroskopie. Diese ermöglicht es zu bestimmen, ob zwei molekulare Gruppen im Peptid zu einem bestimmten Zeitpunkt räumlich benachbart sind oder nicht.



Understanding biomolecular processes at the atomic level means determining the unique and highly organized functional three dimensional structure in which biomolecules fold, as well as dynamic interconversions between conformations. Our view of biomolecules is mainly based on the static architecture, probed by X-ray and neutron scattering methods and nuclear magnetic reso-

nance (NMR). Changes in these architectures on ultrafast timescales, however, are very difficult or impossible to observe by these techniques. Time resolved X-ray crystallography has recently been demonstrated, resolving the photodissociation of CO from myoglobin on a subnanosecond timescale. 2D-NMR spectroscopy, in contrast, is intrinsically very slow, in particular in the non-equilibrium regime. 2D-IR spectroscopy measures local contacts between molecular groups through the coupling between vibrational transitions, similar as 2D-NMR spectroscopy does for spins, however, it is many orders of magnitudes faster. Here, we report on real time observation of the structural transition of a secondary structure motif of proteins, the opening of a β -turn, using transient 2D infrared (T2D-IR) spectroscopy which extends the 2D-IR experiment into the non-equilibrium regime. Snapshot 2D-IR spectra illustrate the weakening of the intramolecular hydrogen bond and the concomitant opening of the β -turn by steady change of the corresponding crosspeak on a time scale of a few hundred picoseconds. Transient 2D-IR spectroscopy combines microscopic structural information with picosecond time resolution, providing an atomic view on dynamic processes that can directly be linked to molecular dynamic (MD) simulations. We demonstrate that local native contacts in a peptide backbone can form two orders of magnitude faster than the „folding speed limit“ established for contact formation between side chains.

Holger F. Bettinger

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

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

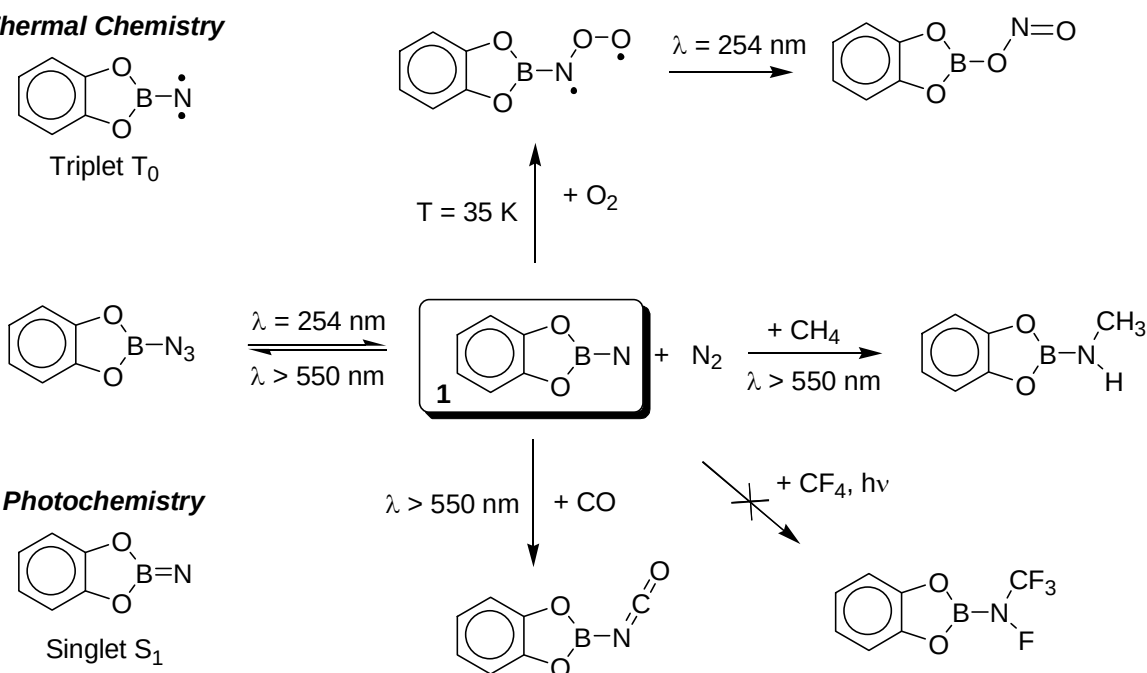
email: Holger.Bettinger@ruhr-uni-bochum.de

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

Holger F. Bettinger, Holger Bornemann, *J. Am. Chem. Soc.* **128** (2006) 11128-11134. Donor Stabilized Borylnitrene: A Highly Reactive BN Analogue of Vinylidene.

Das isoelektronische Verhältnis zwischen CC und BN ist in der Chemie stabiler Verbindungen schon lange gut untersucht, nicht jedoch im Falle von reaktiven Zwischenstufen. So waren die BN-Analoga der sehr reaktiven Vinylidene R_2CC , die Borylnitrene R_2BN , bisher unbekannt. Wir konnten als erstes Beispiel dieser Stoffgruppe das Borylnitren **1** durch Photolyse der dioxasubstituierten Borazide in Inertgasmatrizes isolieren und charakterisieren. Studien der chemischen Reaktivität gegenüber offen- und geschlossenschaligen Molekülen zeigen, dass das Borylnitren **1** thermisch aus seinem Triplettgrundzustand T_0 heraus reagiert, während nach photochemischer Anregung die den Vinylidenen analoge Chemie aus S_1 heraus beobachtet wird: die Reaktion mit molekularem Stickstoff und die Insertion in die CH-Bindungen von Methan bei 10 K sind in der Tat sehr ungewöhnlich für Nitrene.

Thermal Chemistry



The isoelectronic relationship between CC and BN groups has been well studied in the chemistry of stable compounds, but not in the field of reactive intermediates. The BN analogues of the highly reactive vinylidenes R_2CC , the borylnitrenes R_2BN , have not been characterized so far. We could isolate and characterize the first example of a borylnitrene **1** in inert gas matrixes by photolysis of the corresponding dioxasubstituted borylazide. Investigations of the reactivity towards open-shell and closed shell molecules show that **1** reacts thermally from its triplet ground state T_0 , but after photophysical excitation the typical vinylidene chemistry, arising from the S_1 state, is observed: the reaction with molecular nitrogen and the insertion into the CH bond of methane already at 10 K are indeed very unusual for nitrenes.

Götz Bucher

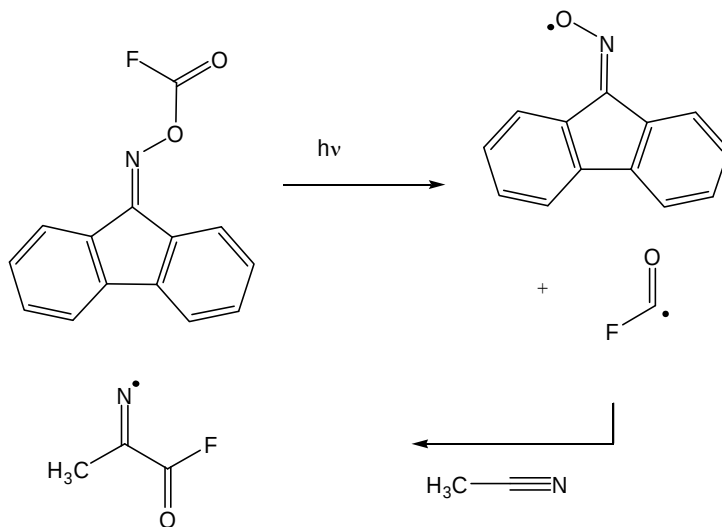
Lehrstuhl für Organische Chemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

G. Bucher, C. Kolano, O. Schade und W. Sander, *J. Org. Chem.* **71** (2006), 2135-2138. A Time-Resolved Infrared Study on the Photochemistry of *O*-Fluorocarbonyl- and *O*-Chlorooxalyl-9-fluorenone Oxime: The Reactivity of the Fluorocarbonyl Radical in Acetonitrile Solution.

Photolyse von *O*-Fluorcarbonyl-9-fluorenonoxim führt zur Bildung des Fluorcarbonylradikals F-C(O), das mittels STEP/SCAN zeitaufgelöster Infrarotspektroskopie detektiert werden kann ($\tilde{\nu}_{\text{CO}} = 1832 \text{ cm}^{-1}$). FCO ist in Acetonitril-Lösung hochgradig instabil und addiert effizient ($\tau = 3.3 \pm 0.7 \text{ } \mu\text{s}$) an das Nitril-Kohlenstoffatom des Lösungsmittels, wobei ein Iminylradikal ($\tilde{\nu}_{\text{CO}} = 1825 \text{ cm}^{-1}$) gebildet wird, das seinerseits mit einer Lebensdauer $\tau = (5.0 \pm 0.7) \text{ } \mu\text{s}$ zerfällt. Wird die Lösung mit Sauerstoff gespült, so wird keine Bildung des Fluorcarbonylperoxyradikals F-C(O)OO beobachtet. Rechnungen auf dem UCCSD(T)/cc-pVTZ Niveau zeigen, daß die Reaktion von FCO mit Triplett-Sauerstoff eine berechnete Aktivierungsenthalpie $\Delta H^\ddagger = 3.2 \text{ kcal / mol}$ aufweist. Wegen der geringen Konzentration von Sauerstoff in mit Sauerstoff gesättigtem Acetonitril ($[\text{O}_2] \sim 0.01 \text{ M}$) kann die Reaktion mit O_2 daher nicht mit der Addition an das Lösungsmittel konkurrieren.



Photolysis of *O*-fluorocarbonyl-9-fluorenone oxime leads to formation of the fluorocarbonyl radical F-C(O), which can be detected by STEP/SCAN time resolved IR spectroscopy ($\tilde{\nu}_{\text{CO}} = 1832 \text{ cm}^{-1}$). FCO is highly unstable in acetonitrile solution and adds efficiently ($\tau = 3.3 \pm 0.7 \text{ } \mu\text{s}$) to the nitrile carbon atom of the solvent. An iminyl radical ($\tilde{\nu}_{\text{CO}} = 1825 \text{ cm}^{-1}$) is formed in this reaction, which in turn decays with a lifetime $\tau = (5.0 \pm 0.7) \text{ } \mu\text{s}$. If the solution is purged with oxygen, formation of the fluorocarbonyl peroxy radical F-C(O)OO is not detected. Calculations at the UCCSD(T)/cc-pVTZ level of theory indicate an activation enthalpy $\Delta H^\ddagger = 3.2 \text{ kcal / mol}$ for the reaction of FCO with triplet oxygen. Due to the low oxygen concentration ($[\text{O}_2] \sim 0.01 \text{ M}$) in oxygen-saturated acetonitrile the reaction with O_2 cannot compete with addition to the solvent

Gerald Dyker

Org. Chem. - Organische Synthese und Katalyse; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

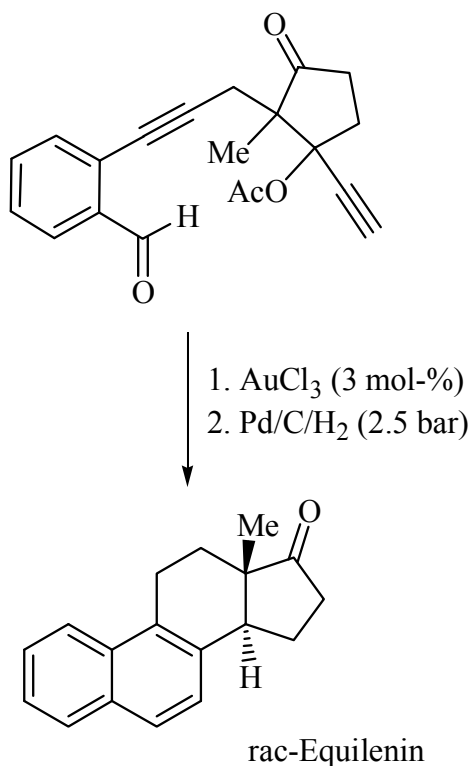
Tel.: ++49-(0)234-3224551; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: Gerald.Dyker@rub.de

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

G. Dyker, D. Hildebrandt, *J. Org. Chem.* **71** (2006) 6728-6733. A Gold-Catalyzed Domino Process to the Steroid Framework

Equilenin ist ein Steroid mit oestrogener Aktivität, das ursprünglich aus dem Harn schwangerer Stuten isoliert wurde. Als Komponente von Premarin, eines wichtigen US-Medikaments für die Hormonersatztherapie, kommt diesem Steroid besondere Bedeutung zu. Uns gelang die rationelle Totalsynthese von racemischem Equilenin mit einer konvergenten Synthesestrategie, die eine Gold-katalysierte Dominocyclisierung und eine Palladium-katalysierte Hydrierung als Schlüsselschritte nutzt.



Equilenin is an oestrogenic active steroid from the urine of pregnant mares. As a component of Premarin - one of the most widely used drugs in the US – it gains special importance for the hormone replacement therapy. We succeeded in the total synthesis of *rac*-equilenin by a convergent approach, making use of a gold-catalyzed domino cyclization combined with a palladium-catalyzed hydration as key steps.

Christof Wöll

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

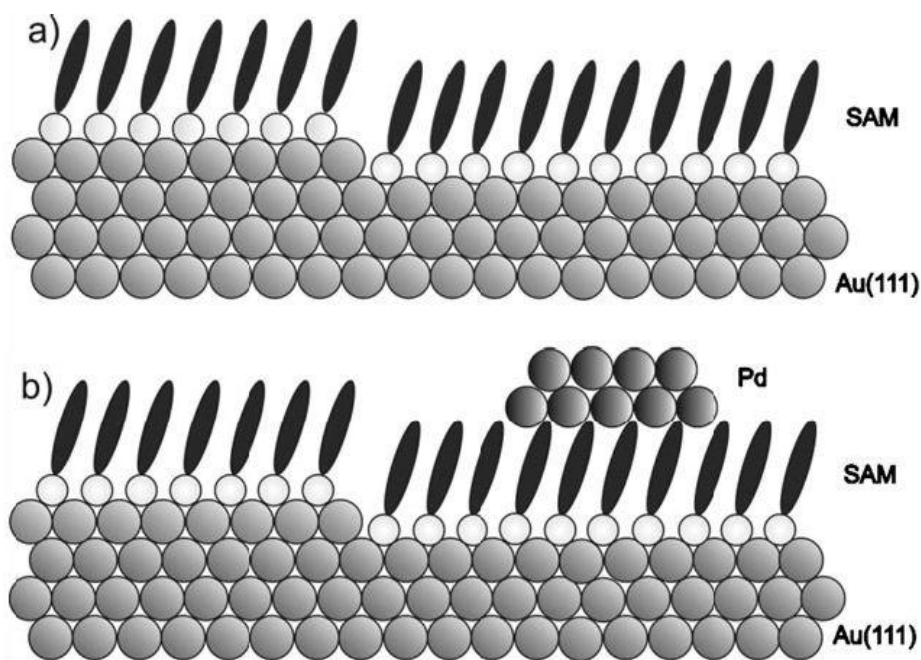
Tel.: ++49-(0)234-3225529; FAX: ++49-(0)234-3214182

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

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

O. Shekhah, C. Busse, A. Bashir, F. Turcu, X. Yin, P. Cyganik, A. Birkner, W. Schuhmann, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 3375-3378 (2006). Electrochemically deposited Pd islands on an organic surface: The presence of Coulomb blockade in STM I(V) curves at room temperature.

Palladium-Inseln mit einer Dicke von wenigen Monolagen wurden auf einer aus 4-Mercaptopyridin aufgebauten selbstorganisierenden Monoschicht (SAM) deponiert. Bei der elektrischen Charakterisierung dieser Metallinseln mittels Rastertunnelmikroskopie (STM) wurden interessanterweise klare Hinweise auf eine Coulomb-Blockade beobachtet. Dies ist ein eindeutiger Hinweis darauf, dass diese Kontakte „perfekt“ sind, strukturelle Defekte wie etwa Kurzschlüsse durch in die Monoschicht eindiffundierte Pd-Atome können ausgeschlossen werden. Der Transport der Elektronen kann nur durch den quantenmechanischen Tunneleffekt erfolgen. Die erfolgreiche Herstellung derartiger „perfekter“ metallischer Kontakte auf organische Materialien ist von großer Bedeutung für die organische Elektronik.



Palladium islands with a thickness of a few monolayers were deposited on top of a self-assembled monolayer (SAM) fabricated from 4-mercaptopyridine. Interestingly, during electrical characterization of these metal islands by scanning tunnel microscopy (STM) a Coulomb-blockade was observed. This is a clear hint that these contacts are „perfect“: structural defects due to Pd atoms diffusing into the SAM layer can be excluded; electron transport can only occur via quantum mechanical tunneling. The successful production of such „perfect“ metallic contacts on organic substrates is of pronounced importance in the field of organic electronics.

Gregor Witte

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

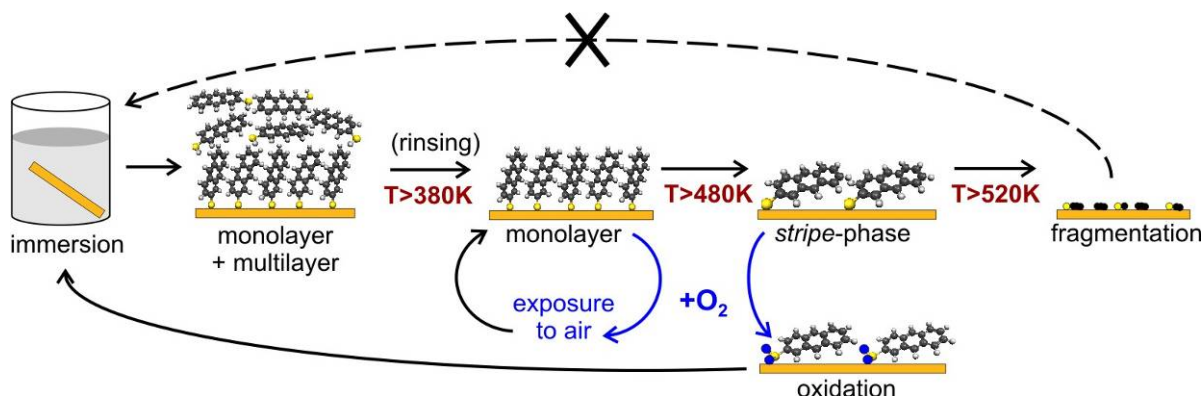
Tel.: ++49-(0)234-32 24222; FAX: ++49-(0)234-32 14182

email: Witte@pc.rub.de

<http://www.pc.rub.de>

D. Käfer, G. Witte*, P. Cyganik, A. Terfort, Ch. Wöll, J. Am. Chem. Soc. **128** (2006) 1723.
A Comprehensive Study of Self-Assembled Monolayers of Anthracene-thiol on Gold: Solvent Effects, Structure and Stability

Aufgrund ihrer hohen Leitfähigkeit sind selbstassemblierende Monolagen (SAMs) mit einem vollständig aromatischen Rückrad besonders vielversprechend für molekular-elektronische Anwendungen. Im Falle von Anthracene-2-thiol-SAMs, die auf Au(111)-Substraten abgeschieden wurden, konnte die Filmstruktur sowie ihre thermische und chemische Stabilität detailliert analysiert werden. Dabei zeigte sich, dass die Qualität der resultierenden Filme kritisch von der Wahl des Lösungsmittels abhängt und sich aufgrund der geringen Löslichkeit auch Multilagen bilden, die sich nur durch intensiven Spülen verhindern lassen. Durch Heizen lässt sich die dichtgepackte gesättigte Monolage in eine verdünnte Phase überführen, bei der die Moleküle nahezu parallel zur Substratoberfläche liegen, während weiteres Heizen eine Fragmentierung bewirkt. Im Gegensatz zur gesättigten Monolage, die an Luft stabil ist, sind die Ankergruppen der verdünnten Phase wenig geschützt was zu einer schnellen Oxidation der Schwefelgruppen an Luft führt.



The formation and molecular structure of self-assembled monolayers (SAMs) of anthracene-2-thiol (AnT) on Au(111) have been characterized by reflection adsorption infrared spectroscopy, thermal desorption spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy, near-edge X-ray absorption spectroscopy, scanning tunneling microscopy and low energy electron diffraction. It is demonstrated that highly ordered monolayer films are formed upon immersion but their quality depends critically on the choice of solvents and rinsing conditions. The saturated monolayer is characterized by a closed packed arrangement of upright standing molecules forming a $(2\sqrt{3} \times 4)\text{rect}$ unit cell. At about 450K a partial desorption takes place and the remaining molecules form a dilute (4×2) -phase with an almost planar adsorption geometry, while further heating above 520K causes a thermally induced fragmentation. According to their different densities both phases reveal very diverse chemical reactivities. Whereas the saturated monolayer is stable and inert under ambient conditions, the dilute phase does not warrant any protection of the sulfur head groups which oxidize rapidly in air.

Christian Herrmann

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

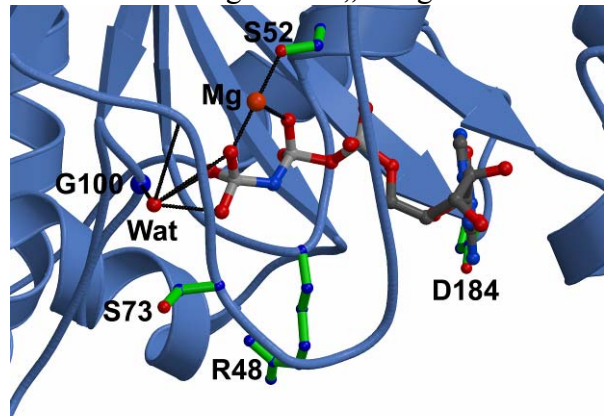
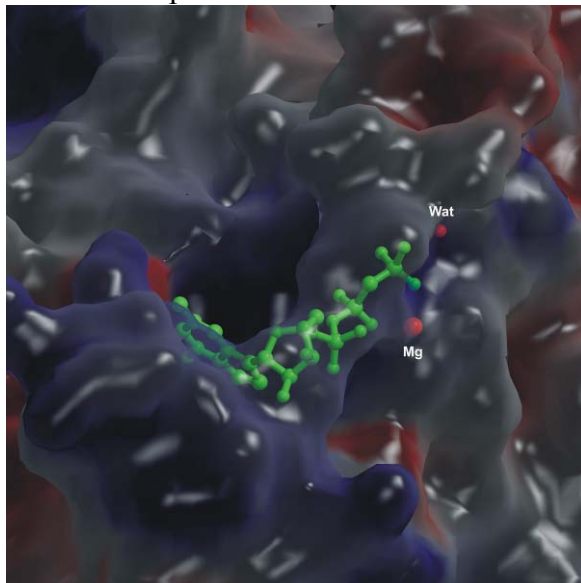
Tel.: ++49-(0)234-3224173; FAX: ++49-(0)234-3214785

email: chr.herrmann@ruhr-uni-bochum.de

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

A. Ghosh, G.J.K. Praefcke, L. Renault, A. Wittinghofer, C. Herrmann, *Nature* **440** (2006) 101-104. How Guanylate Binding Proteins achieve assembly-stimulated processive cleavage of GTP to GMP.

GTP-bindende Proteine aus der Dynamin-Familie wie das hGBP1 bilden in Abhängigkeit vom gebundenen Nukleotid Homo-Dimere und höhere Oligomere. Das führt zu einer Stimulation der GTP-Hydrolyseaktivität, die wiederum strukturelle Veränderungen des Proteinkomplexes nach sich zieht und damit die biologische Wirkung erzielt (z. B. bei Dynamin das Abschnüren von Vesikeln aus der Membran). Mit biophysikalischen und röntgenkristallografischen Methoden konnten wir den molekularen Mechanismus der sukzessiven Abspaltung vom β - und γ -Phosphat des GTP aufklären. Dabei zeigte sich, dass das katalytische Zentrum erst nach der GTP-Bindung und anschließenden Dimerisierung des hGBP1 durch Positionierung einer Arginin-Seitenkette (R48) komplettiert wird. Besonders interessant ist die Beobachtung, dass für beide katalytischen Vorgänge dieselbe katalytische Maschinerie des Proteins in unveränderter Konformation verwendet wird; zur Abspaltung des zweiten Phosphatrestes wird das Nukleotid innerhalb der Bindungstasche „nachgeschoben“.



Interferons are immuno-modulatory cytokines that mediate anti-pathogenic and anti-proliferative effects in cells. The interferon- γ -inducible human guanylate binding protein 1 (hGBP1) belongs to the family of dynamin-related large GTP-binding proteins which share biochemical properties not found in other families of GTP-binding proteins such as nucleotide-dependent oligomerization and fast co-operative GTPase activity. hGBP1 has the additional property to cleave GTP by two consecutive cleavage reactions to GMP. Our observations in crystal structures and biophysical experiments reveal the molecular basis for nucleotide-dependent homo-dimerization and GTP cleavage. Just like effector binding in other GTP-binding proteins, homo-dimerization is regulated by structural changes of the switch regions. It generates a conformation where an arginine finger and a serine are oriented for efficient catalysis. Positioning of the substrate for the second hydrolysis step is achieved by a nucleotide shift that positions the β -phosphate into the γ -phosphate binding site.

Martina Havenith

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

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

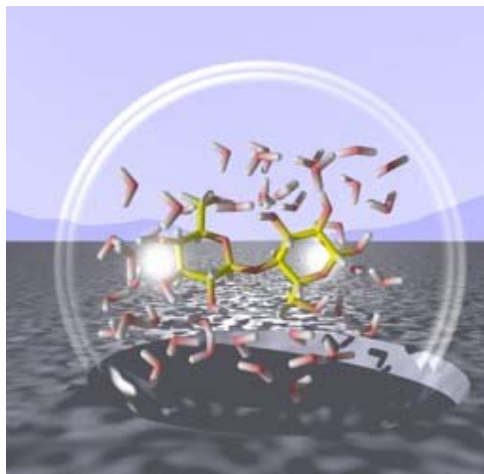
email: martina.havenith@rub.de

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

U. Heugen, G. Schwaab, E. Bründermann, M. Heyden, X. Yu, D.M. Leitner, M. Havenith, *PNAS* **103**, (2006) 12301. Solute-induced retardation of water dynamics probed directly by THz spectroscopy.

It was known that mono- and disaccharides have a significant stabilization effect on proteins and membranes in a dehydrated or frozen state. However, what remained so far unanswered is whether a direct binding of the sugar to the proteins causes this or whether the sugar causes a slowing of the water dynamics, which in turns leads to reduced activity of the proteins.

Using THz spectroscopy it was possible to probe the changes in the collective motions of the water network around a disaccharide, lactose, on the sub-psec time scale. Short time scales are particularly important towards characterizing the hydration layer since bulk and hydration water exchange continuously. Using a new, powerful THz laser source it was possible to observe the motions of the water surrounding lactose. This was combined with molecular dynamics simulations, which revealed the nature of the observed changes as due to a retardation of the water dynamics. The result of the study showed that one lactose molecule retards about 123 water molecules surrounding it! The hydration layer around lactose was determined to extend to (5.13 ± 0.24) Å. This supports the idea that bio-protection of sugars is caused by their ability to affect the water dynamics implying that water is not just a passive but an active player in the game.



Es ist bekannt, dass Mono- und Disaccharide einen stabilisierenden Effekt auf dehydrierte oder gefrorene Proteine und Membrane haben. Unklar blieb bisher allerdings, ob dieser Effekt durch eine direkte Zucker-Protein-Wechselwirkung oder eine verzögerte Wasserdynamik und damit eine reduzierte Proteinaktivität verursacht ist.

Mittels THz-Spektroskopie war es uns möglich, die Veränderungen in den kollektiven Bewegungen des Wassernetzwerks in der Umgebung des Disaccharids Laktose in sub-psec-Bereich zu untersuchen. Kurze Zeitskalen sind besonders wichtig für die Charakterisierung der Hydrathülle, da Volumenwasser und Hydratwasser ständig Moleküle miteinander austauschen.

Mit einem neuen, leistungsstarken THz-Laser war es möglich, die Bewegungen der die Laktose umgebenden Wassermoleküle zu beobachten. Die Messungen wurden durch eine Molekulardynamik-Simulation kombiniert, die die gemessenen Änderungen auf eine Verlangsamung der Wasserdynamik zurückführt. Das Ergebnis unserer Studie zeigt, dass ein einzelnes Laktosemolekül ca. 123 Wassermoleküle in seiner Umgebung beeinflusst. Die Hydrathülle um Laktose erstreckt sich demnach bis zum Abstand von (5.13 ± 0.24) Å. Diese Messung unterstützt die Hypothese, dass die Schutzwirkung von Zuckern durch ihre Fähigkeit zur Änderung der Wasserdynamik bestimmt ist. Wasser ist also kein passives Medium, sondern aktiv an diesem Schutzmechanismus beteiligt.

Hermann Weingärtner

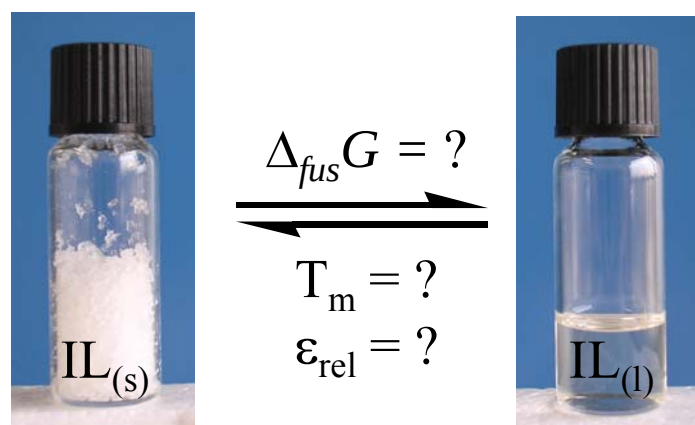
Physikalische Chemie II - Physikalische Chemie der Flüssigkeiten, Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

email: hermann.weingaertner@rub.de

I. Krossing, J. M. Slattery, C. Daguenet, P. J. Dyson, A. Oleinikova, H. Weingärtner, *J. Amer. Chem. Soc.*, **128** (2006) 13427-13434. Why are Ionic Liquids liquid? A Simple Explanation based on Lattice and Solvation Energies.

Ionische Flüssigkeiten sind bei Raumtemperatur flüssige organische Salze, die aufgrund ihrer besonderen Material- und Lösungsmittleigenschaften als Reaktionsmedien für innovative Verfahren in Labor und Technik von zunehmendem Interesse sind. In Zusammenarbeit mit Gruppen an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg und École Polytechnique Fédérale de Lausanne wurde ein Modell entwickelt, das die niedrigen Schmelzpunkte dieser Salze durch ihre geringen Gitterenergien und durch hohe Entropiegewinne in der flüssigen Phase quantitativ erklärt. Das Modell ermöglicht die Vorhersage von Schmelzpunkten, zum Beispiel bei der Entwicklung von anwendungsspezifischen Salzen. Bei bekanntem Schmelzpunkt erlaubt das Modell die experimentell schwierig zu bestimmende dielektrische Konstante vorherzusagen, die ihrerseits Aussagen über das Lösungsmittelverhalten ermöglicht. Die Arbeit wurde von zwei führenden Fachzeitschriften als Highlight gewürdigt (*Science*, **134** (2006) 19; *Anal. Chem.* (2006) 7906).



Ionic Liquids are room-temperature molten organic salts with peculiar materials and solvent properties which are of large interest as reaction media for innovative technologies in laboratory and industry. In collaboration with groups at the University of Freiburg and the École Polytechnique Fédérale de Lausanne we have developed a model which quantitatively rationalizes the low melting points of such salts in terms of their low lattice energies and highly favorable entropies in the liquid state. The model can be used to predict melting points for designing task-specific solvents. If the melting point is known, the model enables the prediction of the salt's dielectric constant, which is highly difficult to measure. Knowledge of the dielectric constant allows an assessment of the solvent behavior. Two leading journals discussed the paper in their Science Highlights sections (*Science*, **134** (2006) 19; *Anal. Chem.* (2006) 7906;

Gerhard M. Schneider

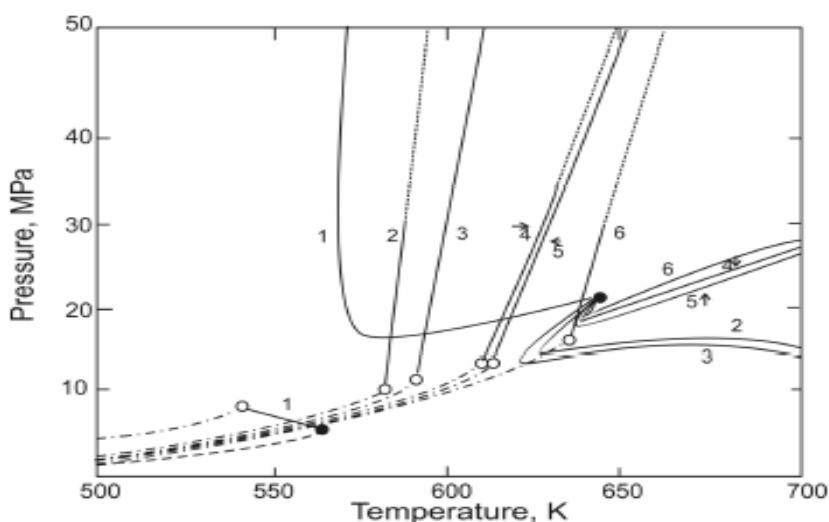
Lehrstuhl für Physikalische Chemie II, Fakultät für Chemie und Biochemie, Ruhr-Universität
Bochum, D-44780 Bochum

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

email: Gerhard.Schneider@ruhr-uni-bochum.de

E. Brunner, M.C. Thies, G.M. Schneider, *J. Supercritical Fluids* **39(2)** (2006) 160 - 173.
Fluid mixtures at high pressures: Phase behavior and critical phenomena for binary mixtures of water with aromatic hydrocarbons.

Binary mixtures of water and hydrocarbons exhibit complex phase behavior. Here the behavior with larger hydrocarbons is still only partially studied. Such systems are of technological interest (e.g., hydrolysis of plastics etc. for recycling; destruction of hazardous wastes (such as polychlorinated biphenyls); environmentally benign catalysis). We report on the investigation of binary mixtures of water with more than twenty higher molecular weight hydrocarbons mostly aromatic in nature from benzene to pyrene, including some polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). Liquid-gas (lg) and liquid-liquid (ll) critical curves, three-phase liquid-liquid-gas (llg) lines, and upper critical end points (UCEPs) were all measured in a constant-volume optical cell by visual observation.



P-T projection for binary mixtures of polycyclic hydrocarbons + water (homogeneous fluid states in the upper right corner of the diagram): 1 = benzene; 2 = naphthalene; 3 = 1-methylnaphthalene; 4 = anthracene; 5 = phenanthrene; 6 = pyrene (— = binary critical curve; - - - = three-phase line llg; ····· = vapor pressure curve of pure component; o = critical endpoint; • = critical point of pure component)

Binäre Mischungen von Wasser und Kohlenwasserstoffen zeigen ein komplexes Phasenverhalten, besonders nahe dem kritischen Punkt von Wasser. Obwohl das Phasenverhalten von Wassermischungen mit Kohlenwasserstoffen relativ kleiner Molmasse gut untersucht ist, ist über das Verhalten solcher Mischungen mit Kohlenwasserstoffen grösserer Molmasse nur wenig bekannt. Solche Systeme sind von technischem Interesse. In der vorliegenden Arbeit wird über Untersuchungen an mehr als zwanzig binären Wassermischungen mit zumeist aromatischen Kohlenwasserstoffen höherer Molmasse (von Benzol bis Pyren einschließlich einiger polycyclischer Verbindungen) berichtet. Es wurden flüssig-gasförmig (lg) und flüssig-flüssig (ll) kritische Kurven, Dreiphasenkurven flüssig-flüssig-gasförmig (llg) und obere kritische Endpunkte (UCEPs) in einer optischen Meßzelle mit konstantem Volumen bei visueller Detektion ohne Probenahme gemessen.

William. S. Sheldrick

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

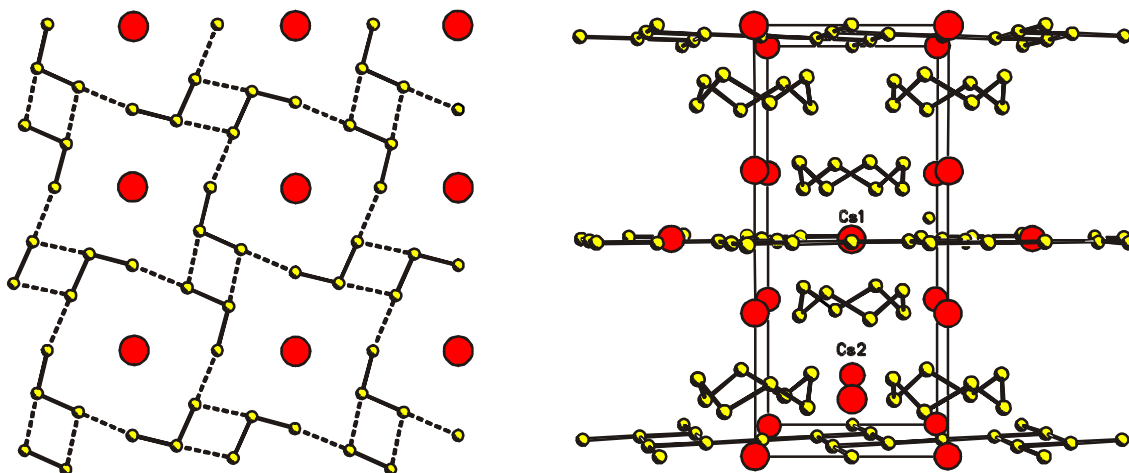
Tel: ++49(0)234-3224192; Fax: ++49-(0)234-3214420

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

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

A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 191 - 194. $\text{Cs}_3\text{Se}_{22}$, a selenium-rich caesium polyselenide containing Se_8 crowns and ${}^2_\infty[\text{Se}_6^{3-}]$ anions with radical character.

The selenium-rich caesium polyselenide $\text{Cs}_3\text{Se}_{22}$ was prepared under methanolothermal reaction conditions and contains planar sheets ${}^2_\infty[\text{Se}_6^{3-}]$, that are separated by discrete Se_8 crowns. Associated pairs of Se_3^{2-} and $\text{Se}_3^{\bullet-}$ anions are linked through weak secondary bonds within the polymeric anions. The triselenide anion $\text{Se}_3^{\bullet-}$, whose radical character was confirmed by EPR measurements, represents only the second polyselenide of this type following the red-brown $\text{Se}_2^{\bullet-}$ anion, that can be trapped as a colour centre in synthetic ultramarines. Previous caesium polyselenides were restricted to Cs_2Se_3 , Cs_2Se_5 and Cs_2Se_8 . It is interesting to compare $\text{Cs}_3\text{Se}_{22}$ with $\text{Cs}_3\text{Te}_{22}$, which we prepared in 1995. Although both phases are isostructural, the metallic polytelluride sheets differ from the ${}^2_\infty[\text{Se}_6^{3-}]$ anions in exhibiting a thinned 4^4 network comprising of Te_4 squares linked by linear Te_3 units.



Das selenreiche Cäsiumpolyselenid $\text{Cs}_3\text{Se}_{22}$ konnte unter methanolothermalen Reaktionsbedingungen isoliert werden und enthält planare Schichten ${}^2_\infty[\text{Se}_6^{3-}]$, die durch isolierte Se_8 -Kronen voneinander getrennt werden. Assoziierte Paare von Se_3^{2-} und $\text{Se}_3^{\bullet-}$ -Anionen werden miteinander über schwache sekundäre Bindungen innerhalb der Polyanionen verknüpft. Das Triselenidanion $\text{Se}_3^{\bullet-}$, dessen Radikalcharakter durch EPR-Messungen bestätigt wurde, stellt nach dem rot-braunen $\text{Se}_2^{\bullet-}$ -Anion erst das zweite Polyselenid dieser Art dar. Bisher waren nur die Cäsiumpolyselenide Cs_2Se_3 , Cs_2Se_5 und Cs_2Se_8 bekannt. Es ist interessant $\text{Cs}_3\text{Se}_{22}$ mit $\text{Cs}_3\text{Te}_{22}$ zu vergleichen, die wir schon 1995 dargestellt haben. Obwohl beide Phasen isostrukturell sind, unterscheiden sich die metallischen Polytelluridschichten sehr deutlich von den ${}^2_\infty[\text{Se}_6^{3-}]$ -Anionen, in dem sie ein ausgedünntes 4^4 -Netzwerk mit Te_4 -Quadraten und linearen Te_3 -Verbrückungseinheiten aufweisen.

Wolfgang Schuhmann

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

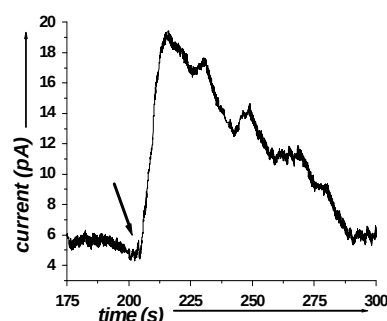
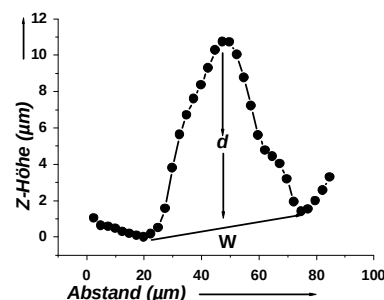
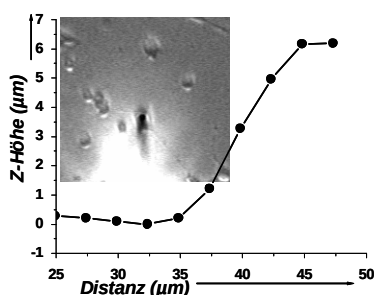
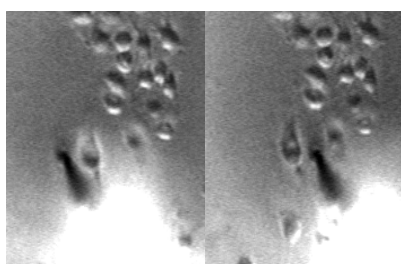
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214683

email: wolfgang.schuhmann@ruhr-uni-bochum.de

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

S. Isik, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **118** (2006) 7611-7614. Detektion der Ausschüttung von NO an einzelnen Zellen mit elektrochemischer Rastermikroskopie in konstantem Abstand. *Angew. Chem. Int. Ed.* **45** (2006) 7451-7454. Detection of nitric oxide release from single cells using constant distance mode scanning electrochemical microscopy.

Schwingungsfähige Carbonfaser-Mikroelektroden wurden platinisiert und nachfolgend durch die elektrochemisch induzierte Abscheidung einer Ni-Phthalocyaninschicht modifiziert. Die modifizierten Mikroelektroden können im elektrochemischen Rastermikroskop als hochselektive und sensitive Sonde für die lokale Bestimmung von NO eingesetzt werden. Durch zusätzliche Beschichtung mit Nafion sind die Mikrosensoren unbeeinflusst durch die Gegenwart von NO_2^- und Ascorbinsäure. Zusätzlich können die Elektroden mittels Scherkraft-abhängiger Positionierung in konstantem Abstand über eine einzelne Endothelzelle gerastert werden, so dass die Topographie der Zelle dargestellt wird. Nach exakter Positionierung des Sensors über der Zelle in einem Abstand von weniger als 300 nm wird mit Bradykinin die NO-Ausschüttung stimuliert. Das ausgeschüttete NO wird an dem Mikrosensor oxidiert und der Strom bzw. die übertragene Ladung dient zur Quantifizierung der aus einer Zelle ausgeschütteten NO-Menge.



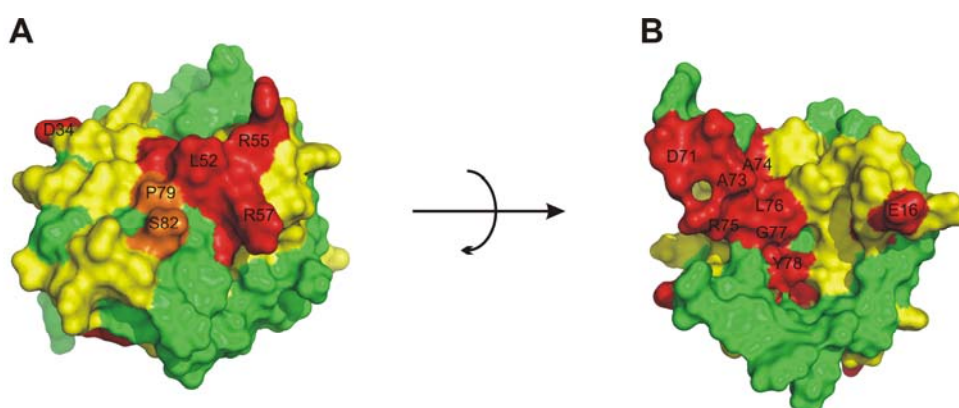
Vibrationable carbon-fibre SECM tips were platinised and subsequently modified by electrochemically induced deposition of a Ni-phthalocyanine layer and a second Nafion layer. The obtained NO sensor showed high sensitivity and exhibited good selectivity with respect to potentially interfering compounds such as NO_2^- or ascorbate. Using shearforce-dependent constant distance positioning in SECM the obtained NO microsenors could visualize the topography of a single cell. This allowed us for accurate positioning of the NO microsensor at a distance below 300 nm from the cell membrane exactly above an individual endothel cell. Upon stimulation with bradykinin, the release of NO could be reproducibly detected from individual cells.

Raphael Stoll

Anal. Chem. / Biochemie II; 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>

R. Stoll, S. Lodermeier, A.-K. Bosserhoff, *Biological Chemistry* **387** (2006) 1601-1606.
Detailed analysis of MIA protein by mutagenesis.

Das MIA (melanoma inhibitory activity) Protein wird von malignen Melanomzellen sezerniert und interagiert mit extrazellulären Matrixproteinen, wie z. B. Fibronectin. Diese Befunde legen nahe, dass das MIA Protein eine Rolle bei der Progression und der Ausbreitung des malignen Melanoms spielt, indem es das Abloesen von Zellen aus der extrazellulären Matrix fördert. Mittels ortsgerichteter Mutagenese konnten Aminosäuren identifiziert werden, die für die Struktur und/oder die Funktion des MIA Proteins wichtig sind. Aminosäuren, die in SH3-Domänen konserviert sind, sind dabei besonders wichtig für die strukturelle Integrität des Proteins. Zudem konnten aber auch Aminosäuren identifiziert werden, die für die Funktion notwendig sind. Interessanterweise sind diese jedoch nicht in der MIA Proteinfamilie konserviert. Diese Studie trägt zum Verständnis der physiologischen Funktion des MIA Proteins bei; die Regulation der Funktion dieses Proteins *in vivo* könnte einen neuen therapeutischen Ansatz beim metastasierenden Melanom bieten.



MIA (melanoma inhibitory activity) has been identified as a small protein secreted by malignant melanoma cells that interacts with extracellular matrix proteins including fibronectin. These findings suggest that MIA may play a role in tumor progression and the spread of malignant melanomas by mediating detachment of cells from extracellular matrix molecules. Here, we present a detailed study on functionally important MIA domains. Using sitedirected mutagenesis, amino acids important for MIA structure and/or function were determined. Amino acids conserved in SH3 domains were shown to be important for structural integrity. In addition, amino acid residues necessary for MIA function were identified. Interestingly, not all of them are conserved with respect to other members of the MIA protein family. In summary, our results lead to a better understanding of MIA function. Regulating MIA functions *in vivo* may provide a novel therapeutic strategy for metastatic melanoma disease.

Dirk Wolters

Anal. Chem. – Biomolekulare Massenspektrometrie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780

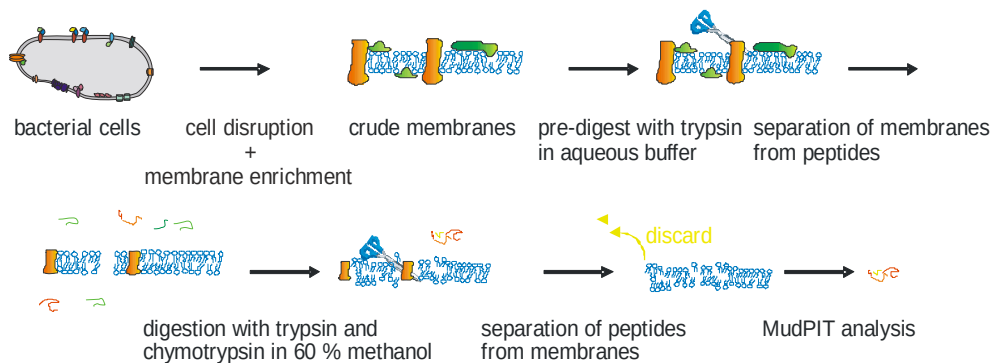
Tel.: ++49-(0)234 3225463; ++49-(0)234 3214742

email: Dirk.Wolters@rub.de

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

D. Wolters, F. Fischer, M. Rögner, A. Pötsch, *Mol Cell Proteomics*, 5(3) (2006), 444-53
Towards the complete membrane proteome: High coverage of integral membrane proteins through transmembrane peptide detection.

Corynebacterium glutamicum ist eines der biotechnologisch wichtigsten Bakterien für die L-Lysin und L-Glutamat Produktion. Membranproteine sind in biologischen Prozessen von besonderer Bedeutung, allerdings stellen sie die Proteinanalyse vor eine besondere Herausforderung. Isolierte Bakterienmembranen wurden mit Trypsin/Bromcyan oder Trypsin/Chymotrypsin verdaut und jeweils ein Probensatz wurde mittels der Multidimensionalen Proteinidentifikationstechnologie (MudPIT) analysiert. Die Kombination der Datensätze erlaubte eine bis dato unerreichte Identifikationsrate von ca. 50 % (326) aller vorhergesagten integralen Membranproteinen, wobei diese sowohl eine geringe als auch eine hohe Anzahl von Transmembranhelices aufwiesen. Eine signifikante Verbesserung der hydrophoben Peptide mit einer hohen Abdeckung von Transmembranpeptiden wurde durch einen Trypsin/Chymotrypsin Verdau in organischem Lösungsmittel beobachtet. Dieses neu entwickelte Protokoll hat das Potential für eine nahezu umfassende Analyse des Membranproteoms, welches auch sehr gut in Kombination mit Quantifizierungsstrategien eingesetzt werden kann, um unterschiedliche Wachstums- und Fermentationsbedingungen von Bakterien zu untersuchen.



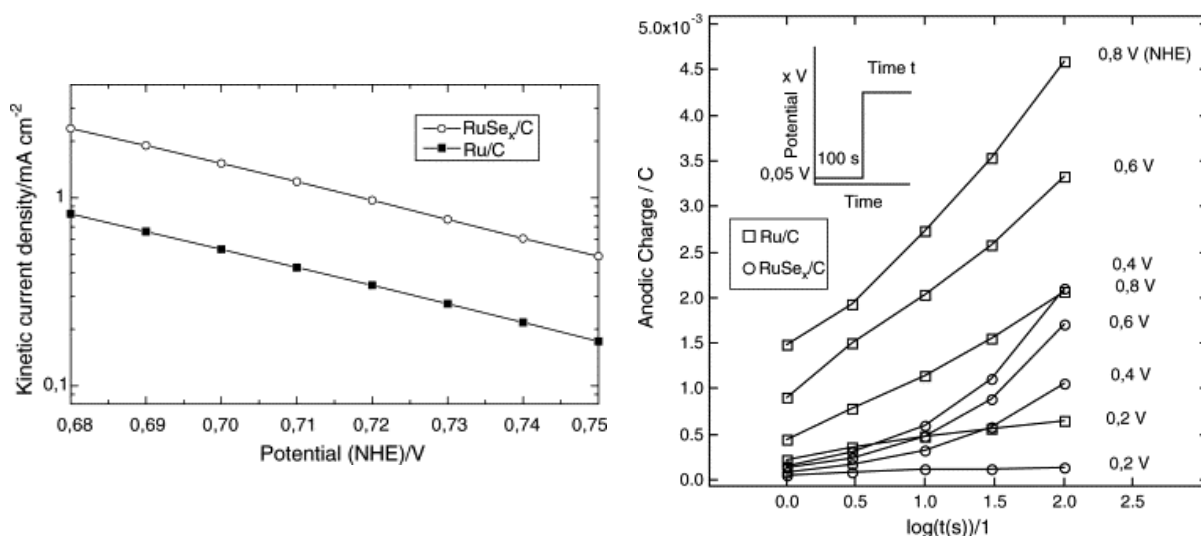
The Gram-positive bacterium *Corynebacterium glutamicum* is one of the major biotechnological important bacteria to produce L-lysine and L-glutamate. Isolated bacterial membranes were digested with trypsin/cyanogen bromide or trypsin/chymotrypsin and a complementary protein set was identified by the multidimensional protein identification technology (MudPIT). Besides a distinct number of cytosolic or membrane-associated proteins, the combined data analysis from both digests yielded 326 integral membrane proteins (~50 % of all predicted) covering membrane proteins both with small and large numbers of transmembrane helices. A significant increase in hydrophobic peptides with distinctly higher sequence coverage of transmembrane regions was achieved by trypsin/chymotrypsin digestion in organic solvent. This newly developed protocol is suitable for the quantitative comparison of membrane proteomes, and will be especially useful for applications such as monitoring protein expression under different growth- and fermentation conditions in bacteria.

Michael Bron

Analytische Chemie - Elektroanalytik & Sensorik und Lehrstuhl für Technische Chemie,
Nachwuchsgruppe Brennstoffzellen;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3225646; FAX: ++49-(0)234-3214683
email: Michael.Bron@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/nwg-brennstoffzellen>

H. Schulenburg, M. Hilgendorff, I. Dorbandt, J. Radnik, P. Bogdanoff, S. Fiechter, M. Bron, H. Tributsch, *J. Power Sources* **155** (2006) 47-51. Oxygen reduction at carbon supported ruthenium-selenium catalysts: Selenium as promoter and stabilizer of catalytic activity.

Selen-modifizierte Ruthenium-Katalysatoren werden als alternative Sauerstoffreduktionskatalysatoren für PEM-Brennstoffzellen diskutiert. Da Ruthenium aufgrund der Oxidationsneigung (Bildung von inaktivem RuO_2) wenig aktiv für die Sauerstoffreduktion ist, stand lange Zeit die Frage im Raum, wie das aktive Zentrum der genannten Katalysatoren beschaffen ist. Wir konnten zeigen, dass Selen nicht, wie zunächst vermutet, direkt am aktiven Zentrum beteiligt ist, sondern lediglich den metallischen Ruthenium-Kern vor zu starker Oxidation schützt. Auf diese Weise bleibt die intrinsische katalytische Aktivität des Rutheniums auch unter korrosiven Bedingungen erhalten. Diese Ergebnisse können als Grundlage für das gezielte Design aktiver und selektiver Sauerstoffreduktionskatalysatoren dienen.



Selenium-modified ruthenium catalysts are currently discussed as alternative oxygen reduction catalysts for PEM fuel cells. Since ruthenium exhibits only poor activity for oxygen reduction due to the facile formation of inactive RuO_2 , the nature of the active site has been under debate for long time. We were now able to show that selenium is not included into the active site but protects the ruthenium core from being oxidized to strongly under reaction conditions. Thus the intrinsic activity of the ruthenium is retained even in corrosive media. These results may serve as basis for the design of novel active and selective oxygen reduction catalysts.

Dominik Marx

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

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

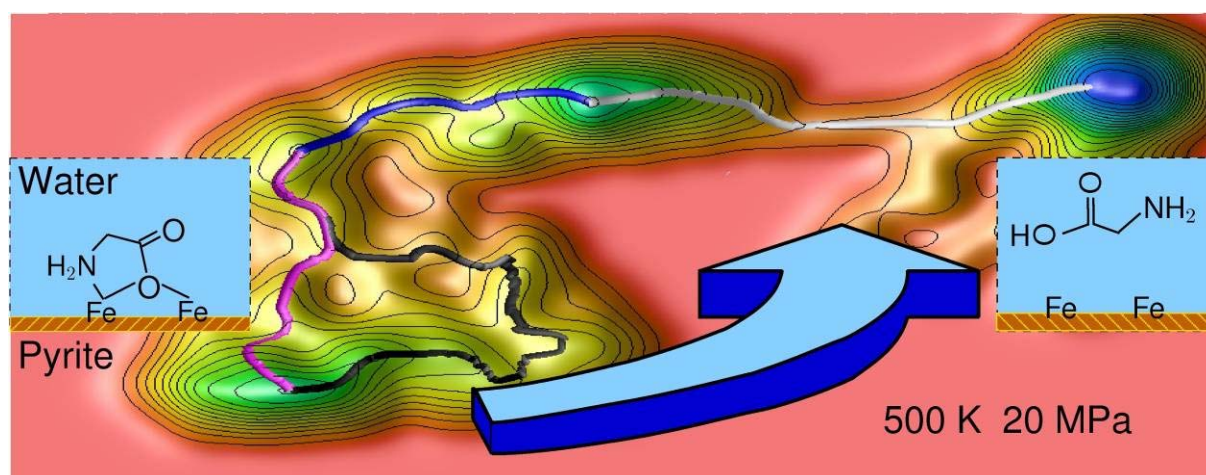
email: Dominik.Marx@theochem.rub.de

<http://www.theochem.rub.de>

N. N. Nair, E. Schreiner, and D. Marx, J. Am. Chem. Soc. **128** (2006) 13815-13826.

Glycine at the Pyrite-Water Interface: The Role of Surface Defects.

Elektronenstrukturechnungen und ab initio Metadynamiksimulationen wurden durchgeführt um Chemisorption, elektronische Eigenschaften und Desorption von Glycin auf Pyritoberflächen in Gegenwart von heissem Wasser und Druck zu studieren, welches präbiotische Bedingungen annähert, wie sie im Rahmen der "Eisen-Schwefel Welt" zur Entstehung des Lebens vorgeschlagen werden. Die allgegenwärtigen Schwefelfehlstellen erhöhen die Retentionszeit der adsorbierten Aminosäure um mehrere Größenordnungen im Vergleich zur idealen Pyrit/Wasser Grenzfläche. Die Bedeutung dieser Erkenntnisse im Sinne einer möglichen zweidimensionalen primordialen Chemie auf Mineraloberflächen wird diskutiert.



Electronic structure calculations and ab initio metadynamics simulations were performed in order to study chemisorption, electronic properties, and desorption of glycine at pyrite surfaces in the presence of hot pressurized water mimicking "Iron Sulfur World" prebiotic conditions. The ubiquitous sulfur vacancies are found to increase the retention time of the adsorbed amino acid by many orders of magnitudes in comparison to the ideal pyrite-water interface. The importance of these findings in terms of a possible two-dimensional primordial chemistry on mineral surfaces is discussed.

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

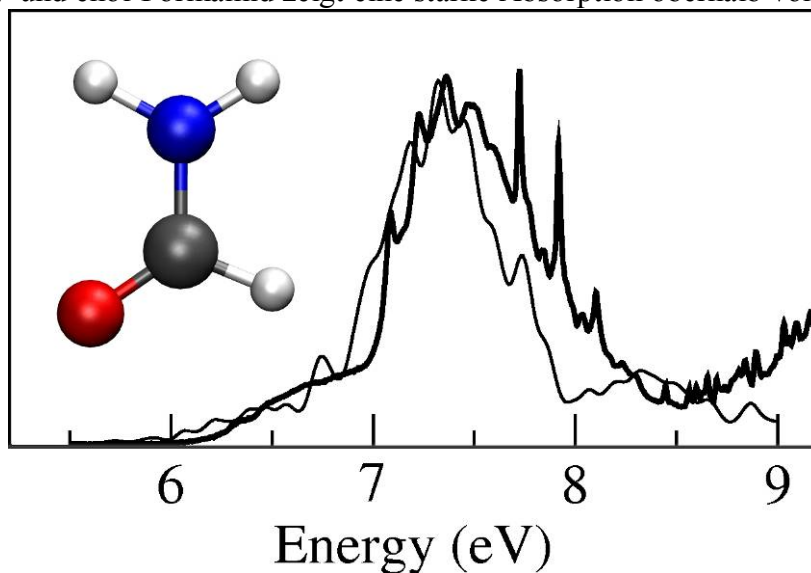
Tel.: ++49-(0)234-3226749; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

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

N. A. Besley and N. L. Doltsinis *J. Chem. Theory Comput.* **2** (2006) 1598-1604. Ab Initio Finite Temperature Electronic Absorption Spectrum of Formamide.

Eine Kombination von Car-Parrinello Molekuldynamik (CP-MD) und hochgenauen quantenchemischen ab initio Berechnungen (MRCI/d-aug-cc-pVDZ) wurde verwendet, um das elektronische Absorptionsspektrum von Formamid bei endlicher Temperatur zu berechnen. Thermisch verbreiterte Spektren wurden durch Mittelung über eine grosse Anzahl von Single-Point Multireferenz-Konfigurationswechselwirkungs-Anregungsenergien für Geometrien aus einer CP-MD Simulation erhalten. Es wurde gezeigt, dass die Theorie auf diese Weise bei leicht erhöhter Temperatur die Form des experimentellen Absorptionsspektrums wiedergegeben werden kann, insbesondere die Schulter bei niedriger Energie. Elektronische Anregungsspektren von möglichen Verunreinigungen wie Ammoniak und die enol-Form von Formamid wurden ebenso berechnet. Ammoniak besitzt einen starken Peak bei 6.5 eV und enol-Formamid zeigt eine starke Absorption oberhalb von 7.5 eV.



A combination of Car-Parrinello molecular dynamics (CP-MD) and high level ab initio quantum chemical calculations (MRCI/d-aug-cc-pVDZ) has been used to calculate the electronic absorption spectrum of formamide at finite temperature. Thermally broadened spectra have been obtained by averaging over a large number of single point multi-reference configuration interaction excitation energies calculated for geometries sampled from a CP-MD simulation. It is shown that the shape of the experimental absorption spectrum, in particular the low energy shoulder of the main peak, is well reproduced at increased temperature. Electronic excitation spectra of possible contaminants, such as ammonia and formamidic acid, have also been computed. Ammonia exhibits a strong peak in the shoulder region of the experimental formamide spectrum at 6.5 eV and formamidic acid has a strong absorption above 7.5 eV.

Bernd Meyer

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

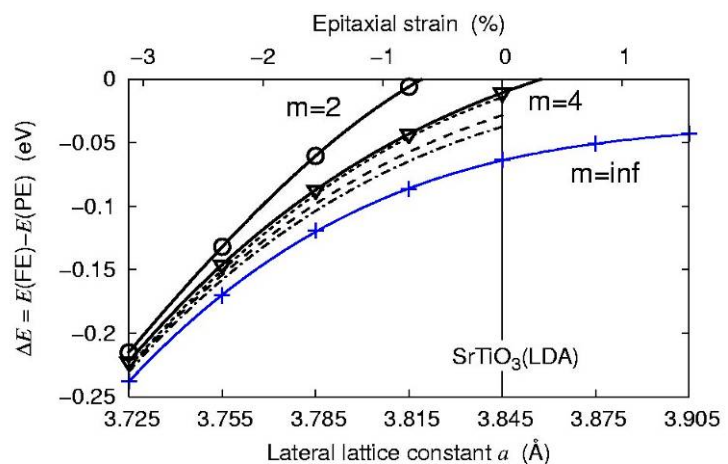
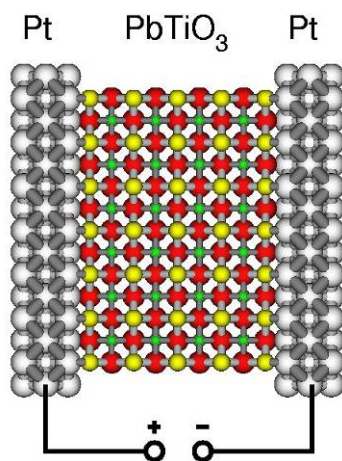
Tel.: ++49-(0)234-3226750; FAX: ++49-(0)234-3214055

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

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

Y. Umeno, B. Meyer, C. Elsässer, P. Gumbsch, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 060101(R). Ab initio study of the critical thickness for ferroelectricity in ultrathin Pt/PbTiO₃/Pt films.

Die ferroelektrischen (FE) Eigenschaften eindomäniger ultradünner PbTiO₃-Filme, eingeschlossen zwischen zwei Pt-Elektroden, wurden mit Hilfe von ab-initio Dichtefunktionalrechnungen untersucht. Für spannungsfreie PbTiO₃-Filme mit einer Gitterkonstanten der tetragonalen Bulk-Phase parallel zur Oberfläche wurde gefunden, dass PbO- und TiO₂-terminierte Filme ihre ferroelektrischen Eigenschaften unterhalb einer kritischen Dicke von 4 bzw 6 Einheitszellen (1.6 bzw 2.4 nm) verlieren und in einen paraelektrischen (PE) Zustand übergehen. Diese kritische Dicke hängt sehr sensitiv von der Gitterkonstante der Filme ab, die durch epitaktisches Wachstum der Filme auf einem Substrat eingestellt werden kann. Der Einfluß von Verspannungen auf die ferroelektrischen Eigenschaften der PbTiO₃-Filme wurde illustriert.



The ferroelectricity (FE) of single-domain ultrathin PbTiO₃ films sandwiched between metallic Pt electrodes has been studied using ab initio density-functional theory calculations. For stress-free PbTiO₃ films with an in-plane lattice constant of the tetragonal bulk phase it is found that PbO- and TiO₂-terminated films lose ferroelectricity below a critical thickness of about 4 and 6 unit cells (1.6 and 2.4 nm), respectively, at which they adopt a paraelectric (PE) state. This critical thickness depends strongly on the in-plane lattice parameter imposed by epitaxial growth of the films on a substrate. The dependence of ferroelectricity of the PbTiO₃ films on epitaxial strain is illustrated.

Christof Hättig

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

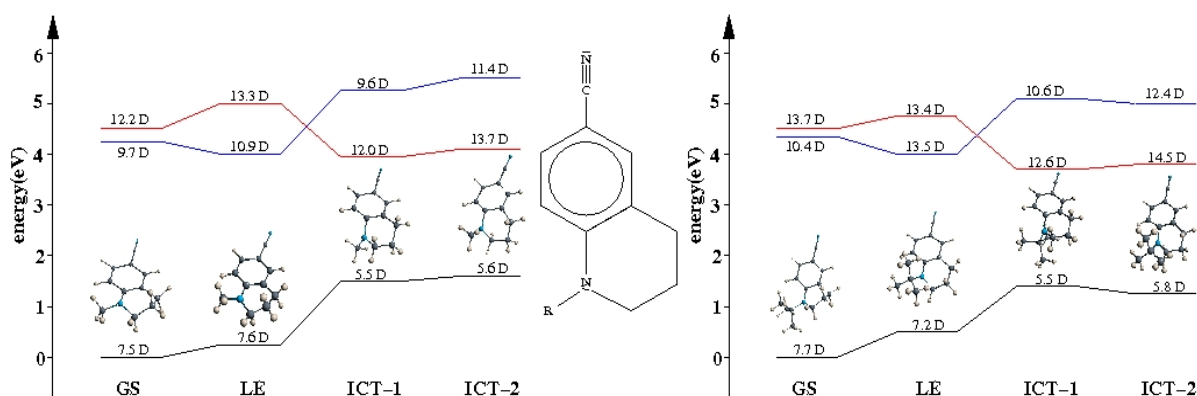
Tel.: ++49-(0)234-32 28082; FAX: ++49-(0)234-32 14045

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

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

C. Hättig, A. Hellweg, A. Köhn, *J. Am. Chem. Soc.* **128** (2006) 15672-15682. Intramolecular Charge-Transfer Mechanism in Quinolidines: The Role of the Amino-Twist Angle.

Intramolekularer Ladungstransfer spielt eine entscheidende Rolle für das Phänomen der dualen Fluoreszenz. In jüngster Zeit wurde durch Experimente an 1-*tert*-butyl-6-cyano-1,2,3,4-tetrahydroquinoline und dem 1-methyl-Derivat die Frage aufgeworfen, ob die Verdrillung der Aminogruppe notwendig für das Auftreten der dualen Fluoreszenz ist und ob diese auch in Systemen möglich ist, für die eine Verdrillung sterisch gehindert scheint. Zur Klärung dieser Fragen wurden quantenchemische Berechnungen in Grund- und angeregten Zuständen mit der approximierten Coupled-Cluster-Methode CC2 in Verbindung mit genauen Basissätzen durchgeführt. Hiermit konnte ermittelt werden, dass eine Verdrillung auch dann möglich ist, wenn die Aminogruppe Teil eines aliphatischen 6-Rings ist, da der Benzolring in elektronisch angeregten Zuständen nicht mehr planar sein muss. Dies führte zu einer Erklärung der experimentellen Ergebnisse, die im Widerspruch steht zu vorangegangenen Deutungen, die auf Argumenten bezüglich der Grundzustandsgeometrie basierten, und es zeigte sich die Notwendigkeit von genauen quantenchemischen Untersuchungen für das Verständnis von Prozessen in elektronisch angeregten Zuständen.



Intramolecular charge-transfer states play a key role for the phenomenon of dual fluorescence. Recent experiments on 1-*tert*-butyl-6-cyano-1,2,3,4-tetrahydroquinoline and its 1-methyl-derivative raised the questions, if a twist of the amino-group is necessary for the occurrence of dual fluorescence and if it is possible in such 'planarized' systems. In order to resolve this conundrum, we carried out quantum chemical calculations on the two systems using the second-order approximate coupled-cluster singles and doubles model CC2 in connection with high-level basis sets. It is thereby found that such a twist is possible even in compounds where the amino-group is part of an annealed ring, as the phenyl-moiety is no more confined to planarity in the excited state. This is in sharp contrast to what is expected from arguments valid for the ground state only, and underlines the importance of advanced quantum-chemical model calculations for the prediction and understanding of excited state structures.

Volker Staemmler

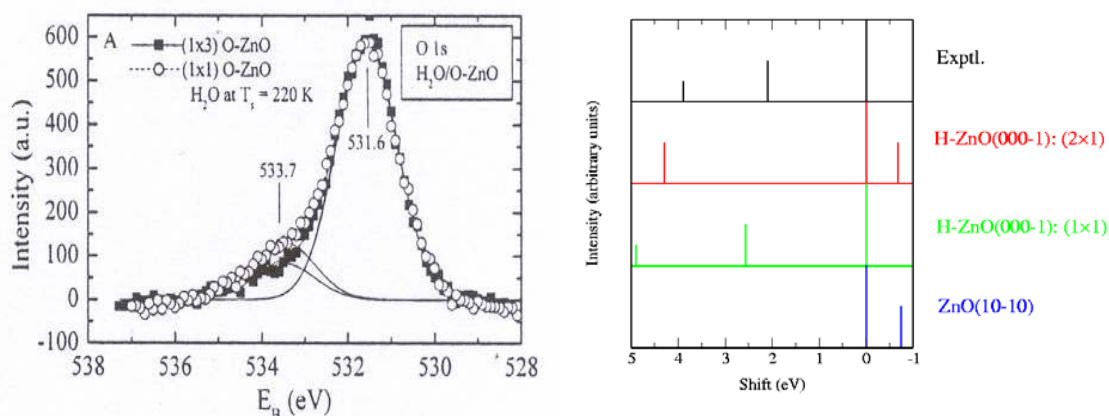
Theor. Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

K. Kotsis, V. Staemmler, *PCCP* **8** (2006) 1490-1498. Ab initio calculations of the O1s XPS spectra of ZnO and Zn oxo compounds

Die Präparation und Analyse polarer Oxid-Oberflächen ist immer noch eine große Herausforderung. Das liegt daran, dass solche Oberflächen thermodynamisch instabil sind und auf unterschiedliche Weise stabilisiert werden können. Im Falle der polaren, sauerstoff-terminierten (000-1) Oberfläche von ZnO scheint die Adsorption von Protonen (Hydroxylierung) die bevorzugte Stabilisierungsweise zu sein, allerdings lassen sich H-Atome an Oberflächen nur schlecht nachweisen. Eine Methode dafür ist die O1s Röntgen-Photoelektronen-Spektroskopie (XPS), da die 1s Orbitale von O-Atomen im Volumen, an der Oberfläche und in OH-Gruppen deutlich unterschiedliche Bindungsenergien haben. Unsere quanten-chemischen ab initio Cluster-Rechnungen für ZnO führten zu einer eindeutigen Zuordnung der beobachteten XPS Peaks: O-Atome im Volumen liegen bei 531.6 eV, O-Atome in OH Gruppen bei 533.7 eV. Außerdem konnten wir zeigen, dass die gemessenen O1s XPS Spektren nur von der voll hydroxylierten (1×1) ZnO(000-1) Oberfläche und nicht von der zu 50% hydroxylierten (1×2) oder der neutralen (10-10) Oberfläche stammen können.



The preparation and analysis of polar oxide surfaces is still a great challenge for experimentalists. The reason is that such surfaces are thermodynamically unstable and that there are several ways how they can be stabilized. There is evidence that adsorption of protons (hydroxylation) is the preferred way of stabilizing the polar, oxygen terminated (000-1) surface of ZnO, but it is quite difficult to detect H atoms at oxide surfaces. One possibility is O1s X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), since the 1s orbitals of O atoms in the bulk, at the surface and in surface OH groups exhibit quite different binding energies. Our quantum chemical cluster calculations for the O1s XPS spectra of ZnO led to an unambiguous assignment of the experimental XPS peaks: Bulk O atoms at 531.6 eV, surface OH groups at 533.7 eV. Furthermore, we could show that the observed O1s XPS spectra are only compatible with the fully hydroxylated (1×1) ZnO(000-1) surface and not with the 50 % hydroxylated (1×2) one or with the neutral (10-10) surface.

Karin Fink

Institut für Nanotechnologie, Forschungszentrum Karlsruhe; D-76021 Karlsruhe

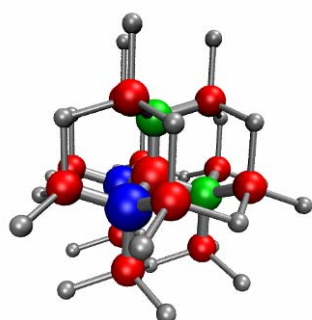
Tel.: ++49-(0)7247-826411

email: karin.fink@int.fzk.de

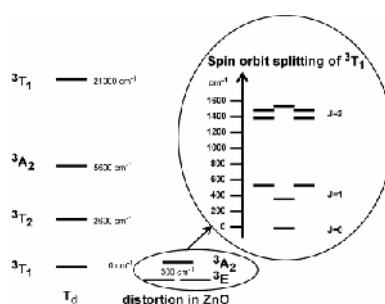
K. Fink, *Chem. Phys.* 326 (2006) 297-307. Ab initio calculations of the magnetic properties of ZnO doped with transition metal atoms

Mit Übergangsmetallzentren (TM) dotiertes Zinkoxid gehört zur Substanzklasse der verdünnten magnetischen Halbleiter, welche im Bereich Spintronics eine große Rolle spielt. Ein genaues Verständnis der magnetischen Eigenschaften solcher Substanzen ist daher von großem Interesse. In dieser Arbeit sind die elektronischen Zustände von Mn, Co und Ni dotiertem ZnO mit Hilfe von quantenchemischen Methoden untersucht worden. Zunächst erfolgte eine Charakterisierung von isolierten TM^{2+} Zentren und im zweiten Schritt die Untersuchung der Spin-Spin-Kopplung zweier benachbarter Übergangsmetallzentren. Sowohl benachbarte Mn^{2+} als auch benachbarte Co^{2+} Zentren zeigen eine schwache antiferromagnetische Kopplung, die nahezu unabhängig vom Kopplungspfad ist.

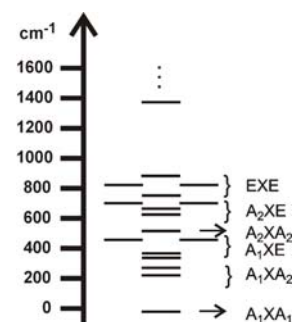
Untersucht man Ni^{2+} dotiertes ZnO ohne Berücksichtigung von Spin-Bahn-Effekten findet man eine ferromagnetische Kopplung zwischen räumlich entarteten Triplettzuständen. Unter Berücksichtigung von Spin-Bahn-Wechselwirkung, werden die lokalen Triplettzustände aufgespalten. Der Grundzustand eines einzelnen Ni^{2+} Ions ist diamagnetisch, was dann auch für den zweikernigen Komplex gilt.



Bicuclear cluster: red O, grey Zn, blue TM or Zn, green TM or Zn, depending on the coupling path.



Electronic states of a mononuclear Ni cluster with and without inclusion of SOC



Energy levels of a binuclear Ni cluster. Spin orbit coupling is included.

Transition metal doped ZnO belongs to the diluted magnetic semiconductors (DMS) which are promising materials for spintronics. Therefore, there is a great interest in the understanding of the magnetic properties of such compounds. In this work we examined the electronic states and the magnetic coupling of ZnO doped with Mn, Co and Ni by quantum chemical methods for clusters which contain either one or two transition metal centers. The magnetic coupling of two Mn^{2+} as well as two Co^{2+} centers is weakly antiferromagnetic and both coupling paths show almost the same coupling constant. For a reliable description of the electronic states of ZnO doped with Ni^{2+} , it was necessary to include spin orbit coupling (SOC) in the calculations. Without SOC the ground state of an isolated Ni^{2+} is a $^3\text{T}_1$. The magnetic coupling of two $^3\text{T}_1$ states would be ferromagnetic. By inclusion of SOC the energy levels are split and as well for an isolated Ni^{2+} as for a binuclear Ni cluster the resulting ground states are diamagnetic.

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

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

W. Kutzelnigg, *Lecture notes on computer and computer science (Brill, Leiden)* **6** (2006) 23. Density Functional Theory (DFT) and ab-initio Quantum Chemistry (AIQC). Story of a difficult partnership.

Trotz ihrer Popularität und ihrer unbestreitbaren praktischen Erfolge bei quantenchemischen Rechnungen, und trotz vieler Mystifikationen, fehlt der Dichte-Funktional-Theorie (DFT) immer noch eine strenge theoretische Begründung - anders als bei der viel aufwendigeren ab-initio Quantenchemie (AIQC). Dieser Übersichtsartikel berichtet über die Geschichte der DFT und die Begegnungen zwischen DFT und AIQC, vom Thomas-Fermi-Modell für Atome, über 'Mean-Field-Methoden' wie diejenige von Hartree, von Hartree-Fock und Slater's Xa. Das viel zitierte, aber überaus problematische Hohenberg-Kohn Theorem wird kritisch analysiert, ebenso das Rezept von Kohn und Sham, auf dem nahezu alle praktischen Anwendungen beruhen. Dabei spielt die Formulierung der DFT durch E. Lieb im Rahmen einer Legendre-Transformation eine wichtige Rolle. Über neuere Trends sowohl bei der DFT als auch der AIQC wird berichtet. Eine 'Dichte-Kumulanten-Funktional Theorie' erscheint vielversprechend. Spekulationen über eine mögliche Konvergenz von DFT und AIQC gegeneinander beschließen diesen Aufsatz.

In spite of its popularity and its incontestable practical success in quantum chemical calculations, Density Functional Theory (DFT) still lacks a rigorous theoretical foundation - unlike the computationally more demanding ab-initio quantum chemistry (AIQC). This review reports on the history of DFT and its encounters with AIQC, starting with the Thomas-Fermi-model for atoms, and continuing with mean-field-methods like those of Hartree, Hartree-Fock and Slater's Xa. The much quoted, but highly problematic Hohenberg-Kohn theorem is critically analyzed, as well as the Kohn-Sham recipe, on which nearly all practical application are based. E. Lieb's formulation of DFT in terms of a Legendre transformations has a central importance. New trends both in DFT and ab-initio quantum chemistry (AIQC) are reviewed. A 'density-cumulant functional theory' appears to be particularly promising. Speculations about a possible convergence of DFT and AIQC towards each other close this paper.

Martin Muhler

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

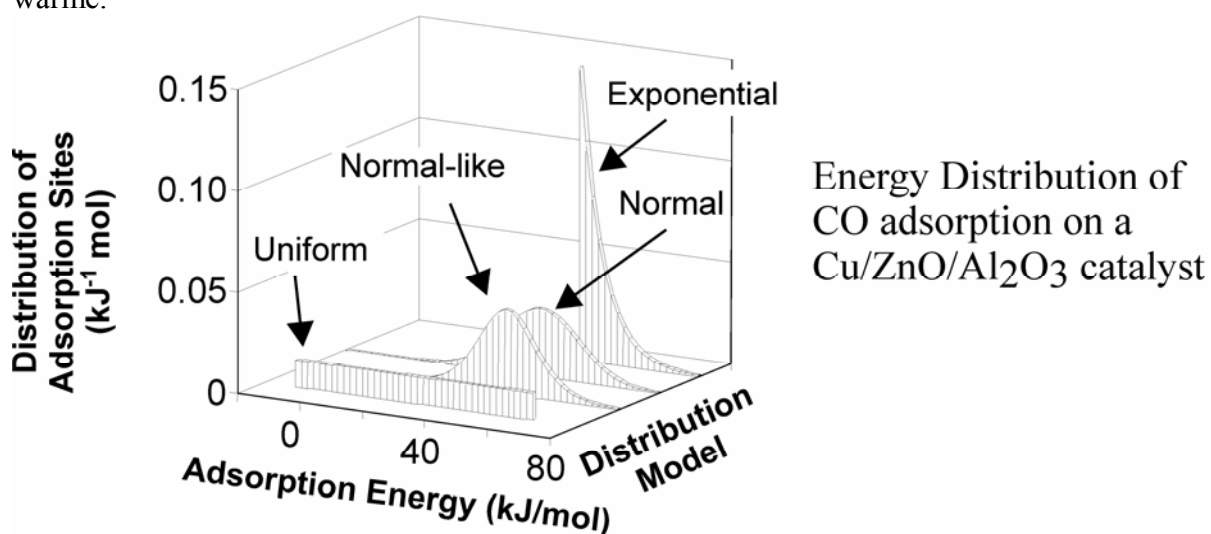
Tel.: ++49-(0)234-3228754; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

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

Xinyu Xia, Sergey Litvinov, Martin Muhler, *Langmuir* **22** (2006) 8063-8070. Consistent Approach to Adsorption Thermodynamics on Heterogeneous Surfaces Using Different Empirical Energy Distribution Models

Die Adsorption auf heterogenen Oberflächen wurde mit drei verschiedenen Verteilungsfunktionen untersucht: die uniforme, die exponentielle und die Normalverteilung. Es wurden exakte analytische Lösungen für die Adsorptionsisothermen und für die Adsorptionswärmen abgeleitet, sodass sich die differentielle Adsorptionswärme und die Adsorptionsentropie als Funktion der Bedeckung und der Temperatur näherungsfrei beschreiben lassen. Dadurch lassen sich die Annahmen, die den klassischen Temkin-, Freundlich- und Langmuir-Freundlich-Isothermen zugrunde liegen, klar analysieren. Der Vergleich dieser empirischen Gleichungen mit den exakten Lösungen ergibt, dass diese bei stark heterogenen Oberflächen bzw. bei tiefen Temperaturen im Bereich mittlerer Bedeckungen gute Näherungen darstellen. Die exakten Lösungen ermöglichen jedoch vertiefte Einblicke in die Heterogenität von Festkörperoberflächen basierend auf der kalorimetrischen Bestimmung der Adsorptionswärme.



The adsorption on heterogeneous surfaces with three basic energy distribution models (uniform model, exponential model and normal-like model) is studied. Exact analytical solutions of the adsorption isotherms and the heats of adsorption are derived for the uniform and the exponential model, and with these solutions including a numerical solution for the normal-like model, the behavior of the differential heat of adsorption and the “apparent” standard adsorption entropy concerning the overall surface is described as a function of coverage and temperature. The approximations underlying the isotherms and heats of adsorption in the Temkin, Freundlich and Langmuir-Freundlich types of adsorption are rationalized. By comparing these empirical formulas to the exact solutions, the level of these approximations is found to be identical, which is similar to the “Condensation Approximation”. Generally, they are suitable for the middle coverage range. The exact solutions provide a method to obtain more information on heats, entropy and heterogeneity of the catalyst surface from the calorimetric measurement of the heat of adsorption.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

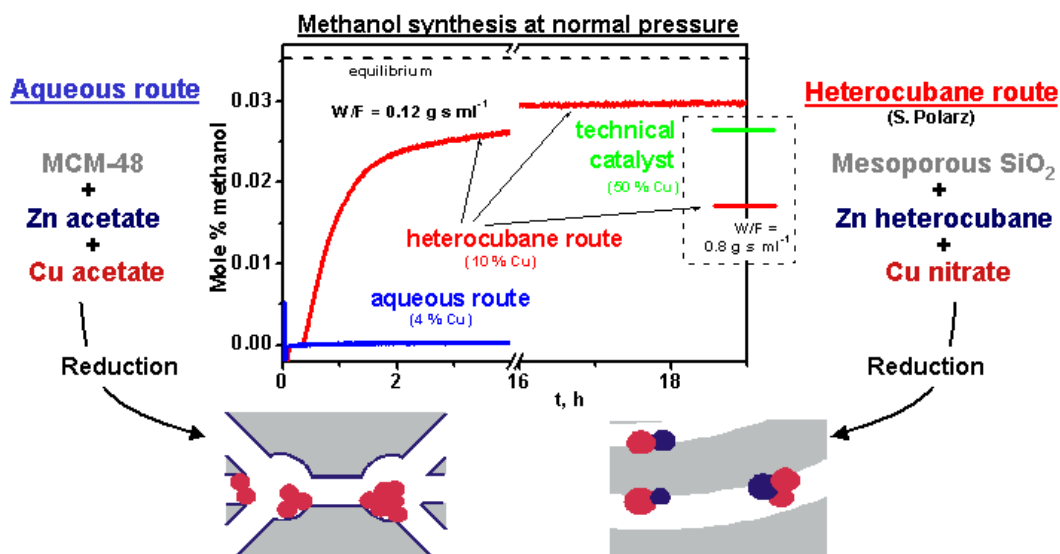
Tel.: +49-(0)234-3222088; FAX: +49-(0)234-3214115

email: Wolfgang.Gruenert@techem.rub.de

<http://www.techem.rub.de/>

M.W.E. van den Berg, S. Polarz, O.P. Tkachenko, K.V. Klementiev, M. Bandyopadhyay, L. Khodeir, H. Gies, M. Muhler, W. Grünert, *J. Catal.* **241** (2006) 446-455. Cu/ZnO aggregates in siliceous mesoporous matrices – Development of a new model methanol synthesis catalyst

Das Studium von Träger-Metall-Wechselwirkungen wird bei realen Metall-Träger-Katalysatoren durch die geringe Dispersität des Trägers behindert; Einflüsse der Wechselwirkung auf den Träger sind kaum zu erfassen. Dieses Problem soll durch Modellkatalysatoren gelöst werden, in denen durch den Confinement-Effekt einer porösen Matrix auch dem Träger eine hohe Dispersität aufgezwungen wird. Für das System Cu/ZnO wurde der Ansatz bisher durch eine starke Interaktion der ZnOx-Spezies mit der silikatischen Wand der Matrix behindert: Die Katalysatoren zeigten, trotz geringer, durch XAFS nachgewiesener Primärkristallgröße des Kupfers kaum Methanolsyntheseaktivität. Dieser Störfaktor wird durch eine metallorganische, intraporöse Präparation von ZnO-Nanopartikeln (S. Polarz) ausgeschaltet. Die Dotierung solcher Systeme mit Cu ergibt Katalysatoren, deren Aktivität – bezogen auf die Kupfermenge – der technischer Katalysatoren nicht nachstehen. In den neuen Katalysatoren konnte die Redoxaktivität der ZnO-Komponente durch XAFS zweifelsfrei belegt werden.



In real metal-supported catalysts, the low dispersion of the support particles complicates the study of the metal-support interaction: changes induced by it in the support are hardly detectable. To solve this problem we develop model catalysts in which high dispersion is imposed also on the support, e.g., by encapsulation of the system in a porous matrix. For Cu/ZnO catalysts, this approach has been hampered by strong interactions of the ZnOx species with the siliceous matrix walls: despite a low size of primary Cu particles (detected by XAFS), the resulting catalysts were very poor in methanol synthesis. The deadlock was broken by a metal-organic intraporous preparation of ZnO nanoparticles (S. Polarz). Adding Cu to such systems results in catalysts, the activity of which (related to the Cu content) is comparable to that of technical catalysts. In the new materials, the redox activity of the ZnO component was clearly demonstrated by XAFS.

Michael Hollmann

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

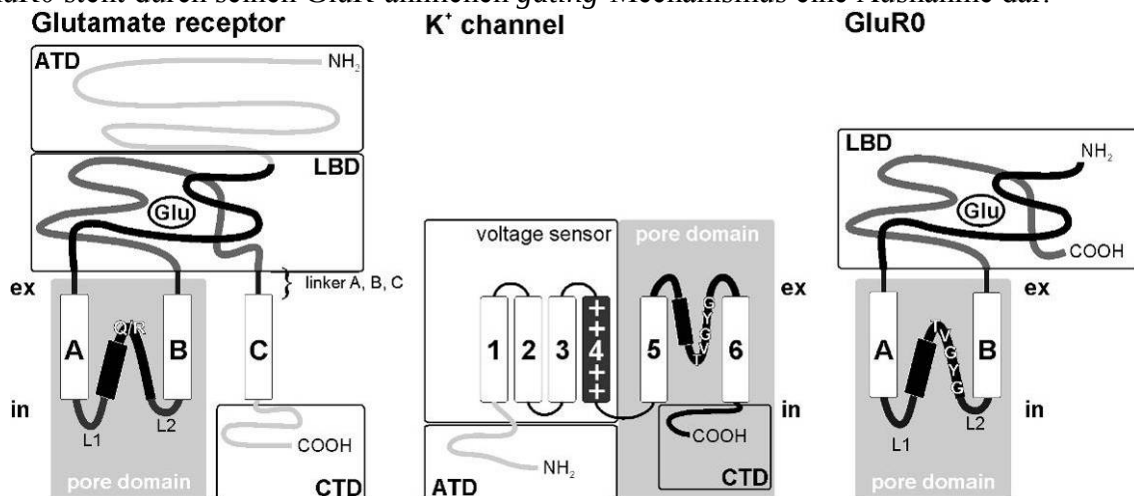
Tel.: ++49-(0)234-3224225; FAX: ++49-(0)234-3214244

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

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

J. Hoffmann, C. Villmann, M. Werner, **M. Hollmann**, *Mol. Cell. Neurosci.* **33**(4) (2006) 358-370. Investigation via ion pore transplantation of the putative relationship between glutamate receptors and K^+ channels.

Ionotrope Glutamaterezeptoren (GluRs) und Kaliumkanäle (K^+ -Kanäle) zeigen strukturelle Ähnlichkeiten in ihren Ionenporenregionen, die Haarnadelschleifen zwischen zwei Transmembranhelices sind (grau unterlegtes Modul). Da GluRs und K^+ -Kanäle modulare Proteine sind, können funktionelle Module potentiell ausgetauscht werden. Wir haben diesen Ansatz benutzt um zu testen, ob der intramolekulare Signaltransduktionsmechanismus, der das *gating*-Signal an die Öffnung der Ionenpore koppelt, zwischen GluRs und K^+ -Kanälen konserviert ist. Wir transplantierten die Porendomänen diverser K^+ -Kanäle in GluRs, und umgekehrt. Alle Chimären wurden in der Plasmamembran exprimiert, aber nur eine von 45 Chimären zeigte Ionenkanalfunktion: der Kainatrezeptor GluR6 mit der Pore des prokaryotischen, glutamataktivierten K^+ -Kanals GluR0, der durch die Transplantation mehrere elektrophysiologische Eigenschaften der Donorpore erhielt. Unsere Ergebnisse belegen, dass trotz struktureller Ähnlichkeiten K^+ -Kanalporen durch die GluR-*gating*-Maschinerie nicht aktiviert werden können, ebenso wenig wie GluR-Poren durch die K^+ -Kanal-*gating*-Maschinerie. GluR0 stellt durch seinen GluR-ähnlichen *gating*-Mechanismus eine Ausnahme dar.



Ionotropic glutamate receptors (GluRs) and potassium channels (K^+ channels) show structural similarities in their ion pore regions which are hairpin loops suspended between two transmembrane domains (shaded). Since both GluRs and K^+ channels are modular proteins, functional modules can potentially be exchanged. We used this approach to test whether the intramolecular signal transduction mechanism that couples the gating signal to ion pore opening is conserved. We transplanted pore regions from various K^+ channel subunits into GluR subtypes, and vice versa. Although the chimeric proteins were expressed on the cell surface, only one of 45 different pore chimeras analyzed showed ion channel function: the kainate receptor subunit GluR6 carrying the pore region of the prokaryotic, glutamate-gated, K^+ -selective GluR0. This chimera adopted several electrophysiological properties of the donor pore upon pore transplantation. Our results suggest that despite structural similarities K^+ channel pores cannot be gated by the GluR gating machinery, and vice versa, except for GluR0 which has a unique signal transduction mechanism.

Bernd-Joachim Benecke

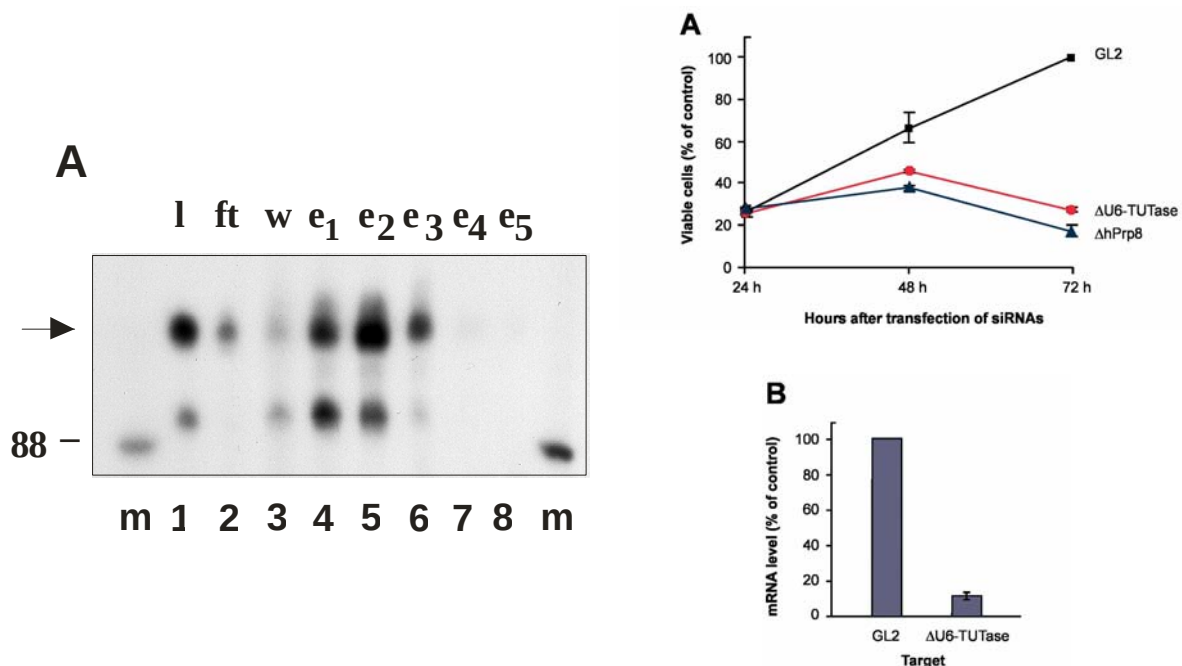
Biochemie I; AG Genregulation; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224233; FAX: ++49-(0)234-3214034

email: bernd.benecke@rub.de

R. Trippe, E. Guschina, M. Hossbach, H. Urlaub, R. Lührmann and B.J. Benecke, *RNA* **12** (2006) 1494-1504. Identification, cloning, and functional analysis of the human U6 snRNA-specific terminal uridylyl transferase.

Die zuerst von uns charakterisierte U6 snRNA spezifische Terminal Uridylyl Transferase (U6-TUTase) ist insofern einzigartig in der RNA Biochemie, als sie hoch selektiv nur ein Substrat (U6 snRNA) akzeptiert und zweitens eine strikt kontrollierte Elongationsreaktion katalysiert. Beides weist bereits auf eine zentrale physiologische Funktion hin. Das Enzym wurde zur Homogenität gereinigt, die Peptide durch Massenspektrometrie sequenziert und das Gen über Datenbankabgleich identifiziert. Nach Klonierung wurde das rekombinante Protein in tierischen Zellkulturen exprimiert. Die funktionelle Analyse des affinitäts-gereinigten Proteins bestätigte seine Identität mit der U6-TUTase. RNA Interferenz(siRNA)-Experimente belegten darüber hinaus, dass es sich um ein essentielles zelluläres Protein handelt.



TUTase-Test des in HeLa Zellen exprimierten und über Ni-NTA gereinigten rekombinanten Proteins. Deutlich ist zu erkennen, dass das im Auftrag (l) enthaltene Enzym fast vollständig an die Affi-Matrix bindet und bereits bei geringen Imidazol Konzentrationen (30-75 mM; e₁-e₃) eluiert wird. Der Pfeil zeigt die uridylierte U6 snRNA an.

Post-transkriptionelles „gene silencing“ durch siRNA, die gegen die U6-TUTase mRNA gerichtet ist. **A:** Deutlich reduzierte Proliferationsraten durch ΔU6-TUTase und durch ΔhPrp8 (ein essentieller zellulärer Spleißfaktor) siRNA im Vergleich zur GL2 Kontrolle. **B:** Real-time RT-PCR. Bestätigt, dass 48 h nach Applikation spezifischer siRNA etwa 85% der U6-TUTase mRNA degradiert ist im Vergleich zur Kontrolle.

Abstract

U6-TUTase was purified and identified by MALDI-TOF mass spectrometrie. After cDNA cloning and expression in HeLa cells, the recombinant protein was unambiguously identified as U6-TUTase. Post-transcriptional gene silencing by siRNA of U6-TUTase confirmed that the enzyme constitutes an essential cellular protein.

Rolf Heumann

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

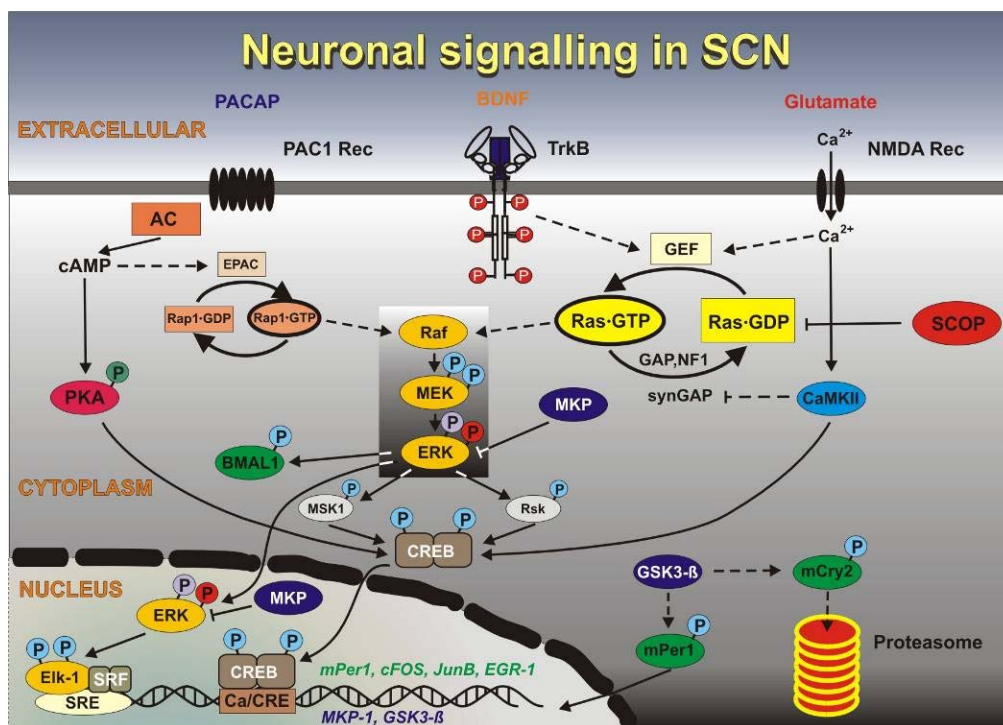
Tel.: ++49-(0)234-3224230; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: rolf.heumann@rub.de

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

Tsvetan Serchov and Rolf Heumann, *Chronobiol. Int.* **23** (2006):191-200. Constitutive Activation of Ras in Neurons: Implications for the Regulation of the Mammalian Circadian Clock

Nahezu alle Organismen dieser Erde haben eine zentrale autonome Uhr, die circadianer Rhythmus genannt wird. Bei Mensch und Tier werden periphere Uhren mit hoher Präzision durch die zentrale innere Uhr synchronisiert (eingestellt), die im *nucleus suprachiasmaticus*, einer bestimmten Region im Gehirn, liegt. Licht ist der stärkste Zeitgeber der circadianen Uhr. Circadiane Oszillationen werden durch positive und negative Rückkoppelungsmechanismen der Transkription (mRNA) und der Translation (Proteinen) gesteuert, in die eine Anzahl von Uhrengenen einbezogen sind. Ein möglicher Signalweg der Übertragung der Lichtsignale ist Ras, ein in der intrazellulären Membran verankertes Signalprotein, das auch den Zellzyklus reguliert. Um die mögliche Funktion von Ras bei der Steuerung des circadianen Rhythmus zu studieren verwenden wir ein Mausmodell, bei dem genetisch aktiviertes Ras in den Neuronen der zentralen Uhr hergestellt wird.



Almost all organisms living on earth exhibit rhythms under the control of autonomous timekeeping mechanisms, called circadian clocks. In mammals, peripheral clocks are synchronized (entrained) with high precision in a 24h periodicity by the master circadian clock, localized in the suprachiasmatic nucleus (SCN). Light is the strongest phase adjusting stimulus of the circadian clock. Circadian oscillations are driven by transcription/translation-based feedback/feedforward loops, comprising of a set of clock genes and their protein products. A candidate pathway for transmission of photic information in the SCN is the small intracellular membrane-anchored G-protein Ras. In order to study its possible role in the entrainment of the circadian clock we are using transgenic gain of function mice expressing constitutively activated Val-12 Ha-Ras selectively in neurons (synRas mice).

Irmgard Dietzel-Meyer

Molekulare Neurobiochem. – Elektrobiologie neuronaler Zellen; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

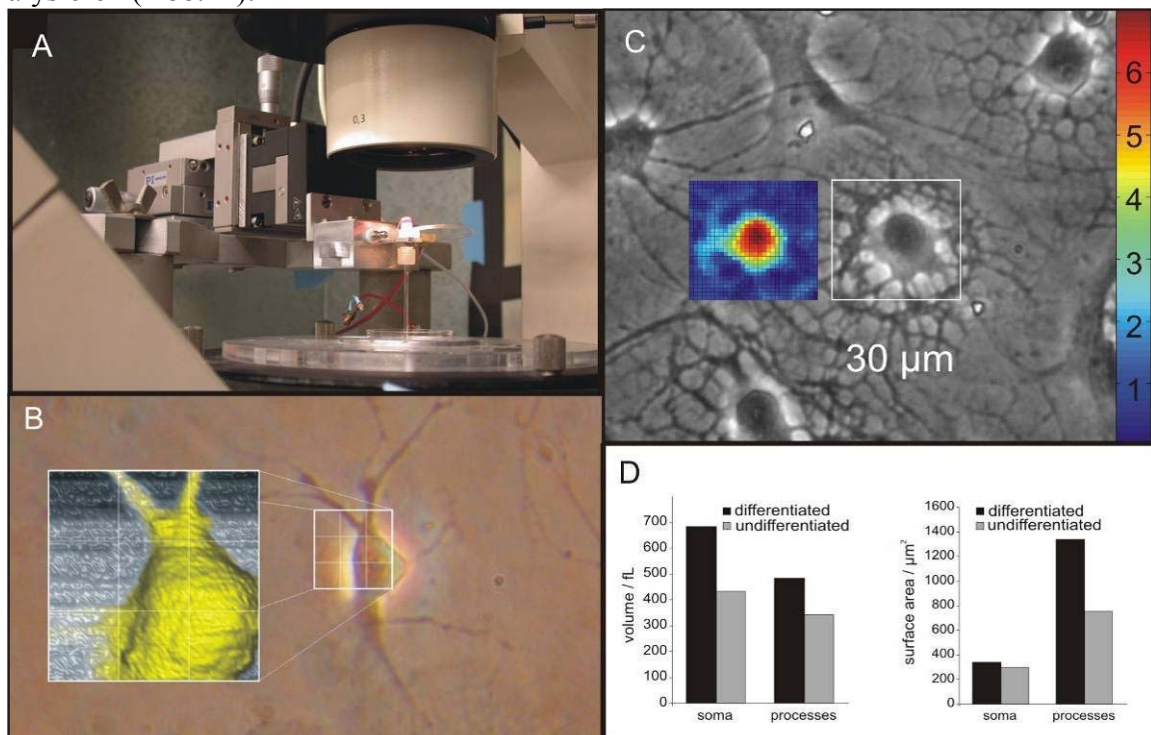
Tel.: ++49-(0)234-3225803 oder: -3224170; FAX: ++49-(0)234-3214105

email: Irmgard.D.Dietzel-Meyer@ruhr-uni-bochum.de

<http://homepage.ruhr-uni-bochum.de/Irmgard.Dietzel-Meyer/>

S.A. Mann, J.W. Meyer, I.D. Dietzel, *J. Microscopy* **224** (2006) 152-157. Integration of a scanning ion conductance microscope into phase contrast optics and its application to the quantification of morphological parameters of selected cells

Bei der *Rasterionenleitfähigkeits-Mikroskopie* (SICM) ist es oft schwer, die abgebildeten Ausschnitte mit den im Lichtmikroskop ausgewählten Zellen zur Deckung zu bringen. Wir haben einen miniaturisierten Vorverstärkerkopf entwickelt, der es ermöglicht, individuelle Zellen für die Untersuchung mit dem SICM auszuwählen (Abb. A) und die gescannten Areale den herkömmlichen Phasenkontrastausschnitten zuzuordnen (Abb. B, C). Darüber hinaus wurde die Datenauswertung weiterentwickelt, so dass es nun möglich ist, Membranoberflächen und die Volumina von Zellsomata und den Ausläufern separat zu quantifizieren. Dies ermöglicht, unterschiedliche Wirkungen extrazellulärer Signalmoleküle auf Differenzierungsprozesse, bei denen die Zellkörper und die Fasern unterschiedlich betroffen sind, separat zu analysieren (Abb. D).



Using scanning ion conductance microscopy (SICM) it is often difficult to match the scanned areas with the light microscopic pictures of the selected cells. We have developed a miniaturized headstage (Fig. A) that enables us to select individual cells for investigation with SICM under phase contrast optics, considerably improving the selection of cells for scanning as well as the positioning of the scanning frames with respect to the position of the cell somata (Fig. B, C). Furthermore, we developed a tool for data evaluation that allows one to quantify separately surfaces and volumes of cultured cell somata and processes, thus permitting the separation of effects of extracellular signaling molecules on differentiation of somata and process membrane extension separately (Fig. D).

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>

S. Wagner, C. Heseding, C. Szlachta, J.R. True; H. Prinz, B.T. Hovemann, *J. Comp. Neurol.*
DOI 10.1002/cn2 (2006) *Drosophila* photoreceptors express cysteine peptidase Tan

Wir beschreiben die Expression des Tan-Proteins in den Photorezeptorzellen R1–8 des Auges von *Drosophila*. Eine direkte räumliche Nähe von Tan und Ebony zeigt sich in den Lamina „Cartridges“, in denen jeweils drei epitheliale Gliazellen die sechs Terminals der Photorezeptorzellen R1–6 umhüllen. Ebony wird hier ausschließlich in Gliazellen exprimiert, während Tan nur in den neuronalen Photorezeptorzellen auftritt. Dieselbe Aufteilung fanden wir in der Medulla, wo die axonalen Endigungen von R7/8 mit dem Signal für Tan Seite an Seite mit dem Ebony-Signal der Gliazellen auftraten. Diese räumliche Nähe der Expression von Tan und Ebony stützt unser Modell der synaptischen Transmission im *Drosophila*-Auge, in dem die Proteine in einem putativen Kreislauf aus Histamininaktivierung und -recycling biochemisch interagieren. (www.pm.ruhr-uni-bochum.de/pm2006/msg00423.htm)

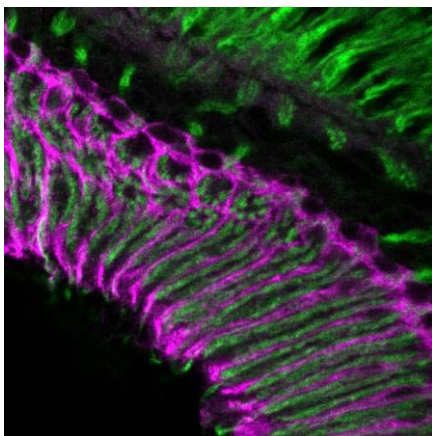


Fig.1a

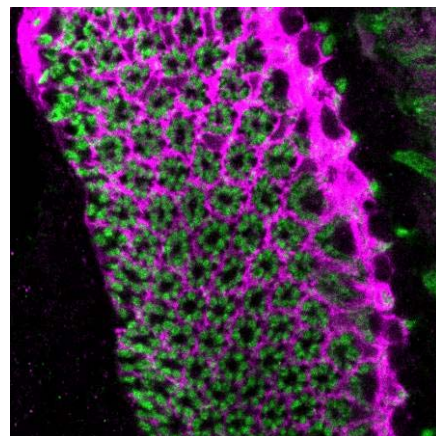


Fig.1b

Figur 1a,b: 10µm Horizontalschnitt (Fig.1a) und –Sagittalschnitt (Fig.1b) durch den optischen Lobus von *Drosophila*. Immunzytochemische Markierung der Enzyme Ebony (magenta) und Tan (grün)

We describe expression of the Tan protein in the photoreceptor cells R1–8 of the *Drosophila* eye. A close proximity of Tan and Ebony expression is evident in lamina cartridges where three epithelial glia cells envelop the six photoreceptor terminals R1–6. Ebony is exclusively expressed in glia cells, while Tan is only detected in the neuronal photoreceptor cells. We found the same distribution in the medulla, where the signal of Tan in the axonal terminals of R7/8 lined up side by side with the Ebony staining in glial extensions. This local proximity supports a model for *Drosophila* visual synaptic transmission, in which Tan and Ebony interact biochemically in a putative histamine inactivation and recycling pathway.

(www.pm.ruhr-uni-bochum.de/pm2006/msg00423.htm)

Katrin Sommer

Didaktik der Chemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3227522; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: katrin.sommer@ruhr-uni-bochum.de

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

R. Wieczorek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, 16-18. Biosensoren und Nahrungsproduzenten – Die Immobilisierung von Invertase und Urease im Chemieunterricht.

In diesem Beitrag werden Schülerexperimente zur Enzymimmobilisierung vorgestellt, bei denen als Trägermaterial der in der Automobilindustrie eingesetzte Elektrodentauchlack Resydrol verwendet wird. Hierbei handelt es sich um ein auf Acrylsäure basierendes Copolymer. Die aus Lebensmitteln isolierten Enzyme, wie Invertase aus Bäckerhefe und Urease aus Sojabohnen, können auf diese Weise immobilisiert werden und stehen für weitere Anwendungen (z.B. unkomplizierte Indikation der Enzymaktivität) zur Verfügung. Diese Methode weist eine Reihe von Vorteilen (u.a. hohes Maß an Enzymaktivität, geringer Kostenfaktor, Einsatz als Schülerexperiment möglich) gegenüber den bislang in der fachdidaktischen Literatur publizierten Methoden auf. Mit dieser Form der Enzymimmobilisierung wird darüber hinaus eine Brücke zwischen aktueller fachwissenschaftlicher Forschung (Prof. Dr. W. Schuhmann; Arbeitsgruppe „Elektroanalytik und Sensorik“) und zeitgemäßer didaktischer Umsetzung geschlagen.

Immobilisierte Urease produziert
Ammoniak in einer Harnstofflösung
(Indikation durch Phenolphthalein)



Immobilised urease producing ammonia from urea (indication by phenolphthalein)

In this contribution pupils' experiments dealing with the immobilisation of enzymes are introduced. The carrier material for this immobilisation is Resydrol, an acrylic acid based copolymer and a common dipping varnish in the automobile industry. Several enzymes isolated from food, like invertase from baker's yeast and urease from soy beans, can be immobilised in this manner and be used for other applications (e.g., uncomplicated indication of the enzyme activity). This method shows a number of advantages (high degree of enzyme activity, low cost, application as a pupils' experiment etc.) compared with the methods published up to now in the specialised didactic literature. Furthermore, this form of immobilisation builds a bridge between current scientific research (Prof. Dr. W. Schuhmann; „Elektroanalytik und Sensorik“) and up-to-date didactical implementation.

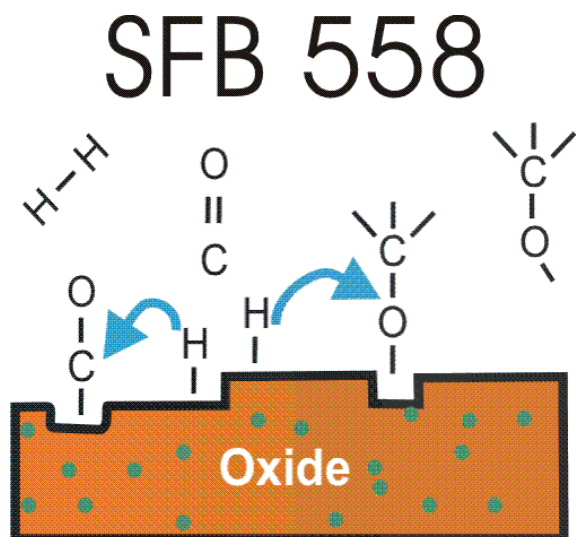
☞ Dieser Versuch ist Bestandteil des Projektes „Hätten das Haber und Bosch gewusst ...“, welches die Fakultät für Chemie und Biochemie im Alfred-Krupp Schülerlabor der RUB anbietet. Dieses Projekt wurde in den vergangenen zwei Jahren von ca. 400 Schülern durchgeführt und zählt damit zu den beliebtesten Chemie-Projekten.

Collaborative research center (Sonderforschungsbereich) SFB 558
“Metal-substrate interactions in heterogeneous catalysis”

Speaker: Christof Wöll

www.sfb558.de

Small, nanometer-sized metal particles supported on oxides exhibit very interesting electronic and chemical properties. It is the objective of the SFB 558 to investigate the chemical activities of such metal nanoparticles and to determine in particular how the interaction between the metal particles and the oxide substrate affects the chemical properties.



From a chemist's point of view this research is motivated by the pronounced importance of oxide-supported metal particles in heterogeneous catalysis. One prominent example is methanol synthesis, where syngas (a mixture of hydrogen, carbon monoxide and carbon dioxide) is converted to methanol by letting the gas pass over a catalyst consisting of Al_2O_3 , ZnO and nanosized Cu particles. When considering total quantities produced worldwide per year, methanol is number three in the list of most important chemicals. To determine the details of the molecular mechanisms governing this important catalytic process is one of the main topics in SFB 558. But besides

more chemically motivated problems there are a number of other interesting aspects related to oxide surfaces. Small molecules interacting with such substrates are relevant for a number of other fields, e.g. adhesion, friction, corrosion and photovoltaics. The often surprising properties of nanosized metal particles in direct contact with these insulating materials also carry an importance which clearly goes beyond catalysis.

In the framework of the SFB 558 a number of groups from Technical Chemistry, Inorganic Chemistry, Physical Chemistry and Theoretical Chemistry collaborate to study the importance of metal substrate interaction for a number of different reactions. Of particular importance is the precise experimental characterisation (using microscopic and spectroscopic methods as well as theoretical descriptions) of existing catalysts and the synthesis of novel catalyst types.

The SFB 558 has been established in the year 2000 and has since then been evaluated by a panel of referees twice (2003, 2006) – with very positive results. After now 7 years of intense research in this area a rather high level of understanding of oxide-based catalytic systems has been reached. Presently, important problems in methanol synthesis are tackled experimentally by determining the activity of a newly designed catalysts, then by analysing the important processes on model substrates using standard techniques in surface science and finally by advanced theoretical methods. The combination of these rather different approaches makes it possible to unravel fundamental aspects of the complex interplay between atomistic aspects governing molecule-surface interaction and the overall yield in an industrial process.

Forscherguppe 630 "Biologische Funktion von Organometallverbindungen"

Sprecher: Nils Metzler-Nolte

www.rub.de/for630

Die *Bioorganometallchemie* ist ein aktuelles, interdisziplinäres Arbeitsgebiet. Diese Forschergruppe hat das Ziel, die Organometallchemie in der medizinischen Chemie zu etablieren. Der wissenschaftliche Schwerpunkt der Forschergruppe zielt auf das umfassende Verständnis der Wechselwirkung ausgewählter Klassen von Organometallverbindungen mit ihren zellulären Zielstrukturen wie Rezeptoren, Proteinen und DNA. Dabei sollen metallspezifische Wirkmechanismen aufgeklärt werden. Diese Erkenntnisse fließen in das Design neuer Leitstrukturen ein und tragen zum Verständnis von Signalwegen und Proteinexpressionsmustern in Tumorzellen bei. Die sieben teilnehmenden Gruppen vereinen eine breite Expertise von der organischen und metallorganische Synthesechemie über die chemische Analytik bis hin zur Biochemie und Zellbiologie. Durch die Zusammenarbeit der verschiedenen Gruppen, in die auch externe Kooperationspartner eingebunden werden, entsteht ein breit aufgestelltes, kompetentes Netzwerk, welches dem jungen Gebiet der Bioorganometallchemie in Deutschland und darüber hinaus kräftigen Auftrieb geben wird.

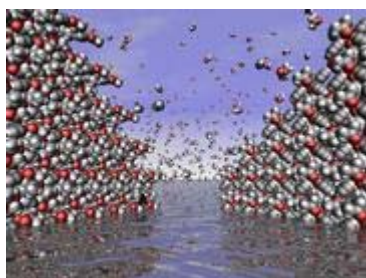


Bioorganometallic Chemistry is a young and interdisciplinary field of study. This research unit ("Forscherguppe") will establish organometallic chemistry as part of medicinal chemistry. Selected classes of organometallic compounds will be studied in their interaction with cellular components like receptors, proteins, peptides and DNA. We are aiming to identify metal-specific mechanisms of cytotoxicity. The findings will guide the design of novel metal-based lead structures and contribute to the understanding of signalling pathways and protein expression patterns. The seven participating groups combine a broad expertise from organic and metal-organic synthesis to analytical chemistry, biochemistry and cell biology. By combining the broad and diverse expertise of these groups, the core of a competent network is formed that will contribute to the development of medicinal bioorganometallic chemistry in Germany and beyond.

Forscherguppe 618 „Die Aggregation kleiner Moleküle mit präzisen Methoden verstehen - Experiment und Theorie im Wechselspiel“

Sprecher: Wolfram Sander; www.rub.de/for618

Die Aggregation von Molekülen unter Bildung wohlgeordneter Cluster bis hin zu Molekulkristallen ist ein faszinierendes, im Detail aber immer noch wenig verstandenes Phänomen. Die schwachen intermolekularen Wechselwirkungen, die für die Aggregation verantwortlich sind, lassen sich experimentell und theoretisch nur schwierig untersuchen. So ist die Vorhersage der Strukturen von Molekulkristallen bis heute ein ungelöstes Problem der Chemie, denn dazu müssen die dynamischen Prozesse verstanden werden, die von der Nukleation weniger Moleküle bis zum makroskopischen Kristall führen. Ziel ist es, ein detailliertes molekulares Verständnis von Aggregationsphänomenen – von der Bildung von Dimeren über größere Aggregate als „Urzellen“ der Kristallbildung bis zu ausgedehnten Molekulkristallen – zu erhalten. Die Aggregation und Kristallbildung selektierter Systeme soll in allen Details experimentell und theoretisch untersucht werden. Dazu gehört die Bestimmung von Strukturen, Energien und kinetischen Daten auf allen Stufen der Aggregation. Um dieses Ziel zu erreichen werden vorwiegend kleine Moleküle untersucht, bei denen die intermolekularen Wechselwirkungen am besten quantitativ bestimmt werden können. Die experimentellen Techniken umfassen die spektroskopische Charakterisierung von Aggregaten kleiner Moleküle in der Gasphase, in Molekularstrahlen, in suprafluiden, ultrakalten Heliumtröpfchen und in Inertgasmatrizes. Intermolekulare Wechselwirkungen in Molekulkristallen werden mit Hilfe der Tieftemperaturkristallisation und Röntgenstrukturanalyse bestimmt. Theoretische Methoden der Forschergruppe sind die quantitative Berechnung von intermolekularen Wechselwirkungen, Quanten Monte Carlo-Simulationen und die *ab-initio*-Molekulardynamik von Aggregaten. Dieses breite Methodenspektrum mit einer ausgewogenen Beteiligung experimentell und theoretisch arbeitender Arbeitsgruppen erlaubt die Untersuchung der Aggregation in der Gasphase, in Molekularstrahlen, in Matrizes und im Festkörper vom Einzelmolekül bis zu Einkristallen. Der Schwerpunkt liegt dabei bei der quantitativen Bestimmung von Strukturparametern und intermolekularen Wechselwirkungen sowie bei Untersuchungen zur Dynamik von Aggregationsprozessen. Das langfristige Ziel der Forschergruppe ist es, die Aggregatbildung nicht nur zu verstehen, sondern auch auf der Basis von Moleküleigenschaften quantitativ vorauszusagen.



Understanding the Aggregation of Small Molecules Using Precise Methods - Interplay between Experiment and Theory

The aggregation of molecules to form well-defined clusters up to macroscopic crystals is a fascinating phenomenon. However, details of this process are still not well understood. The weak intermolecular interactions leading to aggregation are difficult to investigate, both experimentally and theoretically. Until now, the prediction of the structure of molecule crystals is still an unsolved problem of chemistry, since especially the dynamic processes leading from the

nucleation of a few molecules to the macroscopic crystal are not well understood. The goal of the research unit is thus to obtain a detailed understanding of aggregation phenomena – from dimers to larger aggregates as nucleation centers to extended molecule crystals. The aggregation of selected systems will be investigated in all details both experimentally and theoretically. This involves the determination of structures, energies and kinetic data on all levels of aggregation.

To achieve these goals the focus will be on small molecules which allow for the quantitative determination of intermolecular interactions. The experimental techniques involve the spectroscopic characterization of aggregates of small molecules in the gas phase, in molecular beams, in suprafluid ultra-cold helium droplets, as well as in inert gas matrices. Theoretical methods used involve the quantitative calculation of intermolecular interactions, quantum Monte Carlo simulations, and *ab-initio* molecular dynamics of aggregates. This broad spectrum of methods allows to investigate the aggregation in the gas phase, in molecular beams, in matrices, and in the solid state from single molecules to molecule crystals. Of importance is the quantitative determination of structural parameters and intermolecular interactions as well as the investigation of the dynamics of aggregations. The long term goal is not only to understand aggregation, but to predict it quantitatively based on molecular properties.

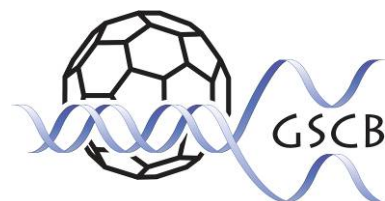
Graduate School of Chemistry and Biochemistry

Prof. Dr. Wolfram Sander, Sprecher

Dekanat Chemie, NC 02/169, Ruhr-Universität Bochum

Tel.: +49(0)234-32-26908, Fax: +49(0)234-32-14749

E-Mail: gscb@rub.de, URL: <http://www.rub.de/gscb>



Die fakultätsweite Graduate School of Chemistry and Biochemistry (GSCB) bietet jungen Wissenschaftlern ein breites 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 einem internationalem Umfeld. 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 noch bis Sommer 2007 eine fünfjährige Anschubfinanzierung des DAAD und der DFG im Rahmen des Programms *Promotion an Hochschulen in Deutschland (PHD)*. Die Graduate School umfasst derzeit über 200 Doktoranden, von denen ca. 30% ausländischer Herkunft sind.



The faculty-wide Graduate School of Chemistry and Biochemistry offers to young researchers a broad spectrum of modern day chemistry: from the design and the characterisation of molecular structures and new materials to the life sciences. The doctoral programme is based on an internationally compatible 3(+1) model: students with an excellent B.Sc. degree can enter a 1-year preparatory course. After its successful completion they may be admitted directly to the 3-year research course without having a M.Sc. degree or Diplom, which is usually required to study for a doctorate degree. All members of the Graduate School profit from a challenging curriculum, interdisciplinary guest lectures and an international environment. For foreign doctoral students the GSCB offers German language classes and provides support with immigration, local authorities and accommodation.

As an International Postgraduate Programme (IPP) and peer-reviewed centre of research excellence, the Graduate School is funded by the DAAD and DFG within the framework of the programme *Promotion an Hochschulen in Deutschland (PHD)*. It caters for more than 200 doctoral candidates. More than 30 % of them come from abroad.

Anorganische Chemie 1

- N. Metzler-Nolte, H.-B. Kraatz (Editors). *Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry*, Wiley-VCh, Weinheim, 443 pages (2006), ISBN: 3-527-31305-2.
- N. Metzler-Nolte*, "Modified DNA, PNA, and Applications in Medicine and Biotechnology", *An Introduction to Molecular Biotechnology* (Editor: M. Wink) Wiley-VCh, Weinheim (2006) 543-556.
- N. Metzler-Nolte, *Comprehensive Organometallic Chemistry III* (Editors: R. H. Crabtree and P. M. B. Mingos), Volume 1, Chapter 31 (Volume Editor: G. Parkin), Elsevier (2006) 883-920. Bioorganometallic Chemistry
- K. Severin, N. Metzler-Nolte, Chapter 6 in *Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry* (Editors: B. Kraatz und N. Metzler-Nolte) Wiley-VCh, Weinheim (2006) 113-136. Bioorganometallic Chemistry
- S. Kirin, R. Krämer, N. Metzler-Nolte, Chapter 8 in *Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry* (Editors: B. Kraatz und N. Metzler-Nolte) Wiley-VCh, Weinheim (2006) 159-176. Model Systems for Nucleases and Peptidases
- N. Metzler-Nolte, *Bioorganometallics* (Ed.: G. Jaouen) Wiley-VCh, Weinheim (2006) 125-179. Labelling of Peptides and PNA with Organometallics
- U. Schatzschneider, N. Metzler-Nolte, *Angew. Chem.* **118** (2006) 1534–1537. Neue Wirkmechanismen in der medizinischen Organometallchemie; *Angew. Chem. Int. Ed.* **45** (2006) 1504–1507. New Principles in Medicinal Organometallic Chemistry
- S.I. Kirin, H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte, *Chem. Soc. Rev.* **35** (2006) 348–354. Systematizing structural motifs and nomenclature in 1,n'-disubstituted ferrocene peptides
- L. Barisic, V. Ropic, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2006) 4019–4021. Incorporation of the unnatural organometallic amino acid 1'-aminoferrocene-1-carboxylic acid (Fca) into oligopeptides by a combination of Fmoc and Boc solid phase synthetic methods
- R. Hamzavi, Ch. Meyer, N. Metzler-Nolte, *Org. Biomol. Chem.* **4** (2006) 3648-3651. Synthesis of a C-linked glycosylated thymine-based PNA monomer and its incorporation into a PNA oligomer
- J.L. Jios, S.I. Kirin, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, C.O. Della Védova, *J. Mol. Struct.* **825** (2006) 53-59. Synthesis and spectroscopic studies of aromatic thioesters
- L. Barisic, M. Cakic, K.A. Mahmoud, Y.-N. Liu, H.-B. Kraatz, H. Pritzkow, S.I. Kirin, N. Metzler-Nolte, V. Ropic, *Chem. Eur. J.* **12** (2006) 4965-4980. Helically chiral alanine peptides containing 1'-aminoferrocene-1-carboxylic acid subunit as turn inducer
- S.I. Kirin, U. Schatzschneider, X. de Hatten, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **691** (2006) 3451-3457. 1,n'-Disubstituted ferrocenoyl peptides: Conformational analysis by CD spectroscopy, X-ray crystallography, and DFT calculations
- T. Kersebohm, S.I. Kirin, N. Metzler-Nolte, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **16** (2006) 2964-2968. Functionalization of PNA oligonucleotides via an internal Gly-(p-NO₂)Phe dipeptide unit
- U. Hoffmanns, N. Metzler-Nolte, *Bioconjugate Chem.* **17** (2006) 204-213. Use of the Sonogashira Coupling Reaction for the "two-step" Labelling of Peptide Side-Chains with Organometallic Compounds

- J.T. Chantson, M.V. Varga Falzacappa, S. Crovella, N. Metzler-Nolte, *ChemMedChem* **1** (2006) 1268-1274. Solid Phase Synthesis, Characterisation and Anti-bacterial Activity of Metallocene-Peptide Bioconjugates
- N. Metzler-Nolte, *Nachr. Chemie* (2000) 249-253. Bioanorganische Chemie 1999
- N. Roques, P. Gerbier, U. Schatzschneider, J.-P. Sutter, P. Guionneau, D. Luneau, E. Rentschler, C. Guerin, *Chem. Eur. J.* **12** (2006) 5547-5562. Experimental and theoretical studies on magnetic exchange in silole-bridged diradicals
- K. Merz, *Crystal Growth & Design* **6**(7) (2006) 1615-1619. Substitution Effect on Crystal Packings of Iodobenzonitriles and Iodophenols
- M. Mastalerz, G. Dyker, U. Floerke, G. Henkel, I. Oppel, K. Merz, *European Journal of Organic Chemistry* **21** (2006) 4951-4962. Oligophenylcalix[4]arenes as potential precursors for funnelenes and calix[4]triphenylenes: syntheses and preliminary cyclodehydration studies
- W. Marciniak, K. Merz, M. Moreno, M. Driess, *Organometallics* **25**(21) (2006) 4931-4933. Convenient Access to Homo- and Heterobimetallic Alkoxo Hydrido Zinc Clusters of Formula $[(\text{HZnOtBu})_4\text{-n}(\text{LiOtBu})_n]$ ($n = 0, 1, 2, 3$)
- U. Patil, T. Reji, A. Milanov, R. Bhakta, P. Ehrhart, R. Waser, R. Becker, H.-W. Becker, M. Winter, K. Merz, R.A. Fischer, A. Devi, *Chemical Vapor Deposition* **12**(2-3) (2006) 172-180. MOCVD of ZrO₂ and HfO₂ thin films from modified monomeric precursors
- J. Liu, E. Muth, U. Floerke, G. Henkel, K. Merz, J. Sauvageau, E. Schwake, G. Dyker, *Advanced Synthesis & Catalysis* **348**(4 + 5) (2006) 456-462. Alkylation of arenes with benzylic and propargylic alcohols - classical versus fancy catalysts
- M. Gonschorowsky, K. Merz, M. Driess, *European Journal of Inorganic Chemistry* **2** (2006), 455-463. Cyclohexylbis(hydroxymethyl)phosphine: a hydrophilic phosphine capable of forming novel hydrogen-bonding networks
- D. Kadzimirsz, D. Hildebrandt, K. Merz, G. Dyker, *Chemical Communications* **6** (2006), 661-662. Isoindoles and dihydroisoquinolines by gold-catalyzed intramolecular hydroamination of alkynes
- F. Wahl, A. Weiler, P. Landenberger, E. Sackers, T. Voss, A. Haas, M. Lieb, D. Hunkler, J. Wörth, L. Knothe, H. Prinzbach, *Chem. Eur. J.* **12** (2006) 6255-6267. Towards Perfunktionalized Dodecahedranes – En Route to C₂₀ Fullerene
- L. Jongen, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **45** (2006) 1886. The Molecular Solid Sc₂₄C₁₀I₃₀: A Truncated, Hollow T4 Supertetrahedron of Iodine Filled with a T3 Supertetrahedron of Scandium that Encapsulates the Adamantoid Sc₄C₁₀
- A. Babai, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **25** (2006) 3249. Homoleptic alkaline earth bis(trifluoromethanesulfonyl)-amide complex compounds obtained from an ionic liquid
- G. Meyer, M. Nolte, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 107. HgCl₂(Caf), Co-crystallization of Mercuric Chloride and Caffeine
- A. Babai, A.-V. Mudring, *Dalton Trans.* (2006) 1828. The first homoleptic bis(trifluoromethanesulfonyl)amide complex compounds of trivalent f-elements
- A.-V. Mudring, A. Babai, S. Arenz, R. Giernoth, K. Binnemans, K. Driesen, P. Nockemann, *J. Alloys and Compounds* **418** (2006) 204. Strong Luminescence of rare earth compounds in ionic liquids: Luminescent properties of lanthanide(III) iodides in the ionic liquid 1-dodecyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide

- A. Babai, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 1956. The Octanuclear Europium Cluster [bmypr]₆[Eu₈(μ₄-O)(μ₃-OH)₁₂(μ₂-OTf)₁₄(μ₁-Tf)₂](HOTf)_{1.5} Obtained from the Ionic Liquid [bmypr][OTf]
- A. Babai, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **25** (2006) 4874. Crystal Engineering in ionic liquids. The crystal structures of [mppypr]₃[NdI₆] and [bmypr]₄[NdI₆][Tf₂N]
- T. Timofte, A. Babai, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **25** (2006) 5162. Synthesis and structural characterization of cluster type basic lanthanide iodides [M₆(μ₆O)(μ₃-OH)₈(H₂O)₂₄][I₈(H₂O)₁₂]
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 2106. Ionic Liquid Crystals,
- F. Rieger, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 2113. New Thallium Sulfotellurites
- A. Babai, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 2163. Solvent-Solute Interactions
- T. Timofte, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 2164. Ionic Liquids with Weakly Coordinating Anions,
- A.-V. Mudring: Ionic Liquids – New Versatile Materials in: M. Lein (ed.) *Proceedings of the NZIC 2006*, Massey University Press, Palmerston North, Vol. 1, 91. ISBN-10: 0-473-11854-8.
- A.-V. Mudring: Stereochemical activity of lone pairs in heavier main group elements, in: G. Meyer, D. Naumann, L. Wesemann (Eds.), *Inorganic Chemistry in Focus III*, Wiley VCH, Chapter 2, p. 15-28 (2006).
- A.-V. Mudring: Ionic Liquids as Versatile Media in Lanthanide Chemistry, R. Rogers, K. Seddon (Eds.) ACS Symposium Series (2006).

Anorganische Chemie 2

- D. Rische, H. Parala, E. Gemel, M. Winter, and R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **18** (2006), 6075 - 6082. New Tungsten(VI) Guanidinato Complexes: Synthesis, Characterization, and Application in Metal-Organic Chemical Vapor Deposition of Tungsten Nitride Thin Films
- A. Baunemann, M. Winter, K. Csapek, C. Gemel, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2006), 4665-4672. Mixed Amido/Imido/Guanidinato complexes of tantalum: Effects of ligand substitution on thermal properties.
- O. Segnitz, M. Winter and R. A. Fischer, *J. Organomet. Chem.* **691** (2006) 4733-4739. Novel Complexes of Nickel with N-Heterocyclic Ligands and the Hemilabile [2(Dimethylamino)ethyl]cyclopentadienyl Group.
- B. Buchin, C. Gemel, A. Kempter, T. Cadenbach and R. A. Fischer, *Inorg. Chim. Acta* **359** (2006) 4833-4839. Reaction of Iron and Ruthenium Halogenido Complexes with GaCp* and AlCp*: Insertion, Cp* Transfer Reactions and Orthometallation.
- F. Schröder, S. Hermes, H. Parala, T. Hikov, M. Muhler and R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **16**, (2006), 3565 - 3574. Non Aqueous Loading of the Mesoporous Siliceous MCM-48 Matrix with ZnO: A Comparison of Solution, Liquid and Gas-Phase Infiltration using Diethyl Zinc as Organometallic Precursor.
- B. Buchin, C. Gemel, T. Cadenbach, I. Fernández, G. Frenking, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **45** (2006), 5207-5210. Naked Ga⁺ and In⁺ as Pure Acceptor Ligands: Structure and Bonding of [GaPt(GaCp*)₄][BAR^F].

- A. Baunemann, M. Hellwig, A. Varade, R. K. Bhakta, M. Winter, S. A. Shivashankar, R. A. Fischer, A. Devi, *Dalton Trans.* (2006), 3485-3490. Precursor chemistry for TiO₂: Titanium complexes with a mixed nitrogen/oxygen ligand sphere.
- S. Hermes, F. Schröder, S. Amirjalayer, R. Schmid, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **16** (2006), 2464 - 2472. Loading of Porous Metal-Organic Open Frameworks with Organometallic CVD-Precursors: Inclusion Compounds of the Type [L_nM]_a@MOF-5
- M. Cokoja, H. Parala, M. K. Schröter, A. Birkner, M. W. E. van den Berg, K. V. Klementiev, W. Grünert and R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **16** (2006), 2420 - 2428. Nano-Brass Colloids: Synthesis by Co-Hydrogenolysis of [CpCu(PMe₃)] with [ZnCp*₂] and Investigation of the Oxidation Behaviour of alpha/beta-CuZn Nanoparticles.
- M. Cokoja, H. Parala, M.-K. Schröter, A. Birkner, M. W. E. van den Berg, W. Grünert, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **18** (2006), 1634-1642. Nanometallurgy of Colloidal Aluminides: Soft Chemical Synthesis of CuAl₂ and α/β-CuAl Colloids by Co-Hydrogenolysis of (AlCp*)₄ with [CpCu(PMe₃)].
- A. Kempter, C. Gemel, N. J. Hardman, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **45** (2006), 3133-3138. Insertion of the Ga(I) Bis-imidinate Ga(DDP) into the Metal Halogen Bonds of Rh(I) Complexes. How Electrophilic Are Coordinated Ga(DDP) Fragments?
- B. Buchin, C. Gemel, T. Cadenbach, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **45** (2006), 1789-1794. Coordination chemistry of Ga(C₅Me₄Ph): Novel homoleptic d¹⁰ cluster complexes of palladium.
- A. Kempter, C. Gemel, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* (2006), 1551-1553. The Al(I) bisimidinate Al(DDP) as a metalloid NHC type ligand for Pd(0) complexes and clusters.
- B. Buchin, C. Gemel, T. Cadenbach, R. Schmid, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **45** (2006), 1074-1076. The [Ga₂(C₅Me₅)⁺]⁺ ion: Bipyramidal double-cone structure and weakly coordinated, monovalent Ga⁺.
- D. Rische, A. Baunemann, M. Winter, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **45** (2006), 269-277. Mixed guanidinato/alkylimido/azido tungsten(VI) complexes: Synthesis and structural characterization.
- A. Baunemann, Y. Kim, M. Winter, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2006), 121-128. Mixed hydrazido amido/imido complexes of tantalum, hafnium and zirconium: potential precursors for metal nitride MOCVD.
- T. Hikov, M. K. Schroeter, L. Khodeir, A. Chemseddine, M. Muhler, R. A. Fischer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006), 1550-1555. Selective photo-deposition of Cu onto the surface of monodisperse oleic acid capped TiO₂ nanorods probed by FT-IR CO-adsorption studies.
- U. Patil, R. Thomas, A. Milanov, R. Bhakta, P. Ehrhart, R. Waser, R. Becker, H. W. Becker, M. Winter, K. Merz, A. Devi, R. A. Fischer, *Chem. Vap. Dep.* **12** (2006), 172-180. MOCVD of ZrO₂ and HfO₂ thin films from modified monomeric precursors.
- G. Brenner, M. Mukinovic, E. Mesic, R. Schmid, M. Tafipolsky, J. Khanderi, R. A. Fischer, *Chemie Ingenieur Technik - CIT* **78** (2006), 679 - 688. Ein Mehrskalenansatz zur numerischen Simulation und Analyse der metallorganischen Gasphasenepitaxie.
- M. K. Schröter, L. Khodeir, Maurits W. E. van den Berg, T. Hikov, M. Cokoja, S. Miao, W. Grünert, M. Muhler and R. A. Fischer, *Chem. Commun.* (2006), 2498 - 2500. A colloidal ZnO/Cu nanocatalyst for methanol synthesis.
- R. Thomas, A. Milanov, R. Bhakta, U. Patil, M. Winter, P. Ehrhart, R. Waser and A. Devi, *Chem. Vap. Deposition* **12** (2006) 295-300. Liquid injection MOCVD of ZrO₂

thin films using zirconium bis-(diethylamido)bis(di-*tert*-butylmalonato) as a novel precursor,

- Milanov, R. Bhakta, A. Baunemann, H. W. Becker, R. Thomas, P. Ehrhart, M. Winter, A. Devi, *Inorganic Chemistry*, **46** (2006), 11008-11018. Guanidinate stabilized monomeric hafnium amide complexes as promising precursors for MOCVD of HfO₂.
- Milanov, R. Bhakta, R. Thomas, P. Ehrhart, M. Winter, R. Waser, A. Devi, *J. Mater. Chem.* **16** (2006) 437-440. Mixed amide malonate compound of hafnium as a novel monomeric precursor for MOCVD of HfO₂ thin films.
- M. Tafipolsky, R. Schmid, *J. Chem. Phys.* **124** (2006) 174102/1-174102/9. A general and efficient Pseudopotential Fourier Filtering Scheme for Real Space Methods using Mask Functions.
- G. Brenner, M. Mukinovic, E. Mesic, R. Schmid, M. Tafipolsky, J. Khanderi, R. A. Fischer, *Chemie Ingenieur Technik* **78** (2006) 679-688. Ein Mehrskalenansatz zur numerischen Simulation und Analyse der metallorganischen Gasphasenepitaxie.
- R. Schmid, M. Tafipolsky, P. H. König, H. Köstler, *phys. stat. sol. (b)* **243** (2006) 1001-1015. Car-Parrinello molecular dynamics using real space wavefunctions.

Organische Chemie 1

- M. Feigel, R. Ladberg, S. Engels, R. Herbst-Irmer, R. Fröhlich *Angew. Chem.* **118** (2006) 5827-5831. Ein Kleeblattknoten aus Aminosäuren und Steroiden. *Angew. Chem. Int. Ed.* **45** (2006) 5698-5702. A Trefoil Knot Made of Amino Acids and Steroids.
- M. Feigel, R. Ladberg, M. Winter, D. Bläser, R. Boese *Eur. J. Org. Chem.* **2006**, 371–377. Synthesis and Structure of Macrolactams of 3- α -Aminodeoxycholic Acid.
- M.A. Bedau, A. Buchanan, G. Gazzola, M. Hanczyc, T. Maeke, J.S. McCaskill, I. Poli and N.H. Packard, *Artificial Evolution (Springer-Verlag Berlin)* **3871** (2006) 201-212. Evolutionary design of a DDPD model of ligation.
- R.M. Füchslin, T. Maeke, U. Tangen and J.S. McCaskill, *Advances in Complex Systems* **9(1-2)** (2006) 1-29. Evolving inductive generalization via genetic self-assembly.
- U. Tangen, P.F. Wagler, S. Chemnitz, G. Goranovic, T. Maeke and J.S. McCaskill, *ComPlexUs* **3(1-3)** (2006) 48-57. An electronically controlled microfluidics approach towards artificial cells.
- S. Chemnitz, U. Tangen, P.F. Wagler, T. Maeke and J.S. McCaskill, in 9th Int. Conference on Microreaction Technology (IMRET 9) pp. 381–382, 2006. Electronically programmable membranes for improved biomolecule handling in micro-compartments on-chip.

Organische Chemie 2

- C. Kolano, G. Bucher, D. Grote, O. Schade, W. Sander, *Photochem. Photobiol.* (2006), 332 – 338. A TRIR, TREPR and Computational Study on the Reactivity and Structure of the 2,2,2-Trifluoroethoxycarbonyl Radical.
- G. Bucher, C. Kolano, O. Schade, W. Sander, *J. Org. Chem.* **71** (2006), 2135 – 2138. A Time-Resolved Infrared Study on the Photochemistry of O-Fluoroformyl- and O-Chlorooxalyl-9-fluorenone Oxime: The Reactivity of the Fluoroformyl Radical in Acetonitrile Solution.
- E. Sánchez-García, L. A. Montero, W. Sander, *J. Phys. Chem. A* **110** (2006) 12613 – 12622. Computational Study of Non-Covalent Complexes between Formamide and Formic Acid.

- O. C. M. O'Sullivan, S. G. Collins, A. R. Maguire, M. Böhm, W. Sander, *Eur. J. Org. Chem.* (2006) 2918 – 2924. Photochemistry of cis 3-Diazo-5,6-dimethyl-[1,4]oxathian-2-one S-oxide in Argon Matrices.
- M. Winkler, W. Sander, *J. Org. Chem.* **71** (2006) 6357 – 6367. Generation and Reactivity of the Phenyl Cation in Cryogenic Argon Matrices: Monitoring the Reactions with Nitrogen and Carbon Monoxide Directly by IR Spectroscopy.
- E. Sánchez-García, A. Mardyukov, M. Studentkowski, L. A. Montero, W. Sander, *J. Chem. Phys. A* **110** (2006) 13775-13785. Furan – Formic Acid Dimers – an Ab Initio and Matrix Isolation Study.
- C. Kolano, J. Helbing, M. Kozinski, W. Sander, P. Hamm, *Nature* (2006) **444**, 469 – 472. Ultrafast β -Turn Opening Observed by Transient 2D-IR Spectroscopy.
- J. Liu, E. Muth, U. Flörke, G. Henkel, K. Merz, J. Sauvageau, G. Dyker, *Adv. Synth. Catal.* **348** (2006) 456-462. Alkylation of Arenes with Benzylic and Propargylic Alcohols - Classical Versus Fancy Catalysts
- G. Dyker, M. Hagel, O. Muth, C. Schirmacher, *Eur. J. Org. Chem.* **2006**, 2134-2144. Sterically Stabilized *Para*-Quinodimethanes by Nucleophilic Aromatic Substitution
- G. Dyker, D. Hildebrandt, D. Kadzimirsz, K. Merz, *Chem. Commun.* **2006**, 661-662, Isoindoles and Dihydroisoquinolines by Gold-Catalyzed Intramolecular Hydroamination of Alkynes
- M. Mastalerz, G. Dyker, *Synlett* **2006**, 1419-1421. Synthesis and Spectroscopic Properties of a Novel Bisspirocalixarene
- D. Hildebrandt, W. Hüggenberg, M. Kanthak, T. Plöger, I. Müller, G. Dyker, *Chem. Commun.* **2006**, 2260-2261. A Platinum-Catalyzed Annulation Reaction to Medium-Sized Rings
- M. Mastalerz, W. Hüggenberg, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2006**, 3977-3987. Photochemistry of Styrylcalix[4]arenes
- G. Dyker, D. Hildebrandt, *J. Org. Chem.* **71** (2006) 6728-6733. A Gold-Catalyzed Domino Process to the Steroid Framework
- M. Mastalerz, U. Flörke, G. Henkel, K. Merz, I. M. Oppel, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2006**, 4951-4962. Oligophenylcalix[4]arenes as Potential Precursors for Funnelenes and Calix[4]triphenylenes: Syntheses and Preliminary Cyclodehydration Studies
- H. F. Bettinger, *J. Am. Chem. Soc.* **128** (2006) 2534-2535. Phenylborylene: Direct Spectroscopic Investigation in Inert Gas Matrices.
- H. F. Bettinger, *Chem. Eur. J.* **12** (2006) 4372-4379. The Addition of Carbenes to the Sidewalls of Single-Walled Carbon Nanotubes.
- H. F. Bettinger, H. Peng, *J. Organomet. Chem.* **691** (2006), 4480-4485. Dinitrogen Extrusion from Diazidophenylborane: Computational Analysis of $C_6H_5BN_x$ ($x = 6, 4, 2$) Isomers.
- H. F. Bettinger, H. Bornemann, *J. Am. Chem. Soc.* **128** (2006) 11128-11134. Donor Stabilized Borylnitrene: A Highly Reactive BN Analogue of Vinylidene.

Physikalische Chemie 1

- A. Siber, Ch. Boas, M.W. Cole, Ch. Wöll, *Chem. Phys. Chem.* **7**, 5, 1015-1018, (2006). Anomalous low probabilities for rotational excitation in HD/surface scattering: a sensitive and direct test of the potential between closed shell molecules and alkali metals

- G. Witte, K. Hänel, S. Söhnchen, Ch. Wöll, *Applied Physics A*, **82**, 447-455 (2006). Growth and morphology of thin films of aromatic molecules on metals: the case of perylene
- X.-L. Yin, A. Birkner, K. Hänel, T. Löber, U. Köhler, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 13, 1477-1481, (2006). Adsorption of atomic hydrogen on ZnO(10 $\bar{1}$ 0): A STM study
- K. Hänel, A. Birkner, S. Müllegger, A. Winkler, Ch. Wöll, *Surf. Sci.*, **600**, 2411-2416 (2006). Manipulation of organic “needles” using an STM operated under SEM control
- M. Ay, A. Nefedov, S. Gil Girol, Ch. Wöll, H. Zabel, *Thin Solid Films*, **510**, 346-350 (2006). Structure and surface termination of ZnO films grown on (0001)- and (11-20)-oriented Al₂O₃
- D. Käfer, G. Witte, P. Cyganik, A. Terfort, Ch. Wöll, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 1723-1732 (2006). A comprehensive study of self-assembled monolayers of anthracenethiol on gold: solvent effects, structure, and stability
- M. Schiek, K. Al-Shamery, M. Kunat, F. Traeger, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 13, 1505-1512 (2006). Water adsorption on the hydroxylated H-(1 x 1) O-ZnO(000 $\bar{1}$) surface
- Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 1475-1476 (2006). Chemical processes at oxide surfaces
- Y. Wang, M. Muhler, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 1521-1524 (2006). Spectroscopic evidence for the partial dissociation of H₂O on ZnO(10 $\bar{1}$ 0)
- M. Kunat, B. Meyer, F. Traeger, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 1499-1504 (2006). Structure and dynamics of CO overlayers on a hydroxylated metal oxide: The polar ZnO(000 $\bar{1}$) surface
- W. Azzam, A. Bashir, A. Terfort, T. Strunskus, C. Wöll, *Langmuir*, **22** (8), 3647-3655 (2006). Combined STM and FTIR characterization of terphenylalkanethiol monolayers on Au(111): Effect of alkyl chain length on deposition temperature
- P. Cyganik, M. Buck, T. Strunskus, A. Shaporenko, J.D.E.T. Wilton-Ely, M. Zharnikov, C. Wöll, *JACS*, **128** (42), 13868 (2006). Competition as a design concept: Polymorphism in Self-Assembled Monolayers of Biphenyl-Based Thiols
- O. Shekhah, C. Busse, A. Bashir, F. Turcu, X. Yin, P. Cyganik, A. Birkner, W. Schuhmann, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 3375-3378 (2006). Electrochemically deposited Pd islands on an organic surface: The presence of Coulomb blockade in STM i(V) curves at room temperature
- A. Badura, B. Esper, K. Ataka, Ch. Grunwald, Ch. Wöll, J. Kuhlmann, J. Heberle, M. Rögner, *Photochemistry and Photobiology*, **82**, 1385-1390 (2006). Light-driven water-splitting for (bio)-hydrogen production: Photosystem 2 as central part of a bioelectrochemical device
- P.S. Bagus, Ch. Wöll, E.S. Ilton, *Chemical Physics Letters*, **428**, 207-212 (2006). A definitive analysis of the Rydberg and valence anti-bonding character of states in the O K-edge of H₂O
- A. Dmitriev, H. Spillmann, S. Stepanow, T. Strunskus, Ch. Wöll, A.P. Seitsonen, M. Lingenfelder, N. Lin, J.V. Barth, K. Kern, *Chem. Phys. Chem.*, **7**, 2197-2204 (2006). Asymmetry induction by cooperative intermolecular hydrogen bonds in surface-anchored layers of achiral molecules
- M.-E. Canas-Ventura, F. Klappenberger, S. Clair, S. Pons, K. Kern, H. Brune, T. Strunskus, Ch. Wöll, R. Fasel, J.V. Barth, *J. Chem. Phys.*, **125**, 184710 (2006).

Coexistence of one- and two-dimensional supramolecular assemblies of terephthalic acid on Pd(111) due to self-limiting deprotonation

- C. Bock, D.V. Pham, U. Kunze, D. Käfer, G. Witte, Ch. Wöll, *J. Appl. Phys.* **100**, 114517 (2006). Improved morphology and charge carrier injection in pentacene field-effect transistors with thiol-treated electrodes
- S. Müllegger, K. Hänel, T. Strunskus, Ch. Wöll, A. Winkler, *ChemPhysChem.* **7**, 2552-2558, (2006). Organic molecular beam deposition of oligophenyls on Au(111): A study by x-ray absorption spectroscopy
- A. Ghosh, G.J.K. Praefcke, L. Renault, A. Wittinghofer, C. Herrmann, *Nature* **440** (2006) 101-104. How Guanylate Binding Proteins achieve assembly-stimulated processive cleavage of GTP to GMP
- E. Harjes, S. Harjes, S. Wohlgemuth, K.H. Müller, E. Krieger, C. Herrmann, P. Bayer, *Structure* **14** (2006) 881-888. GTP-Ras disrupts the intramolecular complex of C1 and RA domains of Nore1
- S. Kunzelmann, G.J.K. Praefcke, C. Herrmann, *J. Biol. Chem.* **281** (2006) 28627-28635. Transient kinetic investigation of GTP hydrolysis catalyzed by interferon-gamma induced human Guanylate-Binding Protein 1 (hGBP1)

Physikalische Chemie 2

- 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) 72-77. THz time-domain spectroscopy as a new tool for plasma diagnostics
- J.-S. Samson, G. Wollny, E. Bründermann, A. Bergner, A. Hecker, G. Schwaab, A. D. Wieck, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 753-758. Set-up of a scanning near field microscope (SNIM): Imaging of sub-surface nano-structures in gallium-doped silicon
- K. von Haefen, S. Rudolph, I. Simanowski, M. Havenith, R.E. Zillich, K.B. Whaley, *Phys. Rev. B* **73**, (2006) 054502/1-054502/17; also selected for *Vir. J. of Nanoscale Science & Technology* **13** (7) 20.02.06. Probing phonon-rotation coupling in Helium nanodroplets: IR spectroscopy of CO and its isotopomers
- E. Bründermann, M. Havenith, G. Scalari, M. Giovanni, J. Faist, J. Kunsch, L. Mechold, M. Abraham, *Optics Express* **14**, (2006) 1829-1841. Turn-key compact high temperature terahertz quantum cascade lasers: imaging and room temperature detection
- E. Bründermann, M. Havenith, *Proc. SPIE* **6194**, (2006) 619406/1-619406/8. Applications of semiconductor terahertz lasers in biomolecular spectroscopy and imaging
- M. Havenith, M. Ortlieb, *Physik in unserer Zeit* **2**, (2006) 59. Gefangen in der Quantenflüssigkeit
- U. Heugen, G. Schwaab, E. Bründermann, M. Heyden, X. Yu, D.M. Leitner, M. Havenith, *PNAS* **103**, (2006) 12301-12306. Solute-induced retardation of water dynamics probed directly by THz spectroscopy
- D.M. Leitner, M. Havenith M. Gruebele, *Intl. Reviews in Physical Chemistry* **25**, (2006) 553-582. Biomolecule large amplitude motion and solvation dynamics: Modeling and probes from THz to X-rays
- M. Havenith, Hydrogen Transfer Reactions, Volume 1, 33-53, edited by J.Hynes, J.P. Klinmann, H.-H. Limbach, R.L. Schowen, Wiley-VCH (2006), Coherent Proton Tunnelling in Hydrogen Bonds of Isolated Molecules: Carboxylic Dimers

- E. Brunner, M.C. Thies, G.M. Schneider, *J. Supercritical Fluids* **39(2)** (2006) 160-173. Fluid mixtures at high pressures: Phase behavior and critical phenomena for binary mixtures of water with aromatic hydrocarbons.

Analytische Chemie

- O. Hohage, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **100** (2006) 1506 - 1513. Cisplatin mediates selective downstream hydrolytic cleavage of Met-(Gly)_n-His segments (n = 1, 2) in methionine- and histidine-containing peptides: the role of ammine loss trans to the initial Pt-S(Met) anchor in facilitating amide hydrolysis.
- W. S. Sheldrick, *Handbook of Chalcogen Chemistry: New Perspectives in Sulfur, Selenium und Tellurium*, (F. Devillanova ed.), RSC Publishing, Cambridge, 2006. (ISBN 085404 366 7) Polychalcogenides, pp. 543 - 574.
- B. B. Ivanova, M. G. Arnaudov, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **E62** (2006) o3 - o4. S-Phenyl 4-cyanothiobenzoate.
- Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 191 - 194. Cs₃Se₂₂, a selenium-rich caesium polyselenide containing Se₈ crowns and $\frac{2}{\infty}$ [Se₆³⁻] anions with radical character.
- T. Kolev, D. Yancheva, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **E62** (2006) o463 – o465. L-Prolinamidium hydrogensquarate.
- M. Mijanuddin, S. Gangopadhyay, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, S. Mondal, M. Ali, *J. Indian Chem. Soc.* **83** (2006) 568 – 573. Synthesis, characterization and X-ray structure of copper(II) and nickel(II) complexes of N,N,N',N' tetrakis (2-benzimidazolylmethyl)-1,2-ethanediamine.
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E 62** (2006) i41 - i43. Tetra caesium Octaselenidotetraarsenate(III).
- B. Ivanova, M. G. Arnaudov, S. Todorov, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Struct. Chem.* **17** (2006) 49 - 56. Structural analysis of the tripeptide glycylmethionylglycine H-Gly-Met-Gly-OH and its hydrochloride.
- Maity, A. Ray, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, M. Ali, *Inorg. Chim. Acta* **359** (2006) 3197 - 3204. Synthesis and crystal structure of a salicylato-oxovanadium(V) complex of an amine-bis(phenolate) ligand: kinetic studies on its formation from corresponding alkoxo complexes. 2005) o4229 – o4230. Trimethylarsonium iodide.
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 1409 - 1412. Synthesis and structure of Cs₂[As(CH₃Se₃)]·2H₂O and Cs₂As₄Se₆ containing the catena-hexaselenidotetraarsenate(II, III) anion $\frac{1}{\infty}$ [As₄Se₆₂].
- T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **632** (2006) 1413 - 1415. Methanolothermal synthesis of [Mn(en)₃][Mn₂(SbSe₄)₂(en)₄(H₂O)] and [Mn(en)₃][{Mn(en)₂(H₂O)}₂(μ-SbSe₄)] [Mn(μ-SbSe₄)(en)₂]Cl representing the first example of a transition-metal-containing ternary catena-selenidoantimonate(V).
- T. Kolev, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **E62** (2006) o774 – o776. 4-Acetyl-N-methylaniline.
- Kromm, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E62** (2006) m2767 - m2769. Tetrakis(μ₂-selenido)-bis(tris(2-aminoethyl)amine)-diselenido-dimanganese(II)-ditin(IV).
- J. Chakraborty, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, P. Banerjee, *Polyhedron* **25** (2006) 3138 - 3144. Structure and property of unsymmetrical binuclear [(3,5-dimethylpyrazole)₂Pd₂(μ-3,5-dimethylpyrazolate)₂(2,6-dipicolinate)] and mononuclear [Na₂(H₂O)₄Pd(2,6-dipicolinate)₂] complexes.

- T. Kolev, B. B. Koleva, E. Cherneva, M. Spiteller, M. Winter, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Struct. Chem.* **17** (2006) 491 - 499. Crystal structure, IR-LD spectroscopic, theoretical and vibrational analysis of valinamide ester amide of squaric acid diethyl ester.
- G. Samsonenko, Y. V. Mironov, O. A. Efremova, D. Y. Naumov, O. A. Gerasko, V. P. Fedin, V. E. Federov, W. S. Sheldrick, *J. Struct. Chem.* **46** (2006) S 121 - S 129. Synthesis and crystal structure of supramolecular compounds of cucurbituril with the chalcocyanide cluster $[\text{Re}_4\text{Te}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$ and a manganese(II) aqua complex.
- T. Kolev, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **C62** (2006) o299 – o300. L-Argininamidium bis(hydrogensquarate).
- T. Kolev, E. Cherneva, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Acta Cryst.* **E62** (2006) o1390 – o1392. L-Methioninamide ester amide of squaric acid diethyl ester.
- B. Koleva, E. N. Trendafilova, M. G. Arnaudov, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Transition Met. Chem.* **31** (2006) 866 - 873. Spectral analysis and crystal structure of a new mononuclear copper(II) complex of 3-aminopyridine.
- T. Kolev, B. B. Ivanova, M. Emgenbroich, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Struct. Chem.* **17** (2006) 631 - 637. Crystal structure and linear-dichroic infrared (IR-LD) spectral analysis of N,N'-diethyl-4-vinylbenzamidinium squarate.
- S. Isik, W. Schuhmann, *Angew. Chem.* **118** (2006) 7611-7614. Detektion der Ausschüttung von NO an einzelnen Zellen mit elektrochemischer Rastermikroskopie in konstantem Abstand. *Angew. Chem. Int. Ed.* **45** (2006) 7451-7454. Detection of nitric oxide release from single cells using constant distance mode scanning electrochemical microscopy
- K. Eckhard, X. Chen, F. Turcu, W. Schuhmann, *PCCP* **8** (2006) 5359-5365. Redox-competition mode of scanning electrochemical microscopy (SECM) for visualisation of local catalytic activity
- M. Etienne, E. A. Clark, S. R. Evans, W. Schuhmann, I. Fritsch *Anal. Chem.* **78** (2006) 7317-7324. Feedback-independent Pt nanoelectrodes for shearforce-based constant-distance mode scanning electrochemical microscopy
- S. Neugebauer, U. Müller, T. Lohmüller, J.P. Spatz, M. Stelzle, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **18** (2006) 1929-1936. Characterization of nanopore electrode structures as basis for amplified electrochemical assays
- M. Maciejewska, D. Schäfer, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **18** (2006) 1916-1928. SECM visualization of spatial variability of enzyme-polymer spots. 2. Complex interference elimination by means of selection of highest sensitivity sensor sub-structures and artificial neural networks
- N. Li, K. Eckhard, J. Aßmann, V. Hagen, H. Otto, X. Chen, W. Schuhmann, M. Muhler *Rev. Sci. Instr.* **77** (2006) 084102. Scanning mass spectrometry with integrated constant distance positioning.
- O. Shekhah, C. Busse, A. Bashir, F. Turcu, X. Yin, P. Cyganik, A. Birkner, W. Schuhmann, Ch. Wöll, *PCCP* **8** (2006) 1–4. Electrochemically deposited Pd islands on an organic surface: the presence of Coulomb blockade in STM I(V) curves at room temperature. Doi 10.1039/b606488d
- M. Maciejewska, D. Schäfer, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **8** (2006) 1119-1124. SECM imaging of spatial variability in biosensor architectures
- D. A. Guschin, Y. Sultanov, N. Sharif-Zade, E. Aliyev, A. Efendiev, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **51** (2006) 5137-5142. Redox polymer-based reagentless horseradish peroxidase biosensors. Influence of the molecular structure of the polymer

- L.V. Shkotova, A.P. Soldatkin, M.V. Gonchar, W. Schuhmann, S.V. Dzyadevych, *Mat. Sci. Eng. C – Biomim. & Supramol. Sys.* **26** (2006) 411-414. Amperometric biosensor for ethanol detection based on alcohol oxidase immobilised within electrochemically deposited Resydrol film
- A. Ramanaviciene, W. Schuhmann, A. Ramanavicius, *Colloids & Surfaces B: Biointerfaces* **48** (2006) 159-166. AFM study of conducting polymer polypyrrole nanoparticles formed by redox enzyme – glucose oxidase – initiated polymerisation
- D. Ruhlig, A. Schulte, D. Bogdanski, M. Köller, W. Schuhmann *SMST – Proceedings of the International Conference on Shape Memory and Superelastic Technologies* (M. Mertmann, ed.), ASM, Ohio, 2006. (ISBN: 0-87170-834-5). Automated voltammetric stripping analysis of Ni^{2+} -ions from gradually corroding NiTi shape memory alloys. pp. 351-356.
- S. Borgmann, I. Radtke, T. Erichsen, A. Blöchl, R. Heumann, W. Schuhmann, *ChemBioChem* **7** (2006) 669-672. Electrochemical high-content screening of nitric oxide release from endothelial cells
- W. Schuhmann, *Unterricht Chemie* **17** (2006) #92, 44-47. Immobilisierung von Enzymen.
- D. Ruhlig, W. Schuhmann, *Nachrichten aus der Chemie* **54** (2006) 313-315. Kombinatorische Elektrochemie und elektrochemische Robotik.
- Y. M. Temerk, H. S. M. Ibrahim, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **153** (2006) 7-13. Cathodic adsorptive stripping voltammetric determination of the antitumor drug Rutin in pharmaceuticals, human urine, and blood serum.
- O. Smutok, B. Ngounou, H. Pavlishko, G. Gayda, M. Gonchar, W. Schuhmann, *Sensors & Actuators B* **113** (2006) 590–598. A reagentless bienzyme amperometric biosensor based on alcohol oxidase/peroxidase and an Os-complex modified electrodeposition paint
- D. Ruhlig, A. Schulte, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **18** (2006) 53-58. An electrochemical robotic system for routine cathodic adsorptive stripping analysis of Ni^{2+} -ion release from corroding NiTi shape memory alloys.
- H. Schulenburg, M. Hilgendorff, I. Dorbandt, J. Radnik, P. Bogdanoff, S. Fiechter, M. Bron, H. Tributsch, *J. Power Sources* **155** (2006) 47-51. Oxygen reduction at carbon supported ruthenium-selenium catalysts: Selenium as promoter and stabilizer of catalytic activity.
- M. Bron, D. Stürmer, C. Baehtz, C. Volckmar, H. Fuess, P. Claus, *Jahresbericht des HASYLAB Hamburg* (2006) 573-574. Influence of oxygen pre-treatment on the properties of Ag hydrogenation catalysts studied with in situ-XRD and in situ-EXAFS.
- D. Wolters, F. Fischer, M. Rögner, A. Pötsch, *Mol Cell Proteomics* **5**(3) (2006), 444-53 Towards the complete membrane proteome: High coverage of integral membrane proteins through transmembrane peptide detection.
- Nowaczyk, M., Berghaus, C., Steinhoff, H.-J., Stoll, R. & Rögner, M. *Essays on Science - Felicitation Volume in honour of Prof. Voelter, Hamdard Laboratories. Editor: Sadia Rashid.* Hamdard Foundation Pakistan, Karachi (2006). Preliminary NMR and EPR studies of the 33 kDa protein (PsbO) in solution.
- Stoll, R., Lodermeier, S. & Bosserhoff, A.-K. (2006). Detailed analysis of MIA protein by mutagenesis. *Biological Chemistry* **387**, 1601-1606.

Theoretische Chemie

- N. N. Nair, E. Schreiner, and D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **128** (2006) 13815-13826. Glycine at the Pyrite-Water Interface: The Role of Surface Defects.
- R. Pollet, C. Boehme, and D. Marx, *Origins Life Evol. Biospheres* **36** (2006) 363-379. Ab Initio Simulations of Desorption and Reactivity of Glycine at a Water-Pyrite Interface at "Iron--Sulfur World" Prebiotic Conditions.
- B. Meyer, H. Raaba, and D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** 1513-1520. Water adsorption on ZnO(10-10): from single molecules to partially dissociated monolayers. see also *Cover Picture* and *Cover Story* of *Special Issue PCCP* **8** (13) (2006) 1467.
- M. E. Tuckerman, A. Chandra, and D. Marx, *Acc. Chem. Res.* **39** (2006) 151-158. Structure and Dynamics of OH⁻(aq).
- M. Baer, E. Schreiner, A. Kohlmeyer, R. Rousseau, and D. Marx, *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 3576-3587. Inverse Temperature Transition of a Biomimetic Elastin Model: Reactive Flux Analysis of Folding/Unfolding and its Coupling to Solvent Dielectric Relaxation; part of the "Michael L. Klein Festschrift".
- P. Kumar P. and D. Marx, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 573-586 (2006). Understanding hydrogen scrambling and infrared spectrum of bare CH₅⁺ based on *ab initio* simulations.
- D. Marx, *Computer Simulations in Condensed Matter: From Materials to Chemical Biology*, Vol. 2 507-539; Editors: M. Ferrario, K. Binder, and G. Ciccotti (Springer, Berlin 2006). Advanced Car-Parrinello Techniques: Path Integrals and Nonadiabaticity in Condensed Matter Simulations.
- D. Marx, *Computational Nanoscience: Do It Yourself!* pp.195-244, Editors: J. Grotendorst, S. Blügel, and D. Marx (John von Neumann Institute for Computing, Forschungszentrum Jülich 2006). An Introduction to Ab Initio Molecular Dynamics Simulations.
- D. Marx, *ChemPhysChem* **7** (2006) 1848-1870 (2006). Proton Transfer 200 Years after von Grotthuss: Insights from Ab Initio Simulations. Addendum: *ChemPhysChem* **8** (2007) 209-210, Invited Review by the Editors; see also *Cover Picture* and *Cover Story* on p. 1837.
- J. Grotendorst, S. Blügel, and D. Marx, *Computational Nanoscience: Do It Yourself!*, (John von Neumann Institute for Computing, Forschungszentrum Jülich 2006).
- H. Fliegl, C. Hättig, W. Klopper, *J. Chem. Phys.* **124** (2006) 044112. Coupled-cluster response theory with linear r₁₂ corrections: The CC2-R12 model for vertical excitation energies.
- A. Rizzo, S. Coriani, D. Marchesan, J.L. Cacheiro, B. Fernandez, C. Hättig, *Mol. Phys.* **104** (2006) 305-318. Density dependence of electric properties of binary mixtures of inert gases.
- C. Hättig, A. Hellweg, A. Köhn, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1159-1169. Distributed memory parallel implementation of energies and gradients for second-order Møller-Plesset perturbation theory with the resolution-of-the-identity approximation.
- C. Hättig, *Computational Nanoscience: Do It Yourself!*, (J. Grotendorst, S. Blügel, D. Marx, eds.) John von Neumann Institute for Computing, Jülich, Germany, 2006. (ISBN 3-00-017350-1). Beyond Hartree-Fock: MP2 and Coupled-Cluster Methods for Large Systems. pp. 245-274.

- M.J. Paterson, O. Christiansen, F. Pawłowski, P. Jørgensen, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **124** (2006) 054322. Benchmarking two-photon absorption with CC3 quadratic response theory, and comparison with density functional response theory.
- C. Hättig, *Nachrichten aus der Chemie* **54** (2006) 280-281. Coupled cluster methods.
- M. Pecul, F. Pawłowski, P. Jørgensen, A. Köhn, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **124** (2006) 114101. High-order correlation effects on dynamic hyperpolarizabilities and their geometric derivatives: a comparison with density functional results.
- A. Sobolewski, W. Domcke, C. Hättig, *J. Phys. Chem. A* **110** (2006) 6301-6306. Photophysics of organic photostabilizers. Ab initio study of the excited-state deactivation mechanisms of 2-(2'-hydroxyphenyl)benzotriazole.
- A. Hellweg, C. Hättig, I. Merke, W. Stahl, *J. Chem. Phys.* **124** (2006) 204305. Microwave and theoretical investigation of the internal rotation in *m*-cresol.
- H. Fliegl, C. Hättig, W. Klopper, *Int. J. Quant. Chem.* **106** (2006) 2306-2317. Inclusion of the (T) triples correction into the linear- r_{12} corrected coupled-cluster model CCSD(R12).
- C. Neiss, C. Hättig, W. Klopper, *J. Phys. Chem.* **125** (2006) 064111. Extensions of r_{12} corrections to CC2-R12 for excited states.
- O.T. Ehrler, J.P. Yang, C. Hättig, A.-N. Unterreiner, H. Hippler, M.M. Kappes, *J. Chem. Phys.* **125** (2006) 074311. Femtosecond pump/probe photoelectron spectroscopy of isolated C_{60} negative ions.
- O. Christiansen, S. Coriani, J. Gauss, C. Hättig, P. Jørgensen, F. Pawłowski, A. Rizzo, *Non-Linear Optical Properties of Matter — From molecules to condensed phases* (M. Papadopoulos, A.J. Sadlej, J. Leszczynski, eds.) Springer, Germany, 2006. (ISBN: 1-4020-4849-1). Accurate NLO properties for small molecules. Methods and results. pp. 51-99.
- E. Fabiano, F. Della Sala, S. Lattante, M. Anni, G. Sotgui, G. Barbarelle, C. Hättig, R. Cingolina, G. Gigli, *J. Phys. Chem. B* **110** (2006) 18651-18660. N-Succinimidyl-bithiophene: comparison between coupled-cluster, TD-DFT calculations and experiments and the effects of the binding to biomolecules.
- C. Hättig, A. Hellweg, A. Köhn, *J. Am. Chem. Soc.* **128** (2006) 15672-15682. Intramolecular Charge-Transfer Mechanism in Quinolidines: The Role of the Amino-Twist Angle.
- N. L. Doltsinis, in *Computational Nanoscience: Do it yourself!*, edited by J. Grotendorst, S. Blügel, and D. Marx, (NIC, FZ Jülich, 2006) 389-409. Molecular Dynamics Beyond the Born-Oppenheimer Approximation: Mixed Quantum-Classical Approaches. <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume31/doltsinis1.pdf>
- N. L. Doltsinis, in *Computational Nanoscience: Do it yourself!*, edited by J. Grotendorst, S. Blügel, and D. Marx, (NIC, FZ Jülich, 2006) 375-387. Free Energy and Rare Events in Molecular Dynamics. <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume31/doltsinis2.pdf>
- N. L. Doltsinis, in *Computational Nanoscience: Do it yourself!*, edited by J. Grotendorst, S. Blügel, and D. Marx, (NIC, FZ Jülich, 2006) 357-373. Time-dependent Density Functional Theory. <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume31/doltsinis3.pdf>
- N. A. Besley and N. L. Doltsinis *J. Chem. Theory Comput.* **2** (2006) 1598-1604. Ab Initio Finite Temperature Electronic Absorption Spectrum of Formamide.

- M. Kunat, B. Meyer, F. Traeger, and Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1499-1504. Structure and dynamics of CO overlayers on a hydroxylated metal oxide: The polar ZnO (000-1) surface
- Y. Umeno, B. Meyer, C. Elsässer, and P. Gumbsch, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 060101(R). Ab initio study of the critical thickness for ferroelectricity in ultrathin Pt/PbTiO₃/Pt films
- K. Fink, *Chem. Phys.* **326** (2006) 297-307. Ab initio calculations of the magnetic properties of ZnO doped with transition metal atoms
- K. Fink, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1482-1489. Ab initio cluster calculations on the electronic structure of oxygen vacancies at the polar ZnO(000-1) surface and on the adsorption of H₂, CO, and CO₂ at these sites
- N. Rössler, K. Kotsis, V. Staemmler *PCCP* **8** (2006) 697-706. Ab initio calculations for the Zn 2s and 2p core level binding energies in Zn oxo compounds and ZnO
- K. Kotsis, V. Staemmler *PCCP* **8** (2006) 1490-1498. Ab initio calculations of the O1s XPS spectra of ZnO and Zn oxo compounds
- V. Staemmler *Computational Nanoscience: Do It Yourself! J. Grotendorst, S. Blügel, D. Marx (Eds.), John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC Series, Vol. 31 (2006) 1-18*. Introduction to Hartree-Fock and CI Methods
- W. Kutzelnigg, W. Liu, *Mol. Phys.* **104** (2006) 2225. Quasirelativistic theory. I. Theory in terms of a quasirelativistic operator
- W. Kutzelnigg, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **768** (2006) 163. Density functional theory in terms of a Legendre transformation for beginners
- W. Kutzelnigg, W. Liu, *J. Chem. Phys.* **125** (2006) 094302. Response to the "Comment on 'Quasirelativistic theory equivalent to fully relativistic theory'"
- W. Kutzelnigg *J. Chem. Phys.* **125** (2006) 171101. Density cumulant functional theory.
- W. Kutzelnigg *Lecture notes on computer and computer science (Brill, Leiden)* **6** (2006) 23. Density functional theory (DFT) and ab-initio quantum Chemistry (AIQC). Story of a difficult partnership.
- W. Kutzelnigg, R. Jaquet, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **xx** (2006) xxx. Explicitly correlated potential energy surface for H³⁺ including relativistic and adiabatic effects
- W. Kutzelnigg *J. Comput. Chem.* **125** (2006) 171101. What I like about Hückel theory.

Technische Chemie

- A. Hornung, D. Zemlyanov, M. Muhler, G. Ertl, *Surf. Sci.* **600** (2006) 370-379. The catalytic reduction of NO by H₂ on Ru(0001): Observation of NH_{ads} species.
- Y. Wang, M. Muhler, Ch. Wöll, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1521-1524. Spectroscopic evidence for the partial dissociation of H₂O on ZnO(10-10).
- R. Naumann d'Alnoncourt, X. Xia, J. Strunk, E. Löffler, O. Hinrichsen, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1525-1538. The influence of strongly reducing conditions on strong metal-support interactions in Cu/ZnO catalysts used for methanol synthesis.
- J. Strunk, R. Naumann d'Alnoncourt, M. Bergmann, S. Litvinov, X. Xia, O. Hinrichsen, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1556-1565. Microkinetic modeling of CO TPD spectra using coverage dependent microcalorimetric heats of adsorption.

- X. Xia, R. Naumann d'Alnoncourt, J. Strunk, S. Litvinov, M. Muhler, *J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 8409-8415. Coverage-Dependent Kinetics and Thermodynamics of Carbon Monoxide Adsorption on a Ternary Copper Catalyst Derived from Static Adsorption Microcalorimetry.
- X. Xia, S. Litvinov, M. Muhler, *Langmuir* 22 (2006) 8063-8070. Consistent Approach to Adsorption Thermodynamics on Heterogeneous Surfaces Using Different Empirical Energy Distribution Models.
- R. Weiss, Y. Guo, S. Vukojevic, L. Khodeir, R. Boese, F. Schüth, M. Muhler, M. Epple, *Euro. J. Inorg. Chem.* (2006) 1796-1802. Catalytic Activity of Copper Oxide/Zinc Oxide Composites Prepared by Thermolysis of Crystallographically Defined Bimetallic Coordination Compounds.
- F. Winter, X. Xia, B. Hereijgers, J. Bitter, A. van Dillen, M. Muhler, K. de Jong, *J. Phys. Chem. B* 110 (2006) 9211-9218. On the Nature and Accessibility of the Brønsted-Base Sites in Activated Hydrotalcite Catalysts.
- S. Polarz, J. Strunk, V. Ischenko, M. van den Berg, O. Hinrichsen, M. Muhler, M. Driess, *Angew. Chem. Int.* 45 (2006) 2965-2969. On the Role of Oxygen Defects in the Catalytic Performance of Zinc Oxide.
- M. Schröter, L. Khodeir, M. van den Berg, T. Hikov, M. Cokoja, S. Miao, W. Grünert, M. Muhler, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* (2006) 2498-2500. A colloidal ZnO/Cu nanocatalyst for methanol synthesis.
- M. van den Berg, S. Polarz, O. Tkachenko, K. Klementiev, M. Bandyopadhyay, L. Khodeir, H. Gies, M. Muhler, W. Grünert, *J. Catal.* 241 (2006) 446-455. Cu/Zn aggregates in siliceous mesoporous matrices: Development of a new model methanol synthesis catalyst.
- J. Aßmann, M. Muhler, *Chemie Ingenieur Technik* 7 (2006) 78. Der isotherme Labor-Festbettreaktor mit quantitativer schneller Online-Analytik als vielseitiges Instrument in der Redoxkatalyse.
- F. Schröder, S. Hermes, H. Parala, T. Hikov, M. Muhler, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* 16 (2006) 3565-3574. Non aqueous loading of the mesoporous siliceous MCM-48 matrix with ZnO: a comparison of solution, liquid and gas-phase infiltration using diethyl zinc as organometallic precursor.
- N. Li, K. Eckhard, J. Aßmann, V. Hagen, H. Otto, X. Chen, W. Schuhmann, M. Muhler, *Rev. Sci. Instrum.* 77 (2006) 084102-1-084102-6. Scanning mass spectrometry with integrated constant distance positioning.
- R. Weiss, S. Vukojevic, C. Baltes, R. Naumann d' Alnoncourt, M. Muhler, M. Epple, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2006) 4782-4786. Copper/Zinc L-Tartrates: Mixed Crystals and Thermolysis to a Mixture of Copper Oxide and Zinc Oxide That Is Catalytically Active in Methanol Synthesis.
- Y. Guo, W. Meyer-Zaika, M. Muhler, S. Vukojevic, M. Epple, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2006) 4774-478. Cu/Zn/Al Xerogels and Aerogels Prepared by a Sol-Gel Reaction as Catalysts for Methanol Synthesis.
- T. Hikov, M.-K. Schroeter, L. Khodeir, A. Chemseddine, M. Muhler, R.A. Fischer, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2006) 1550-1555. Selective photo-deposition of Cu onto the surface of monodisperse oleic acid capped TiO₂ nanorods probed by FT-IR CO-adsorption studies.

- M. Bandyopadhyay, O. Korsak, M.W.E. van den Berg, W. Grünert, A. Birkner, W. Li, F. Schüth, H. Gies, *Microporous Mesopor. Mater.* **89** (2006) 158-163. Gold nanoparticles stabilized in mesoporous silica as active CO-oxidation catalyst
- E. V. Makshina, S.V. Sirotin, V.V. Yushchenko, G.N. Mazo, M.W.E. van den Berg, K.V. Klementiev, W. Grünert, B.V. Romanovsky, *Kinet. Catal.* **47** (2006) 49-53. Nanocomposites based on LaCoO_3 and mesoporous molecular sieves: Preparation and physicochemical and catalytic properties
- O. P. Tkachenko, K.V. Klementiev, M.W.E. van den Berg, H. Gies, W. Grünert, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8** (2006) 1539-49. The Reduction of Copper in Porous Matrices – The role of electrostatic stabilisation
- M. Cokoja, H. Parala, M.-K. Schröter, A. Birkner, M.W.E. van den Berg, W. Grünert, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **18** (2006) 1634-1642. Nanometallurgy of Colloidal Aluminides: Soft Chemical Synthesis of CuAl_2 and α, β -CuAl Colloids by Co-Hydrogenolysis of $(\text{AlCp}^*)_4$ with $[\text{CpCu}(\text{PMe}_3)]$
- M. Santhosh Kumar, M. Schwidder, W. Grünert, U. Bentrup, A. Brückner, *J. Catal.* **239** (2006) 173-186. Selective reduction of NO with Fe-ZSM-5 catalysts of low Fe content. II - Assessing the function of different Fe sites by spectroscopic in situ studies
- M. K. Schröter, L. Khodeir, M.W.E. van den Berg, T. Hikov, M. Czokoja, S. Miao, W. Grünert, M. Muhler, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* (2006) 2498-2500. A Colloidal $\text{ZnO}@\text{Cu}$ Nanocatalyst for Methanol Synthesis
- M.W.E. van den Berg, S. Polarz, O.P. Tkachenko, K.V. Klementiev, M. Bandyopadhyay, L. Khodeir, H. Gies, M. Muhler, W. Grünert, *J. Catal.* **241** (2006) 446-455. Cu/ZnO aggregates in siliceous mesoporous matrices – Development of a new model methanol synthesis catalyst
- M. Cokoja, H. Parala, M.-K. Schröter, A. Birkner, M.W.E. van den Berg, K.V. Klementiev, W. Grünert, R.A. Fischer, *J. Mat. Chem.* **16** (2006) 2420-2428. Nano-brass colloids: synthesis by co-hydrogenolysis $[\text{CpCu}(\text{PMe}_3)]_2$ with $[\text{ZnCp}^*_2]$ and investigation of oxidation behaviour of α/β -CuZn nanoparticles
- E.V. Makshina, S.V. Sirotin, M.W.E. van den Berg, K.V. Klementiev, V.V. Yushchenko, G.N. Mazo, W. Grünert, B.V. Romanovsky, *Appl. Catal. A* **312** (2006) 59-66. Characterization and catalytic properties of nanosized cobaltate particles prepared by *in-situ* synthesis inside mesoporous molecular sieves
- A. S. Pribytkov, O.P. Tkachenko, A.Yu. Stakheev, K.V. Klementiev, W. Grünert, M.W. E. van den Berg, L.M. Kustov, V.N. Golubeva, A.V. Tel'nov, *Mendeleev Commun.* (2006), 254-256. Effect of electron beam-irradiation on the structure and catalytic performance of Pd nanoparticles supported on Al_2O_3 and carbon
- O.P. Tkachenko, A.Yu. Stakheev, L.M. Kustov, I.V. Mashkovsky, M.W. E. van den Berg, W. Grünert, N.Yu. Kozitsyna, Z.V. Dobrokhotova, V.I. Zhilov, S.E. Nefedov, M.N. Vargaftik, I.I. Moiseev, *Catal. Lett.* **112** (2006) 155-161. An easy way to Pd-Zn nanoalloy with defined composition from a hetero-bimetallic $\text{Pd}(\mu\text{-OOCMe})_4\text{Zn}(\text{OH}_2)$ complex as evidenced by XAFS and XRD
- O.P. Tkachenko, A.Yu. Stakheev, L.M. Kustov, I.V. Mashkovsky, M.W.E. van den Berg, W. Grünert, N.Yu. Kozitsyna, Zh.V. Dobrokhotova, V.I. Zhilov, S.E. Nefedov, M. N. Vargaftik, I.I. Moiseev, *Hasylab report*, 2006. A New Way to Pd-Zn/C Nanoalloy Catalyst as Evidenced by XAFS and XRD

- M.W.E. van den Berg, K.V. Klementiev, S. Polarz, H. Gies, W. Grünert, *Hasylab report* 2006. In-situ XAFS of Cu/ZnO methanol synthesis catalysts

Biochemie 1

- G.-B. Jeong, M. Werner, V. Gazula, T. Itoh, M. Roberts, R. L. Neve, M. Hollmann, R. Kalb, *Cell. Mol. Neurosci.*, **32** (2006) 299-314. Identification of electrophysiological properties of AMPA-type glutamate receptors that control the activity-dependent remodeling of motor neuron dendrites.
- T. Hülksen, M. Clemmensen, M. Hollmann, *Zootaxa* **1257** (2006) 1-25. *Neverita delessertiana* (Récluz in Chenu, 1843): a naticid species (Gastropoda: Caenogastropoda) distinct from *Neverita duplicata* (Say, 1822) based on molecular data, morphological characters, and geographical distribution.
- D. Klein, T. Schmandt, E. Muth-Köhne, A. Perez-Bouza, M. Segschneider, V. Gieselmann, O. Brüstle, *Gene Ther.* **2006** (2006) 1-10. Embryonic stem cell-based reduction of CNS sulfatide storage in an animal model of metachromatic leukodystrophy.
- D. Tapken, M. Hollmann, Homologs of mammalian glutamate receptors in invertebrates and plants. In: *Biophysical aspects of ligand-gated ion channel receptor superfamilies* (H. Arias, ed.). Research SignPost, Trivandrum, India, 2006, pp. 321-382.
- J. Hoffmann, A. Gorodetskaia, M. Hollmann, *Mol. Cell. Neurosci.* **33**(3) (2006) 335-343. Ion pore properties of ionotropic glutamate receptors are modulated by a transplanted potassium channel selectivity filter.
- J. Hoffmann, C. Villmann, M. Werner, M. Hollmann, *Mol. Cell. Neurosci.* **33**(4) (2006) 358-370. Investigation via ion pore transplantation of the putative relationship between glutamate receptors and K⁺ channels.
- N. Strutz-Seeböhm, G. Kornichuck, R. Baltaev, O.N. Ureche, A.F. Mack, Z.-L. Ma, M. Hollmann, R. Schwarz, F. Lang, G. Seeböhm, *Cell. Physiol. Biochem.* **18** (2006) 287-294. Functional significance of the kainate receptor GluR6(M836I) mutation that is linked to autism.
- R. Trippe, E. Guschina, M. Hossbach, H. Urlaub, R. Lührmann and B.J. Benecke, *RNA* **12** (2006) 1494-1504. Identification, cloning, and functional analysis of the human U6 snRNA-specific terminal uridylyl transferase.

Biochemie 2

- Sokolova VV, Radtke I, Heumann R, Epple M. *Biomaterials*. (2006) 27(16), 3147-53. Effective transfection of cells with multi-shell calcium phosphate-DNA nanoparticles.
- Borgmann S, Radtke I, Erichsen T, Blochl A, Heumann R, Schuhmann W. *Chembiochem.* (2006) 7(4), 662-668. Electrochemical High-Content Screening of Nitric Oxide Release from Endothelial Cells.
- Serchov T, Heumann R. *Chronobiol Int.* (2006) 23(1-2), 191-200. Constitutive activation of ras in neurons: implications for the regulation of the mammalian circadian clock.
- S. Wagner, C. Heseding, C. Szlachta, J.R. True, H. Prinz, B.T. Hovemann, *J. Comp. Neurol.* DOI 10.1002/cn2 (2006). *Drosophila* photoreceptors express cysteine peptidase Tan.

- F. Martin, M.-S. Kim, C. Gomez-Diaz, B. Hovemann, E. Alcorta, *Genetica* **128** (2006) 359-372. High efficiency of a double-screening method on single P-element insertion lines to identify quantitative trait mutants in *Drosophila melanogaster*
- T. Kemme, B.T. Hovemann, *BIOforum* **03** (2006) 26-27. Die Farbe von Fliegen und ihr Sehvermögen
- S.A. Mann, J.W. Meyer, I.D. Dietzel, *J. Microscopy* **224** (2006) 152-157. Integration of a scanning ion conductance microscope into phase contrast optics and its application to the quantification of morphological parameters of selected cells

Didaktik der Chemie

- B. Donner, K. Sommer, *RAAbits Chemie* (2006) 28 S. Was in einem Brühwürfel steckt – Vom sensorischen Test zur quantitativen Bestimmung.
- K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, S.4-7. Enzyme im Chemieunterricht. (Basisartikel)
- H. Schmidkunz, P. Pfeifer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, S.8-11. Enzyme – Grundwissen im Überblick.
- R. Wieczorek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, S.12-15. Ein Enzym für Frische und Geschmeidigkeit – Schulversuche mit dem Enzym Invertase.
- R. Wieczorek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, S.16-18. Biosensoren und Nahrungsproduzenten – Die Immobilisierung von Invertase und Urease im Chemieunterricht.
- D. Roth, O. Tribus, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, S.22-27. Fruchtsaft und Gummibärchen – Experimente zur enzymatischen Hydrolyse von Gelatine.
- M. Heidenreich, R. Wieczorek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 92, S.36-40. Emulsin und Blausäure.
- A. Bienholz, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **17** (2006) 94/95, S.48-51. Teebeutel statt Soxhlet-Apparat – Funktionsprinzipien erkennen.

Promotionen in der Fakultät für Chemie
01.01.2006 bis 31.12.2006

Ackermann, Holger

Triphospheniumionen als Synthesebausteine und Liganden für Übergangsmetalle

1. Referent: Prof. Dr. M. Drieß

Disputation: 27.06.2006

van Almsick, Tobias

Solvatothermale Darstellung und Strukturchemie von Selenidometallaten der schwereren Elemente der Gruppen 14 und 15

1. Referent: Prof. Dr. W. S. Sheldrick

Disputation: 05.05.2006

Arnal, Pablo Maximiliano

The synthesis of monodisperse colloidal core@shell spheres and hollow particles

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 16.05.2006

Baunemann, Arne

Precursor Chemistry of Tantalum and Niobium Nitride for MOCVD and ALD Applications

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

Disputation: 08.11.2006

Bellosta von Colbe, Jose Maria E. E.

Hydrogen Storage in Light Metal Hydrides

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 02.02.2006

Eberth, Alexander

Regulatorische Mechanismen in der Signaltransduktion kleiner GTPasen der Rho-Familie

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 05.05.2006

Eckardt, Lars Henning

Nicht kovalente Nanostrukturen an Oberflächen auf Basis von verzweigten p-RNA- und DNA-Oligonucleotiden

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

Disputation: 19.12.2006

Hambruch, Nina

Analyse des zytotoxischen Effektes von geringen Konzentrationen beta-Amyloid über den Neurotrophin Rezeptor p75

1. Referent: Priv.-Doz. Dr. A. Blöchl

Disputation: 23.06.2006

Hambruch, Eva

Lipidinteraktion des peroxisomalen PTS-1 Importrezeptors Pex5p

1. Referent: Priv.-Doz. Dr. W. Schliebs

Disputation: 10.11.2006

Hauss, Oliver

New approaches for the early detection of colon cancer - The road to molecular point-of-care diagnosis -

1. Referent: Priv.-Doz. Dr. O. Müller

Disputation: 08.08.2006

Hermes, Stephan

Poröse Metallorganische Netzwerkverbindungen als Trägermatrices für funktionelle Nanopartikel

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

Disputation: 17.10.2006

Hildebrandt, Dirk

Naturstoffsynthesen durch Gold- und Platin-katalysierte Dominoprozesse

1. Referent: Prof. Dr. G. Dyker

Disputation: 30.06.2006

Isik, Sonnur

Electrochemical detection of nitric oxide from living cells

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 03.02.2006

Kemme, Tobias

Histaminkreislauf im visuellen System von *Drosophila melanogaster*

1. Referent: Prof. Dr. B. Hovemann

Disputation: 14.07.2006

Khanderi, Jayaprakash

Group-III Nitrides - Contribution to Precursor Chemistry, MOCVD, Nanostructures and Multiscale Simulation Studies -

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

Disputation: 28.02.2006

Khayer, Khurshida

Synthesis and Kinetic Studies of Some Model Peptides

1. Referent: Prof. Dr. W. Sander

Disputation: 31.01.2006

Khodeir, Lamma

IR-spektroskopische und kinetische Untersuchungen von Modellkatalysatoren für die Methanolsynthese

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 24.04.2006

Kleinschmidt, Volker D.

Infrared Spectra of Protonated Networks of Water Molecules in the Interior of Bacteriorhodopsin: A QM/MM Molecular Dynamics Study

1. Referent: Prof. Dr. D. Marx

Disputation: 04.05.2006

Kotsis, Konstantinos

Ab initio Rechnungen zu O1s XPS-Spektren von reinen und adsorbatbedeckten ZnO-Oberflächen

1. Referent: Prof. Dr. V. Staemmler

Disputation: 06.11.2006

Langer, Holger

Nichtadiabatische ab initio Molekulardynamiksimulationen photoangeregter Nukleobasen

1. Referent: Prof. Dr. N. Doltsinis

Disputation: 19.05.2006

Mann, Stefan

Erweiterung eines Raster-Ionenleitfähigkeitsmikroskops und Anwendung zur Untersuchung der Morphologien differenzierender Oligodendrozyten in Kultur

1. Referent: Priv.-Doz. Dr. I. Dietzel-Meyer

Disputation: 04.05.2006

Monse, Hella

Virale Determinanten für eine präferenzielle Integration lentiviraler Vektoren auf der Basis des Affenimmundefizienzvirus

1. Referent: Prof. Dr. med. K. Überla

Disputation: 27.04.2006

Narkhede, Vijay Sopan

Kinetic and Spectroscopic Investigations to Elucidate the Mechanisms of Co Oxidation over Ru and Au Catalysts

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 19.05.2006

Oczko, Sylvia Anita

Das Koordinationsverhalten und die Bildung von Zersetzungsprodukten von multidentatem Methylcycloarsoxan

1. Referent: Prof. Dr. I. Oppel

Disputation: 08.08.2006

Peyker, Anna Julia

Spatial regulation of Ras activity

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 27.04.2006

Reimold, Malte

Untersuchung der Eigenschaften reaktiver Gele im Kontext der festphasengebundenen DNA-Replikation

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

Disputation: 19.12.2006

Rosenkranz, Katja

Charakterisierung der AAA-Peroxine und der mit ihnen assoziierten Komplexe

1. Referent: Prof. Dr. R. Erdmann

Disputation: 10.02.2006

Rudolph, Stephan

Hochauflösende Laserspektroskopie von Molekülen in Heliumnanotröpfchen

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

Disputation: 08.08.2006

Ruppel, Lars

Charakterisierung ultradünner Pentacen-Filme auf sauberem und chemisch/elektronisch modifiziertem Au(111)

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Wöll

Disputation: 06.11.2006

Sanchez Garcia, Elsa

Computational Study of Weakly Interacting Complexes

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

Disputation: 20.07.2006

Schoenen, Robert

Molekulare Modelle für die Synthese von Methanol aus Synthesegas auf ZnO als Katalysator

1. Referent: Prof. Dr. M. Driß

Disputation: 01.02.2006

Scrima, Andrea

Biochemische und strukturelle Untersuchungen zur Funktion des an der Modifikation von tRNA beteiligten Guaninnukleotid-bindenden Proteins MnME

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 08.02.2006

Stefanou, Daniela

Intronunabhängige Expression des Glykoproteins G des \$Vesicular\$-Stomatitis-Virus zur Pseudotypisierung lentiviraler Vektoren

1. Referent: Prof. Dr. med. K. Überla

Disputation: 18.07.2006

Stieglitz, Benjamin

Kristallographische und biochemische Untersuchungen zum Komplex aus Ras und dem Tumorsuppressor NORE1A

1. Referent: Prof. Dr. Ch. Herrmann

Disputation: 19.12.2006

Wang, Li Wen

Directed Evolution of the \$Aspergillus niger\$ Epoxide Hydrolase

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

Disputation: 16.06.2006

Wapner, Kristof

Grenzflächenchemische und elektrochemische Untersuchungen zur Haftung und Enthftung an modifizierten Klebstoff/Metall-Grenzflächen

1. Referent: Prof. Dr. M. Stratmann

Disputation: 18.05.2006

Xia, Wei

Synthesis, Characterization and Catalytic Application of Carbon- and Silica-Based Nanocomposites

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 12.05.2006

Xia, Xinyu

Experimental and Theoretical Aspects of Adsorption Microcalorimetry Applied to Characterize Heterogeneous Catalysts

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 28.06.2006