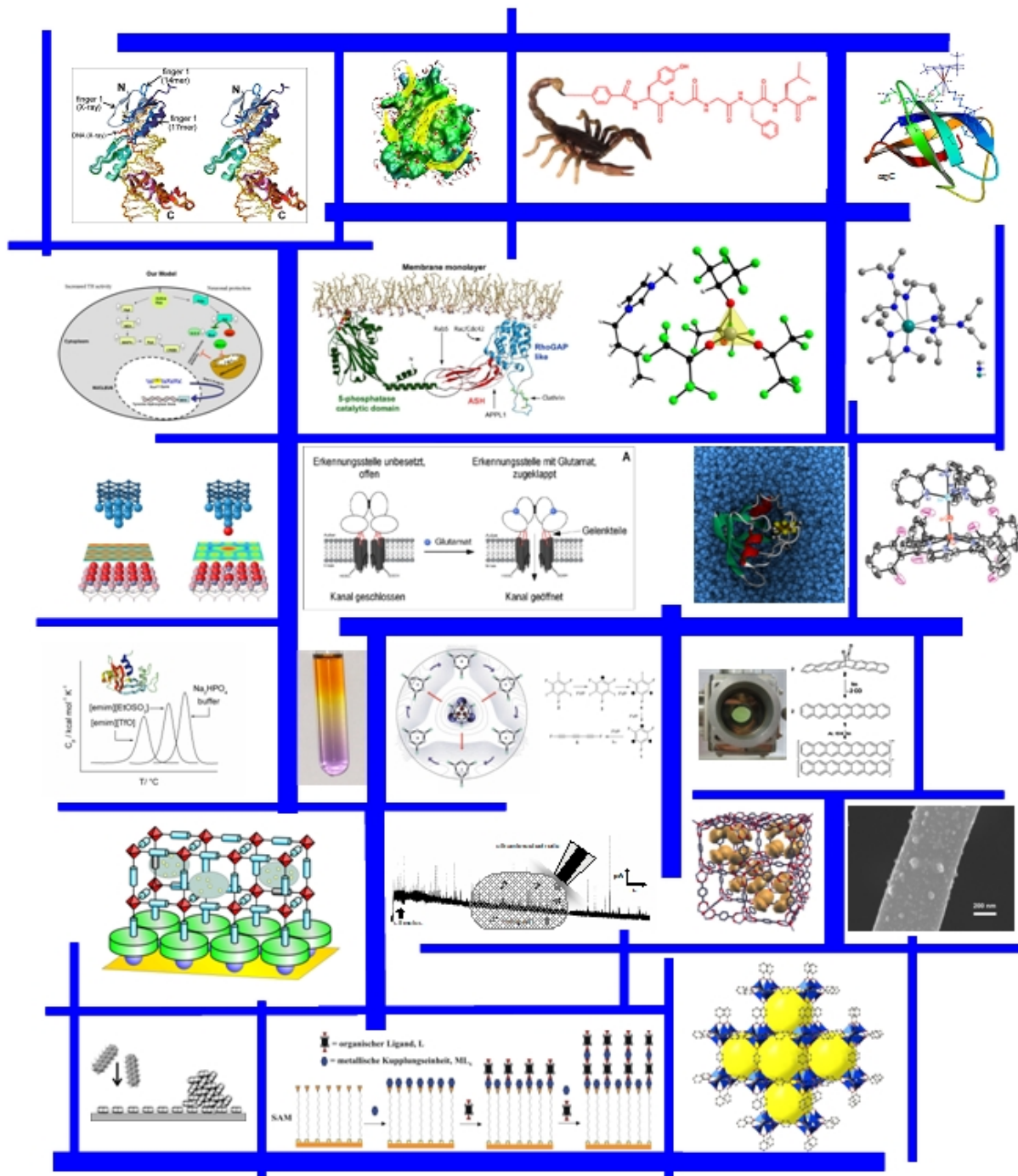


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2007



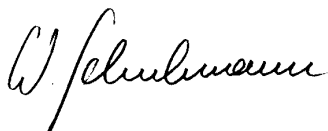
Research 2007

Faculty of Chemistry and Biochemistry

Ruhr-Universität Bochum

Das Jahr 2007 war sicher beherrscht von den vielfältigen Aktivitäten im Rahmen der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder. Die Fakultät für Chemie und Biochemie hat zu dem Erfolg der Ruhr-Universität Bochum beigetragen. Beflügelt von dem hervorragenden Abschneiden beim Rating des Wissenschaftsrates, bei der Einwerbung erheblicher Drittmittel sowie der Konsolidierung der Finanzzuweisungen aus der Grundfinanzierung war die Möglichkeit gegeben, Forschung und Lehre mit hohem Anspruch in Angriff zu nehmen. Der vorliegende Jahresbericht soll daher wieder durch die Zusammenfassung von Forschungshighlights aus den Arbeitsgruppen der Fakultät einen kurzen Eindruck über die Vielfältigkeit der Forschung in der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum vermitteln. Wenn Sie zu den einzelnen Themen weitere Informationen wünschen, können Sie unter den angegebenen Adressen der Homepages der Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (www.ruhr-uni-bochum.de/chemie) vertiefte Einblicke erhalten. Sicher sind die Leiter der Arbeitsgruppen auch jederzeit bereit, telefonisch oder während eines Besuches über ihre Forschungsergebnisse mit Ihnen zu diskutieren.

Bochum, den 01.05.2008

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

(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann; Dekan der Fakultät für Chemie und Biochemie)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte	4
Prof. Dr. Anja Mudring	5
Dr. Ulrich Schatzschneider	6

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials)	7
JP Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	8
Dr. Rochus Schmid	9

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	10
PD Dr. Holger Bettinger	11
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	12

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christof Wöll	13
PD Dr. Gregor Witte	14
Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	15

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

Prof. Dr. Martina Havenith-Newen	16
Prof. Dr. Hermann Weingärtner	17

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. William Sheldrick	18
Dr. Dirk Wolters	19
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)	20
Dr. Michael Bron	21

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	22
Dr. Nikos L. Doltsinis	23
Dr. Bernd Meyer	24
Prof. Dr. Christof Hättig	25
Prof. Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie)	26
Prof. (em.) Dr. Werner Kutzelnigg	27

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	28
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	29

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	30
--	----

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	31
PD Dr. Irmgard Dietzel-Meyer (Elektrochemie neuraler Zellen)	32
JP Dr. Raphael Stoll	33
Prof. Dr. Bernd Hovemann	34
PD Dr. Kai Erdmann	35

Didaktik der Chemie

Prof. Dr. Katrin Sommer	36
-------------------------------	----

Nils Metzler-Nolte

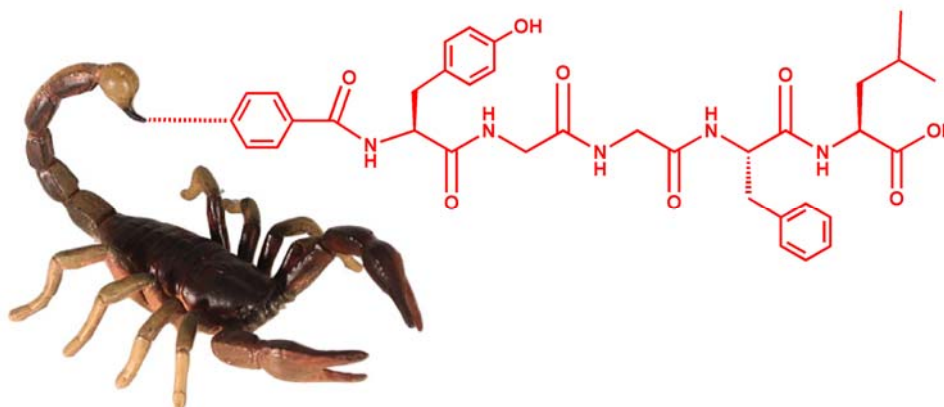
Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

M. C. Kuchta[‡], A. Groß, A. Pinto, N. Metzler-Nolte, *Inorg. Chem.* **46** (2007) 9400 – 9404.
Labelling of the Neuropeptide Enkephalin with Functionalized Tris(pyrazolyl)borate Complexes: Solid Phase Synthesis and Characterization of *p*-[Enk-OH]COC₆H₄TpPtMe₃ and *p*-[Enk-OH]COC₆H₄TpMeRe(CO)₃

Skorpionat-Liganden mit einem neuen Stachel: Die von Trofimenko entwickelten Tris(pyrazolyl)borat-Liganden ("Skorpionate", Tp-Liganden) gehören zu den am besten untersuchten Ligandenfamilien in der anorganischen Chemie. Sie bilden mit praktisch allen Übergangsmetallen stabile Komplexe, die in ihren Eigenschaften gut untersucht sind. Allerdings besitzen die klassischen Skorpionat-Liganden keine weitere Möglichkeit zur Funktionalisierung, z. B. mit Biomolekülen. In dieser Arbeit wurden nun erstmal am Boratom mit einer Carbonsäurefunktion derivatisierte Skorpionatliganden in der Festphasen-Peptidsynthese eingesetzt und mit ihnen Organometall-Re- und Pt-Konjugate des Neuropeptids Enkephalin erhalten. Die neuen Konjugate wurden vollständig spektroskopisch untersucht. Sie erwiesen sich in *in vitro* Zelltests als nicht cytotoxisch und sollten somit als Sonden für biologische Untersuchungen gut geeignet sein.



The scorpion has got a new sting: Together with the ubiquitous cyclopentadienyl (Cp) ligand, Trofimenko's tris(pyrazolyl)borate ligands (scorpionates, Tp-ligands) are among the best explored ligands in inorganic chemistry. They form a host of complexes with all transition metals. The classical scorpionates do not, however, possess any kind of handle that would permit their conjugation to biomolecules such as peptides. In this work we have for the first time used suitable B-substituted scorpionates with a carboxylate function in solid phase peptide synthesis. Organometallic Re and Pt complexes were thus covalently attached to the neuropeptide enkephalin and the conjugates were fully characterized by all spectroscopic means. These conjugates may serve as heavy-metal probes in biological studies as they were not cytotoxic in an *in vitro* cell assay with several different cell lines.

[‡] Matthew C. Kuchta is a postdoctoral fellow of the Alexander-von-Humboldt Foundation.

Anja-Verena Mudring

Anorganische Chemie I – Festkörperchemie und Materialien; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3229028; FAX: ++49-(0)234-3214951
email: Anja.Mudring@rub.de; <http://www.anja.mudring.de>

T. Timofte, S. Pitula, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 10938. Ionic liquids with perfluorinated anions.

In den vergangenen Jahren haben Ionische Flüssigkeiten (IFs) - einer allgemeinen Definition zufolge salzartige Verbindungen mit einem Schmelzpunkt unterhalb von 100 °C - Beachtung als eine Klasse neuartiger Lösungsmittel erfahren. Ihre Anwendung reicht vom Einsatz in der Organischen Synthese über Trennverfahren zur Elektrochemie. IFs mit schwach koordinierenden perfluorierten Alkoxyaluminat-Anionen $\text{Al}(\text{OR}_F)_4^-$, können durch Metathesereaktion von $\text{LiAl}(\text{OR}_F)_4$ und $[\text{bmim}]\text{Cl}$ (bmim = 1-Butyl-3-methylimidazolium) oder $[\text{bmpyr}]\text{Cl}$ (bmpyr = N-Butyl-N-Methylpyrrolidinium) in hohen Ausbeuten erhalten werden. Obwohl die Verbindungen relativ viskos bei Raumtemperatur sind, liegen ihre dynamischen Viskositäten bei 60°C für $[\text{bmim}][\text{Al}(\text{hfip})_4]$ (hfip = Hexafluoroisopropanol) bei 7.85 mm^2/s und für $[\text{bmpyr}][\text{Al}(\text{hfip})_4]$ bei 12.92 mm^2/s . Beide Verbindungen weisen ein extrem hohes elektrochemisches Fenster von über 8V auf. Dies ist das derzeit das größte bei IFs beobachtete! Aus diesem Grund erscheinen die neuen Verbindungen für eine Vielzahl von Anwendungen interessant.

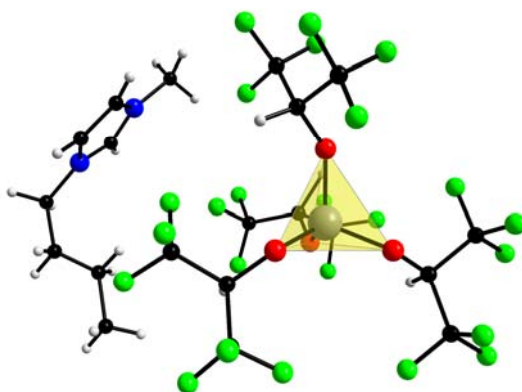


Fig. 1 $[\text{bmim}][\text{Al}(\text{hfip})_4]$: Asymmetric unit of the structure.

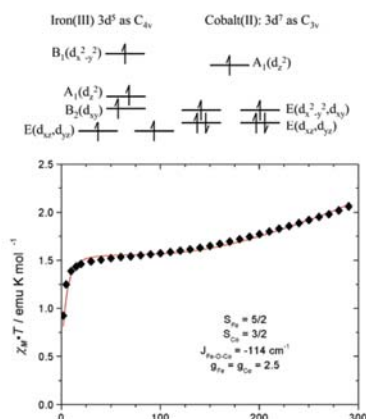
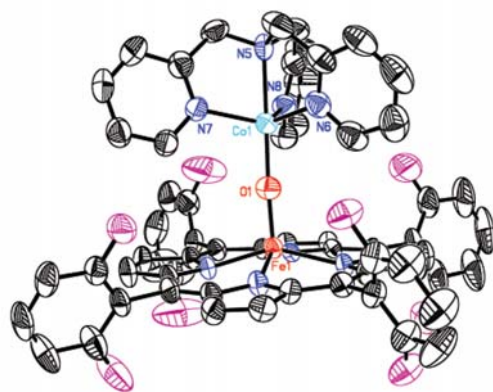
In the recent years ionic liquids (ILs), by a common definition salt-like compounds with a melting point below 100 °C, have become an extremely popular class of “neoteric” solvents. Their applications reach from organic synthesis and catalysis over separation processes to electrochemistry. ILs with the weakly coordinating perfluoroalkoxyaluminate anions, $\text{Al}(\text{OR}_F)_4^-$, are obtained by a metathesis reaction of $\text{LiAl}(\text{OR}_F)_4$ and $[\text{bmim}]\text{Cl}$ (bmim = 1-butyl-3-methylimidazolium) or $[\text{bmpyr}]\text{Cl}$ (bmpyr = N-butyl-N-methylpyrrolidinium) in high yields. Although fairly viscous at room temperatures the dynamic viscosities of the ILs at 60°C were determined to 7.85 mm^2/s for $[\text{bmim}][\text{Al}(\text{hfip})_4]$ (hfip = hexafluoroisopropanol) and 12.92 mm^2/s for $[\text{bmpyr}][\text{Al}(\text{hfip})_4]$. Both compounds have an exceptionally high electrochemical window of about 8V – the largest so-far known! This renders the new compounds useful for various applications.

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>

E.E. Chufán, C.N. Verani, S.C. Puiu, E. Rentschler, U. Schatzschneider, C. Incarvito, A.L. Rheingold, K.D. Karlin, *Inorg. Chem.* **46** (2007) 3017-3026. Generation and Characterization of [(P)M(X)-Co(TMPA)]ⁿ⁺ Assemblies; P = Porphyrinate, M = Fe^{III} and Co^{III}, X = O²⁻, OH⁻, O₂²⁻, and TMPA = Tris(2-pyridylmethyl)amine.

Heterobimetallische Komplexe, in denen eine Häm-Zentrum über eine μ -oxo- oder μ -peroxo-Brücke mit anderen Übergangsmetallen verknüpft sind, spielen eine wichtige Rolle in der Untersuchung der biologischen Sauerstoffaktivierung als Modellverbindungen der Cytochrom c Oxidase. Für ein detailliertes Verständnis der magnetischen Wechselwirkung zwischen den beiden Metallzentren sind neben den nativen Kupferkomplexen auch solche mit anderen späten Übergangsmetallen von Interesse. Unter sorgfältiger Kontrolle des pH-Wertes konnte dabei in einem selbstorganisierten Ansatz der Komplex [(P)Fe-(μ -O)-Co(TMPA)]⁺ erhalten werden, dessen Röntgenstruktur unten links gezeigt ist. Eine detaillierte Untersuchung der magnetischen Eigenschaften mittels SQUID ergab eine stark antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen den beiden high-spin Fe(III)- und Co(II)-Zentren mit $J_{\text{Fe-O-Co}} = -114 \text{ cm}^{-1}$. Der dominante Superaustausch-Wechselwirkungspfad ist dabei vom σ -Typ, zwischen dem $A_1(d_{z^2})$ -Orbital des Eisen, das senkrecht auf der Porphyrin-Ebene steht, und dem $A_1(d_{z^2})$ -Orbital des Cobalt, welches ebenfalls entlang der Verbindungsachse zwischen beiden Metallen zeigt.



Heterobimetallic complexes with a heme center bridged by a μ -oxo or μ -peroxo group to other transition metals play an important role in the study of biological dioxygen activation as model compounds for the enzyme cytochrom c oxidase. To arrive at a detailed understanding of the magnetic exchange interaction between the two metals mediated by the bridge, other metal centers in addition to the native copper have to be studied. Under precisely controlled pH conditions, it was possible to obtain [(P)Fe-(μ -O)-Co(TMPA)]⁺ by self-assembly of the two subunits with the x-ray structure shown on the upper left. A SQUID study of the magnetism of this compounds revealed a strong antiferromagnetic exchange interaction between the two high-spin Fe(III) and Co(II) centers with $J_{\text{Fe-O-Co}} = -114 \text{ cm}^{-1}$. The dominant superexchange pathway was found to be σ in nature, involving the $A_1(d_{z^2})$ of the iron, oriented perpendicular to the porphyrin plane and the corresponding $A_1(d_{z^2})$ orbital of the cobalt, which also points along the axis connecting the two metal centers.

Roland A. Fischer

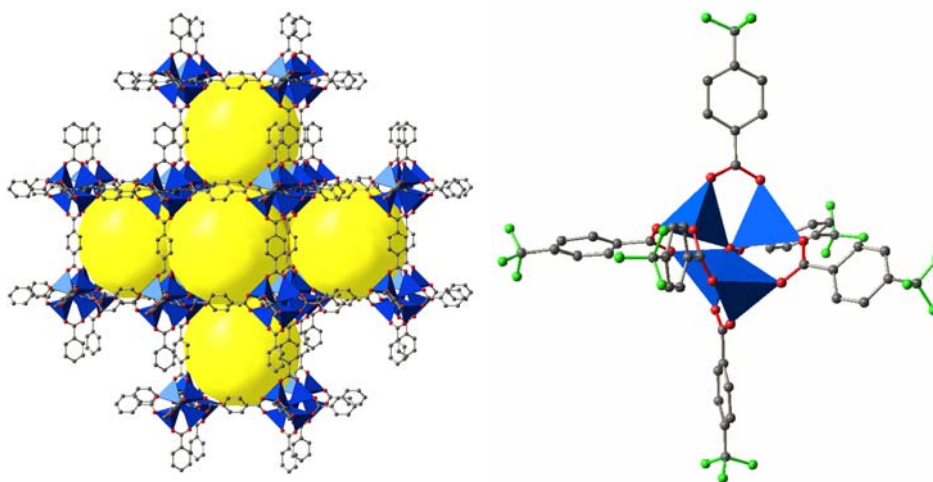
Anorganische Chemie II – Organometallics & Materials;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224174; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: roland.fischer.@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac2/>

S. Hermes, T. Witte, T. Hikov, D. Zacher, S. Bahn Müller, G. Langstein, K. Huber, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 5324-5325. Trapping Metal-Organic Framework Nanocrystals: An in-situ Time Resolved Light Scattering Study on the Crystal Growth of MOF-5 in Solution.

Poröse metallorganische Gerüstverbindungen (metal organic frameworks, MOFs) sind Hybridmaterialien mit äußerst hohen inneren Oberflächen von bis zu $4500 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ und entsprechend hohen Porenvolumina. Dies bietet faszinierende Perspektiven für zahlreiche Anwendungen, z.B. als Wasserstoffspeicher, Gassensoren oder für die Gastrennung. Die Verwendung eines geeigneten, fluorierten Abfang-Liganden (z.B. *p*-Trifluoromethylbenzencarboxylate, pfmbc) machte es möglich, kontrolliert Nanopartikel von $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{bdc})_3]$ (MOF-5; bdc = 1,4-Benzendicarboxylat) im Größenbereich 100-300 nm in Lösung kolloidal zu stabilisieren, was für Anwendungen der MOFs wichtig ist. Die Stopper-Liganden binden an die oberflächenexponierten Metallionen (Modell, siehe Figur *rechts*) analog zur Referenzsubstanz $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{pfmbc})_6]$ (Figur, *links*) und verhindern so das weitere Wachstum. Mittels zeitaufgelöster statischer Lichtstreuung wurde gezeigt, dass die nano MOFs monodispers in einer kubischer Form vorliegen. Das Verfahren ist auf andere MOFs übertragbar.



Porous Metal Organic Frameworks (MOFs) are inorganic/organic hybrid materials with extraordinary high surfaces of up to $4500 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ and correspondingly high pore volumes which open up fascinating perspectives for numerous applications including hydrogen-storage materials, gas sensors and gas separation devices. The use of special trapping ligands (e. g. *p*-trifluoromethylbenzencarboxylate, pfmbc) allows the controlled blocking of the growth in the regime of 100-300 nm to yielded stable colloids of nano $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{bdc})_3]$ (MOF-5, bdc = 1,4, benzenedicarboxylate). The trapping reagents coordinate to the surface exposed metal ions (model, see Figure *right*) in analogy to the reference compound $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{pfmbc})_6]$ (Figure, *left*) and the MOF growth stops. The process was monitored by in situ time resolved light scattering and it was shown, that MOFs grow in the shape of perfect cubes from the very beginning, forming a monodisperse sample.

Anjana Devi

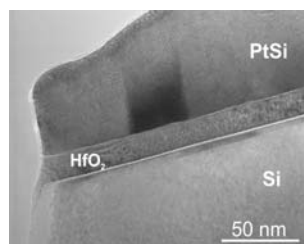
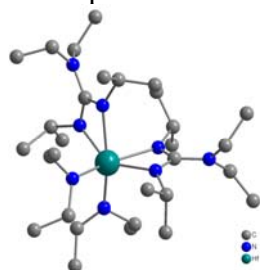
AG Chemie Anorganischer Materialien; Lehrstuhl für Anorganische Chemie II,
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: anjana.devi@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2>

R. Thomas, E. Rije, P. Ehrhart, A. Milanov, R. Bhakta, A. Baunemann, A. Devi, R. A. Fischer and R. Waser, Thin films of HfO₂ for high-*k* gate oxide applications from engineered alkoxide and amide based MOCVD precursors. *J. Electrochem. Soc.* **2007**, 154, 3, G77-84. (Selected for Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, February 2007 issue <http://www.vjnano.org>)

Die Verkleinerung von Halbleiterdimensionen hat zur Erforschung neuer high-*k* dielektrischer Gate-Oxide geführt, die in der komplementären Metalloxid-Halbleiter-Technologie (CMOS) verwendet werden. Dies soll die dielektrische Standard SiO₂ Dünnschicht ersetzen, um auftretende Leckströme zu bekämpfen. Gruppe IV Oxide wie HfO₂ und ZrO₂ sind viel versprechende Materialien für eine neue Generation von Gate-Oxiden wegen ihrer hohen Leitfähigkeit und der verbesserten Stabilität bei Kontakt mit Silizium. Metallorganische Chemische Dampfabcheidung (MOCVD) und Atomic Layer Deposition (ALD) sind wünschenswerte Abscheideprozesse für das Aufwachsen qualitativ hochwertiger Schichten. Die Chemie dieser Prozesse ist das Hauptthema, das das Maßschneidern von Precursoren erfordert. Die Herangehensweise beim Precursor-Tuning in Bezug auf Flüchtigkeit, Stabilität und Reaktivität basiert auf die Insertion von koordinierenden Liganden wie Guanidaten in die Ausgangs-Hf- und Zr-Alkylamide. Dies führte zu neuartigen monomerischen Hf- und Zr-Amidoguanidinat-Komplexen; [M(NR₂)₂(guanidinat)₂], R= Et, EtMe. Diese neuartigen Precursor sind sehr viel versprechend für MOCVD und ALD und sind in einem MOCVD-Industriereaktor getestet worden, wobei qualitativ hochwertige HfO₂ und ZrO₂ Oxidschichten erhalten wurden, die hervorragende elektrische Eigenschaften aufweisen. Schließlich wurden die Schichten auf die praktische Anwendbarkeit untersucht.



The scaling down of semiconductor device dimensions has led to the exploration of new high-*k* dielectric gate oxides that are used in complementary metal oxide semiconductor (CMOS) technology. This is in order to replace the standard SiO₂ gate dielectric to combat increasing leakage currents. Group-IV oxides such as HfO₂ and ZrO₂ have been identified as promising materials for next generation gate oxides because of their high permittivity and their improved stability when in contact with silicon. Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) and Atomic Layer Deposition (ALD) are desirable deposition processes for growing high quality films. The chemical nature of these processes is a key issue which requires tailoring precursors. The approach adopted for precursor tuning in terms of volatility, stability and reactivity is based on insertion of coordinating ligands such as guanidates into parent Hf and Zr alkyl amides. This has resulted in novel monomeric Hf and Zr amide-guanidinate complexes; [M(NR₂)₂(guanidinate)₂], R= Et, EtMe. These novel precursors are promising for MOCVD and ALD and have been tested in an industrial tool MOCVD reactor which resulted in high quality HfO₂ and ZrO₂ oxide thin films showing promising electrical properties. Finally the films were investigated for actual device applications.

Rochus Schmid

Anorganische Chemie II, Organometallics and Materials

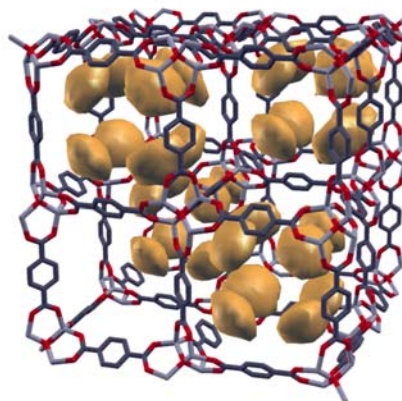
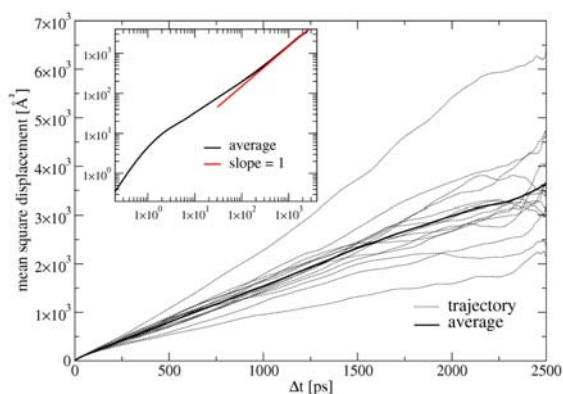
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel. ++49 234 32 24166 Fax. ++49 234 32 14174

email: rochus.schmid@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.rub.de/aci2/schmid/>

S. Amirjalayer, M. Tafipolsky, R. Schmid, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 463-466. Molecular Dynamics Simulation of Benzene Diffusion in MOF-5: Importance of Lattice Dynamics.

Mit einem, auf der Basis von Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen parametrisierten, molekülmechanischen Kraftfeld für das poröse Hybridmaterial MOF-5 (Bild rechts) konnte die Diffusion von Benzol-Molekülen in den Poren unter Berücksichtigung der Netzwerk-Dynamik simuliert werden. Der aus der Zeitabhängigkeit der mittleren quadratischen Verschiebung (Bild links) berechnete Selbst-Diffusionskoeffizient von $2.49 \pm 0.29 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ stimmt hervorragend mit dem erst kürzlich mittels PFG-NMR bestimmten Wert von $\sim 2.0 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ [Stallmach et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, 45, 2123] überein. Dieser Wert ist fast identisch zu flüssigem Benzol ($2.2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$) und zeigt die hohe Beweglichkeit der Gastmoleküle im Netzwerk. Durch die Auswertung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Gastmoleküle (Bild rechts) war es möglich den Diffusionsmechanismus sowie die bevorzugten Bindungsstellen auf molekularem Niveau zu analysieren und zu verstehen.



With a molecular-mechanics forcefield, parametrized on the basis of density functional theory calculations for the porous hybrid material MOF-5 (right figure), the diffusion of benzene within the pores could be simulated under consideration of the network dynamics. From the time dependence of the mean square displacements (left figure) a self-diffusion coefficient of $2.49 \pm 0.29 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ was derived, which corresponds very well with the value of $\sim 2.0 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, determined recently by PFG-NMR [Stallmach et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, 45, 2123]. This is very similar to the case of neat benzene ($2.2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$), which demonstrates the high mobility of the guest molecules within the network. By analyzing the spatial probability distribution of the guest molecules (right figure) it was possible to reveal the diffusion mechanism and the preferred binding sites on a molecular level.

Wolfram Sander

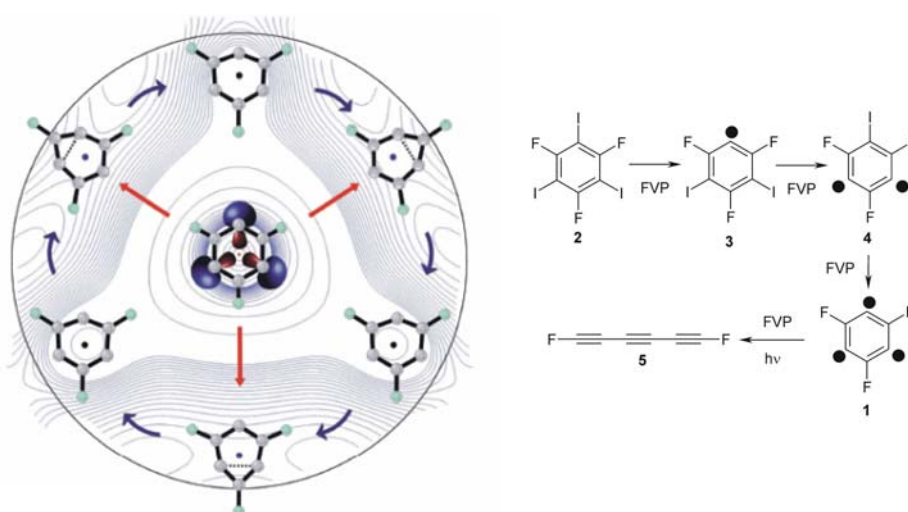
Lehrstuhl für Organische Chemie 2; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: wolfram.sander@rub.de; <http://www.rub.de/oc2>

S. Venkataramani, M. Winkler, W. Sander, *Angew. Chem., Int. Ed.* (2007) **46**, 4888. *Angew. Chem.* (2007), **119**, 4974. Trifluoro-1,3,5-tridehydrobenzene.

Organische Triradikale sind potentielle Bausteine für molekulare Magnete. Obwohl schon mehrere organische Triradikale erfolgreich synthetisiert werden konnten, haben viele prototypische Triradikale erst in jüngster Zeit wegen ihrer grundlegenden Bedeutung eine angemessene Aufmerksamkeit erlangt. Für den Versuch der Synthese und Charakterisierung eines solchen prototypischen Triradikals, 1,3,5-Tridehydrobenzol, wurde dessen perfluoriertes Derivat **1** ausgewählt. Mit Flash-Vakuum-Pyrolyse (FVP) und unter Verwendung der Matrixisolationstechnik wurde das Trifluor-1,3,5-tridehydrobenzol **1** in einer Argonmatrix bei 4 K aus seiner triiodierten Vorstufe **2** erzeugt und isoliert. Das Triradikal wurde aufgrund seiner Photochemie und IR-Spektren durch Vergleich mit unter Verwendung der Dichtefunktionaltheorie (DFT) berechneten Infrarotsignalen charakterisiert. Durch diese Rechnungen konnte geklärt werden, dass das Triradikal aufgrund einer Jahn-Teller-Verzerrung in einem 2A_1 Grundzustand mit einer C_{2v} – Symmetrie vorliegt, während ein energetisch in der Nähe liegender 2B_2 Zustand als Übergangszustand zwischen zwei äquivalenten 1A_1 – Strukturen gefunden wurde.



Organic triradicals are potential building blocks for making molecular magnets. Although several organic triradicals have already been synthesized successfully, many prototypical triradicals are given proper attention only in recent times because of their fundamental importance. In an attempt to synthesize and characterize a structurally symmetrical triradical, namely 1,3,5-tridehydrobenzene, its perfluoro derivative **1** was preferred. Under Flash Vacuum Pyrolysis (FVP) conditions using matrix isolation technique, the trifluoro-1,3,5-tridehydrobenzene **1** was isolated in an argon matrix at 4 K from its triiodo precursor **2**. The target triradical was characterized by its photochemistry and IR spectra in comparison with the calculated infrared signals using Density Functional Theory (DFT). Based on the computations it is clear that the triradical exists in its 2A_1 ground state with a C_{2v} structure owing to Jahn-Teller distortion. Whereas a close-lying 2B_2 state structure is found to be a transition state inter-connecting two equivalent 1A_1 structures.

Holger F. Bettinger

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

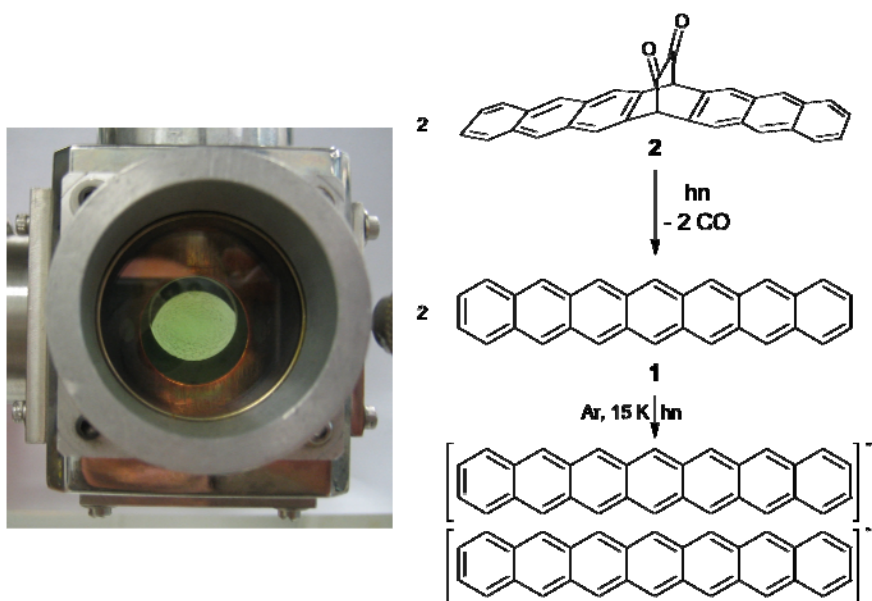
Tel.: ++49-(0)234-3224259; FAX: ++49-(0)234-3214353

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

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

H. F. Bettinger, R. Mondal, D. C. Neckers, *Chem. Commun.* (2007) 2509-2511. Stable Photo-induced Charge Separation in Heptacene.

Die Acene, Kohlenwasserstoffe mit linearer Annelierung von Benzolringen, sind derzeit aufgrund ihrer elektronischen Eigenschaften von herausragender Bedeutung für die Entwicklung einer molekularen Elektronik. Die Existenz des bislang größten Acens, Heptacen **1**, konnte erst kürzlich zweifelsfrei geklärt werden. Der grüne Kohlenwasserstoff **1** lässt sich photochemisch aus dem 1,2-Diketon **2** in einer Argonmatrix erzeugen und mittels IR-, UV/vis und NIR-Spektroskopie charakterisieren. Es konnte gezeigt werden, dass Heptacene einer Ladungstrennung unter Bildung des Radikalkations und –anions bei UV-Bestrahlung unterliegt. Die geladenen Heptacenradikale sind unter diesen Bedingungen stabil, aber der Ladungstransfer kann durch Bestrahlung mit sichtbarem Licht umgekehrt werden. Die Radikalanionen (Polaronen) des Heptacens zeigen sehr energiearme elektronische Übergänge bei 2134 nm bzw. 0,6 eV.



The acenes, hydrocarbons with linearly annelated benzene rings, are currently of outstanding importance in the development of a molecular electronics due to their electronic properties. The existence of the largest known acene, heptacene **1**, could only be demonstrated recently. The green hydrocarbon **1** can be generated photochemically from the 1,2-diketone **2** in an argon matrix and can be characterized by IR, UV/vis, and NIR spectroscopy. It could be shown that matrix isolated heptacene undergoes charge separation under formation of the radical cation and radical anion upon UV photolysis. The charged heptacene radicals are stable under these conditions, but the electron transfer can be reversed by irradiation with visible light. The radical ions (polarons) of heptacene have low-energy electronic transitions at 2134 nm or 0.6 eV.

Gerald Dyker

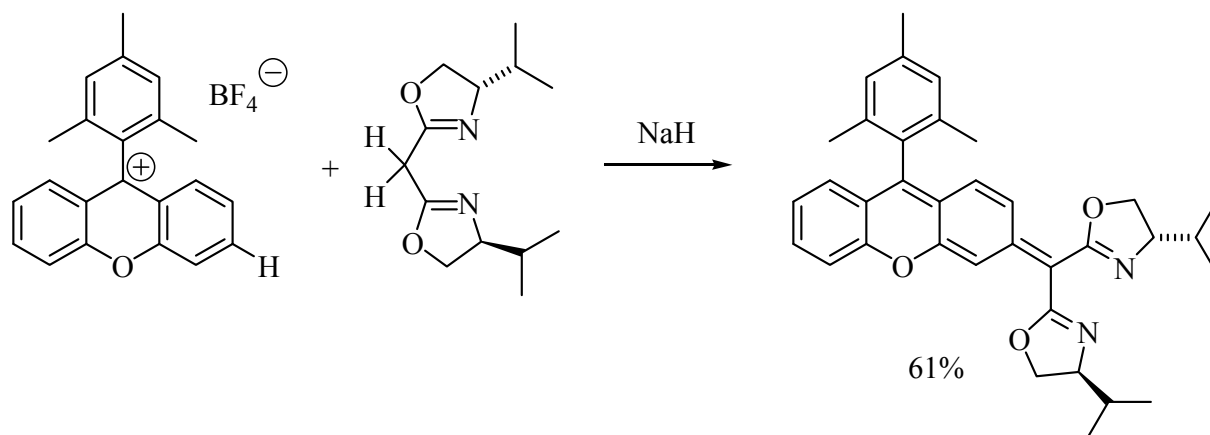
Org. Chem. - Organische Synthese und Katalyse; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

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

M. Hagel, J. Liu, O. Muth, H. J. Estevez Rivera, E. Schwake, L. Sripanom, G. Henkel, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2007**, 3573-3582. *Para*-Quinoid Compounds by Nucleophilic Aromatic Substitution with Hydride as Leaving Group

Triarylmethyl-Salze, deren kationisches Zentrum sterisch abgeschirmt ist, reagieren mit C- und mit N-Nukleophilen unter nukleophiler aromatischer Substitution. Dass dabei Hydrid als Austrittsgruppe fungiert ist als Besonderheit einzustufen und begründet die Verwandtschaft mit der Tschitschibabin-Reaktion. Keineswegs überraschend ist die intensive Farbigkeit der Endprodukte an Betracht der *para*-chinoiden und zudem Donator-Akzeptor-substituierten Struktur. Wir planen, diese als redoxaktive Liganden in der Übergangsmetall-Katalyse einzusetzen.



Triarylmethyl tetrafluoroborates with a sterically shielded cationic center react with selected C- and N-nucleophiles under nucleophilic aromatic substitution to give dipolar *para*-quinoid final products. The mechanistic rationale includes a hydride leaving group in analogy to the Tschitschibabin reaction.

Christof Wöll

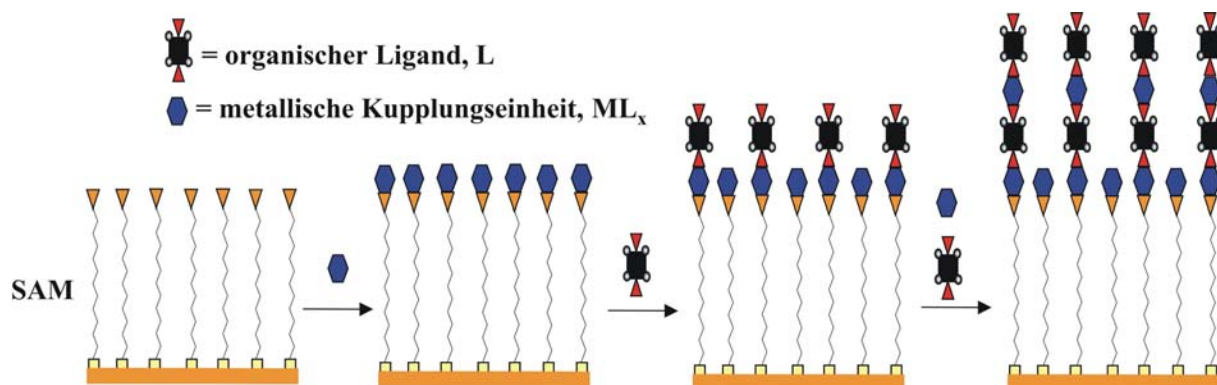
Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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, H. Wang, S. Kowarik, F. Schreiber, M. Paulus, M. Tolan, C. Sternemann, F. Evers, D. Zacher, R. A. Fischer, C. Wöll, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 49, 3573-3582. Step-Step Route for the Synthesis of Metal-Organic Frameworks.

Metallorganische Koordinationspolymere (MOFs) sind eine Substanzklasse, die aufgrund ihres hohen Adsorptionsvermögens für kleine Moleküle vielfältige Anwendungsmöglichkeiten u.a. im Bereich der Katalyse und der Speicherung von Gasen (z.B. Wasserstofftanks in PKWs) haben. Im Rahmen einer Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. Fischer (LS Anorganische Chemie II) wurde eine neue Synthesemethode entwickelt, mit der strukturell hochwertige MOFs auf Oberflächen aufgewachsen werden können. Statt die einzelnen Komponenten wie im konventionellen Verfahren zu mischen, wurde eine funktionalisierte organische Oberfläche (Goldsubstrat mit säure-terminierter selbstassemblierter Monolage, SAM) abwechselnd in Lösungen der anorganischen Kupplungseinheit (ML_x , $M=Zn(II)$, $Cu(II)$) und eines organischen Liganden (Benzoltricarbonsäure, BTC) getaucht. Auf diese Weise wurden in einem Lage-für-Lage-Verfahren hochgeordnete MOFs mit Dicken von bis zu 100 Schichten erzeugt. Dieses Verfahren eröffnet die Möglichkeit zur Herstellung neuartiger, auf konventionellem Weg nicht zugänglicher MOFs.



Metal organic frameworks (MOFs) are an interesting class of compounds. Because of their high porosity they offer promising applications in catalysis and with regard to the storage of gases (e.g. hydrogen tanks in cars). In cooperation with the group of Prof. Fischer (Chair for Inorganic Chemistry II) a novel synthetic method has been developed which enables the growth of highly ordered MOFs on a surface. Instead of mixing the components like in conventional MOF synthesis a functionalized organic surface (gold substrate with an acid terminated self-assembled monolayer, SAM) has been alternately immersed in solutions of the inorganic metal precursor unit (ML_x , $M=Zn(II)$, $Cu(II)$) and of an organic ligand (benzene tricarboxylic acid, BTC). In this way, highly ordered MOFs with a thickness up to 100 layers have been fabricated in a layer-by-layer method. This method offers the possibility to produce new MOFs which are not accessible to the conventional synthesis method.

Gregor Witte

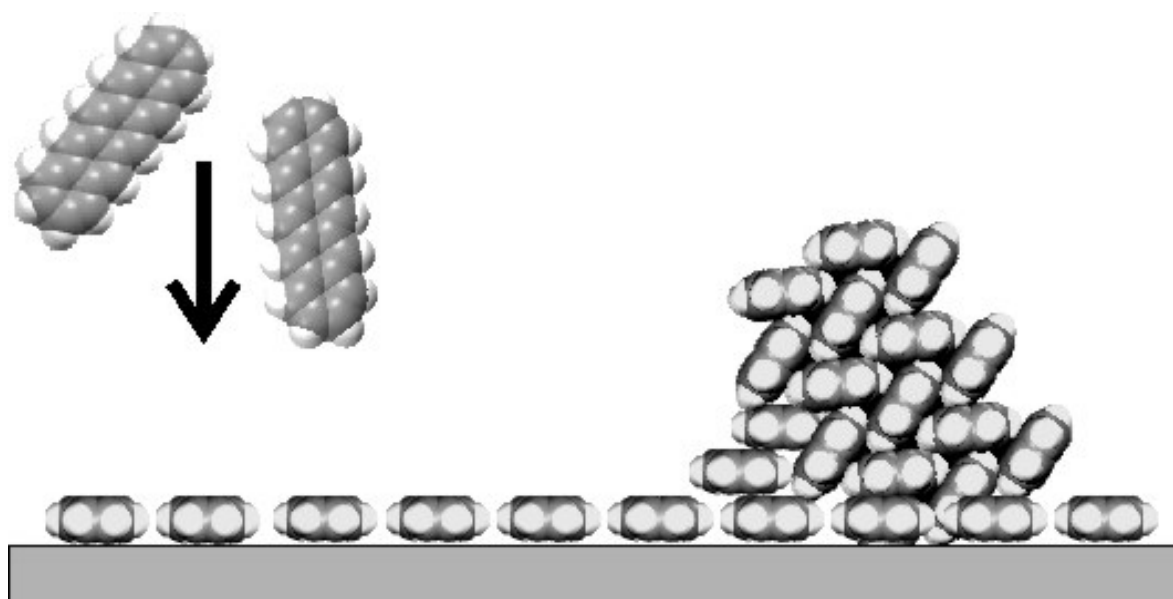
Physikalische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

D. Käfer and G. Witte, *Chem. Phys. Lett.* 2007, **442**, 376. Evolution of Pentacene Films on Ag(111): growth beyond the first monolayer.

Der Einsatz organischer Halbleiter zur Herstellung einfacher elektronischer Bauteile hat in den letzten Jahren ein großes Interesse gefunden. Von zentraler Bedeutung für solche Bauteile ist ein detailliertes Verständnis der Mikrostruktur von metallorganischen Grenzflächen, wie z.B. an den Elektroden. Als Modellsystem hierfür wurde das Wachstum und die Struktur von Pentazenfilmen auf einer (111)-orientierten Silbereinkristalloberfläche durch Kombination verschiedener spektroskopischer und Mikroskopietechniken untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass das anfängliche Wachstum zur Ausbildung einer chemisorbierten ersten Monolage führt, während bei weiterer Deposition einzelne, unzusammenhängende Kristallite gebildet werden, die eine zuvor von Siegrist et al. identifizierte Volumenphase aufweisen. Eine sehr empfindliche Charakterisierung ermöglichte die genaue Analyse der Röntgenabsorptionsspektren (NEXAFS), die je nach chemischer Ankopplung charakteristische π^* -Signaturen aufweisen und somit eine getrennte Bestimmung der molekularen Orientierung in der 1. und weiteren Lagen erlaubt.



The formation and structure of pentacene films upon molecular beam deposition at room temperature onto a Ag(111) surface have been studied by means of SEM, XRD, TDS and NEXAFS. It is shown that multilayer films actually consist of separate crystalline islands revealing a bulk structure reported before by Siegrist *et al.*. Distinctly different π^* -resonances were observed in the C1s NEXAFS spectra of pentacene for the first monolayer and the crystalline films reflecting differences in the electronic coupling and the molecular orientation. Moreover, such characteristic π^* -signatures were used to monitor *in situ* the film evolution upon deposition indicating an immediate formation of crystalline islands on top of a chemisorbed wetting layer

Christian Herrmann

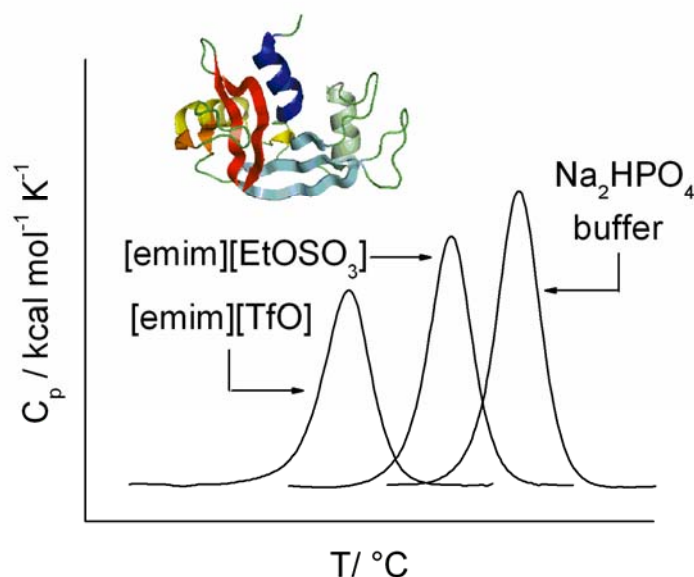
Physikalische Chemie 1; AG Protein-Interaktionen; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

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

D. Constantinescu, H. Weingärtner, C. Herrmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 8887-8889; *Angew. Chem.* **119** (2007) 9044-9046. Protein Denaturation by Ionic Liquids and the Hofmeister Series: A Case Study of Aqueous Solutions of Ribonuclease A

Angehts der zunehmenden Bedeutung ionischer Flüssigkeiten ist es wünschenswert, die Auswirkungen der Ionen auf Enzymeigenschaften, wie Stabilität, Aktivität etc. systematisch zu charakterisieren. Durch Untersuchung der thermischen Denaturierung des prototypischen Enzyms Ribonuclease A mit Hilfe der Differential Scanning Calorimetry wurde die Auswirkung von Kationen und Anionen ionischer Flüssigkeiten auf die Stabilität von Proteinen in wässrigen Lösungen untersucht. Die salzinduzierten Verschiebungen der Übergangstemperatur der Denaturierung wurden benutzt, um die Kationen und Anionen ionischer Flüssigkeiten in die Hofmeisterreihe einzuordnen. Eine schwache Hydratation und eine zunehmende Hydrophobizität des Anions destabilisieren offensichtlich den nativen Zustand des Proteins. Das weit verbreitete Bild kosmotroper und chaotroper Effekte erweist sich als zu einfach. Insgesamt zeigt sich, dass eine Variation des Anions größere Auswirkungen auf die Proteinstabilität als eine Variation des Kations haben kann.



In view of the growing importance of ionic liquids in laboratory and industry, it is desirable to systematize the ion effects on enzyme properties such as stability, activity etc. The effect of cations and anions of ionic liquids on the stability of proteins in aqueous solutions is studied by observing the thermal denaturation transition of the prototypical enzyme ribonuclease A by differential scanning calorimetry. The salt-induced shifts of the midpoint temperature of the transition are used to rank the cations and anions of ionic liquids in the Hofmeister series. Weak hydration as well as an increase in hydrophobicity of the anion has a destabilizing effect on the native state of the protein. The widely adopted picture of kosmotropy and chaotropy is too simplistic. In total, anion variations may have larger consequences on protein stability than cations variations have, as often also observed for enzyme activity.

Martina Havenith

Phys. Chem. II - Laserspektroskopie und Biophotonik

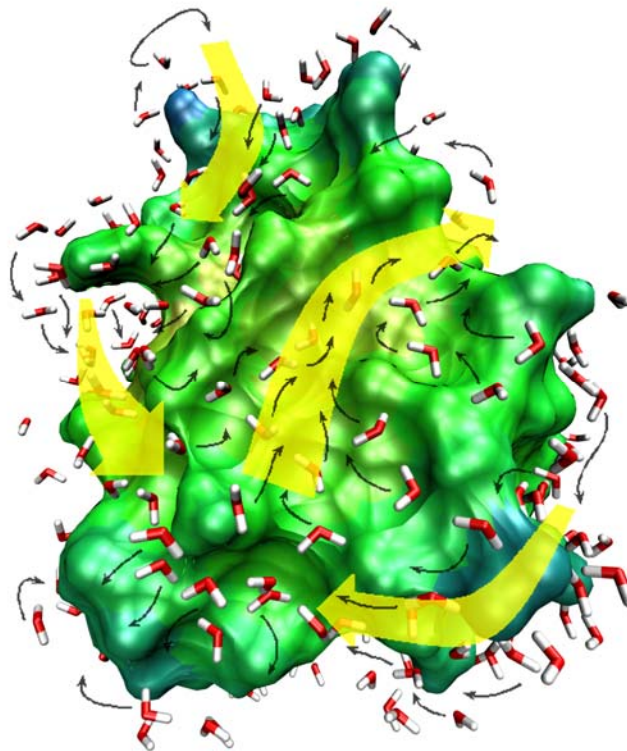
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: Martina.Havenith@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/pc2>

S. Ebbinghaus, S.J. Kim, M. Heyden, X. Yu, U. Heugen, M. Gruebele, D.M. Leitner, and M. Havenith, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **104** (2007) 20749-20752. An extended dynamical hydration shell around proteins

Der Fokus bei Untersuchungen zur Proteinfaltung lag bisher auf einer strukturellen Betrachtung des Gerüsts und seiner Seitenketten. Jedoch wurde der Einfluss des Wassers außer Acht gelassen. Man vermutet allerdings, dass die Kopplung zwischen der Proteindynamik und der Hydratationsdynamik eine wichtige Rolle bei der Proteinfaltung spielt. Wir haben eine neue Technik, THz Spektroskopie, benutzt, um diese Kopplung genauer zu untersuchen. Dabei zeigt sich, dass das Protein λ_{6-85}^* die Bewegung von mehr als 1000 H₂O Molekülen in seiner Umgebung beeinflusst. Die experimentellen Daten zeigen eine Veränderung der kollektiven Wassernetzwerkbewegung von mehr als 20 Å. Dies geht weit über das hinaus, was man bisher mit statischen Meßmethoden, wie z.B. Streumethoden beobachtet hat.



The focus in protein folding has been very much on the protein structure. Yet hydration water makes comparable contributions to the structure and energy of proteins. The coupling between fast hydration dynamics and protein dynamics is considered to play an important role in protein folding. We have used a new technique –THz spectroscopy to investigate the coupling between the protein and the water network motions on the sub-picosecond timescale. The five helix bundle protein λ_{6-85}^* is shown to influence the movements of more than 1000 H₂O molecules. The experimental data suggest an influence on the correlated water network motion beyond 20 Å, greater than the pure structural correlation length usually observed.

Hermann Weingärtner

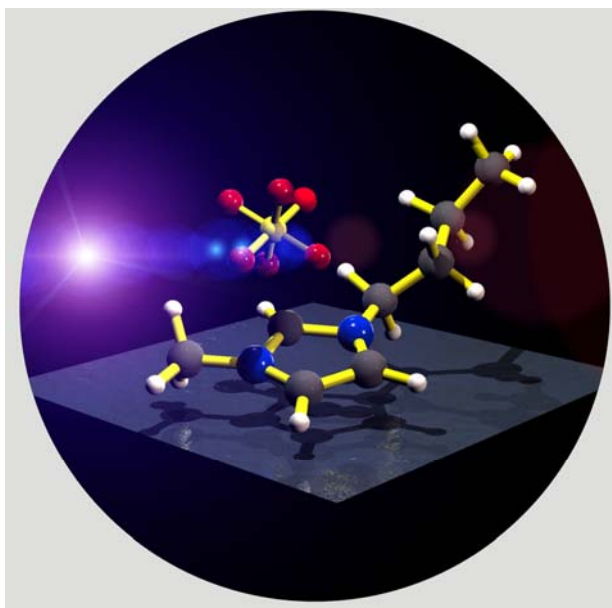
Physikalische Chemie II - Physikalische Chemie der Flüssigkeiten, Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

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

email: hermann.weingaertner@rub.de

H. Weingärtner, P. Sasisanker, C. Daguenet, P. J. Dyson, I. Krossing, J. M. Slattery, T. Schubert, *J. Phys. Chem. B.*, **111** (2007) 4775-4780. The Dielectric Response of Room-Temperature Ionic Liquids: Effect of cation Variation.

Ionische Flüssigkeiten sind bei Raumtemperatur flüssige organische Salze, die aufgrund ihrer besonderen Material- und Lösungsmitelegenschaften als Reaktionsmedien für innovative Verfahren in Labor und Technik von zunehmendem Interesse sind. In Zusammenarbeit mit Gruppen an der Universität Freiburg und an der Eidgenössischen Technischen Hochschule Lausanne wurde eine Reihe von Ionischen Flüssigkeiten mit unterschiedlichen Kationen mit hoher Reinheit dargestellt und mit Hilfe der dielektrischen Spektroskopie die molekularen Bewegungen der Ionen auf der Zeitskala von Nanosekunden bis Pikosekunden untersucht. Die beobachtete molekulare Dynamik ist breit verteilt und lässt auf mikroheterogene mesoskopische Strukturen schließen.



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 synthesized a series of Ionic liquids with different cations of high purity. Measurements of dielectric spectra of these liquids enabled the characterization of molecular motions of the ions on the nanosecond-to-picosecond time scale. The observed molecular dynamics is widely distributed in time and yields evidence for the presence of microheterogeneous mesoscopic structures.

William. S. Sheldrick

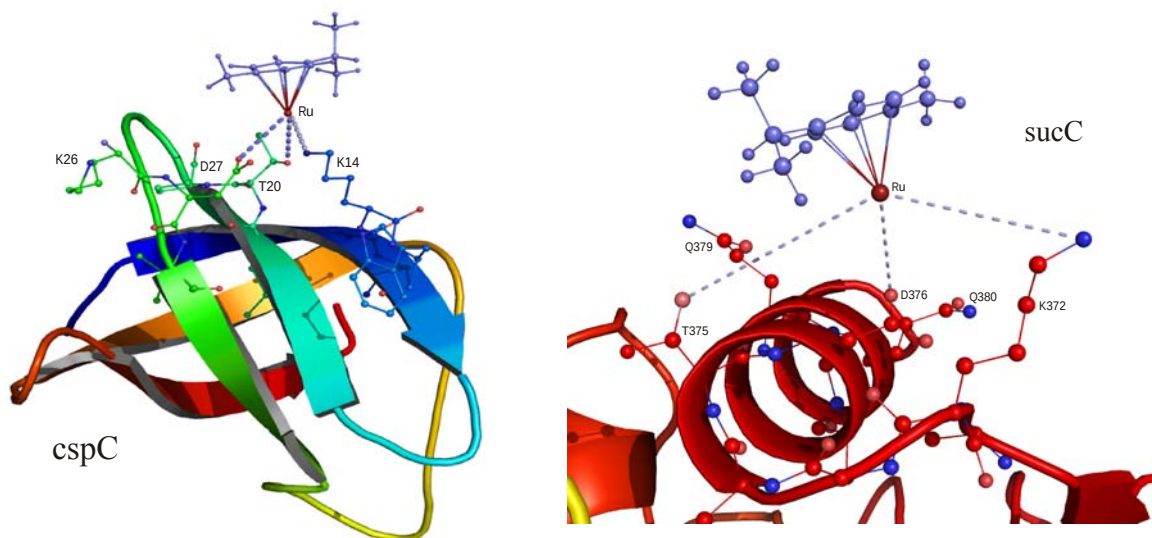
Lehrstuhl für Analytische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

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

email: william.sheldrick@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/>

J. Will, A. Kyas, W. S. Sheldrick, D. Wolters, *J. Biol. Inorg. Chem.* **12** (2007) 883 - 894.
Identification of (η^6 -arene)ruthenium(II) protein binding sites in *E. coli* cells by combined multidimensional liquid chromatography and ESI tandem mass spectrometry: specific binding of [η^6 -p-cymene)RuCl₂(DMSO)] to stress-regulated proteins and to helicases.

Mit Hilfe der gekoppelten multidimensionalen Flüssigchromatographie und Electrospray-ionisation-Tandemmassenspektrometrie konnten erstmals Metall-Proteinkomplexe in einem lebenden Zellsystem analysiert werden. Der systematische Vergleich der MS/MS-Spektren von tryptischen rutheniumhaltigen Peptiden mit theoretischen Proteinspektren aus der *E. coli* Datenbank ermöglichte die Identifizierung der Bindungsstellen von fünf Proteintargets des cytotoxischen Metallodrugs [(p-Cymol)RuCl₂(DMSO)]. Eine der Targets ist das abundante cold-shock Protein cspC, welches die Expression von Genen reguliert, die für die Produktion von Stressproteinen verantwortlich sind. Zu dieser Klasse gehören drei weitere Zielproteine (ppiD, osmY, sucC). Die damage-inducible DNA-Helicase dinG wurde außerdem als Target identifiziert.



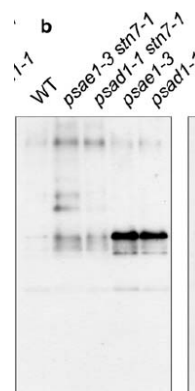
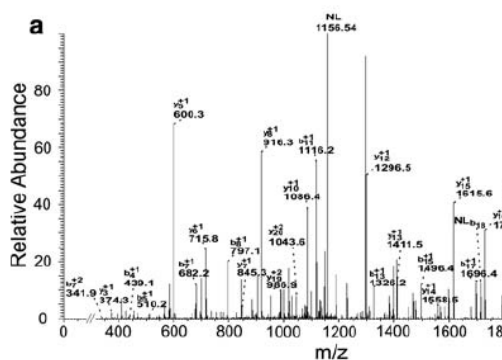
Combined multidimensional liquid chromatography and electrospray ionisation tandem mass spectrometry was employed to analyse metal-protein complexes in a living whole-cell system for the first time. Matching of the MS/MS spectra of tryptic ruthenated peptides to theoretical spectra of proteins in the *E. coli* data base enabled the identification of the metal binding sites for 5 protein targets of the anticancer agent [(p-cymene)RuCl₂(DMSO)]. One of these is the cold-shock protein cspC, which regulates the expression of genes encoding stress-response proteins and 3 other targets (ppiD, osmY, sucC) also belong to this class. The damage-inducible DNA helicase dinG was also found to exhibit a ruthenium binding site.

Dirk Wolters

Analytische Chemie, Biomolekulare Massenspektrometrie/Proteincenter,
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum
Tel: + 49 (0) 234/3225463, Fax: + 49 (0) 234/3214742
email: Dirk.Wolters@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/anachem/masse.html>

A. Ihnatowicz, P. Pesaresi, K. Lohrig, D. Wolters, B. Müller, D. Leister *Planta* Epub 2007 Oct 30. Impaired photosystem I oxidation induces STN7-dependent phosphorylation of the light-harvesting complex I protein Lhca4 in *Arabidopsis thaliana*.

Wichtige chloroplastidäre Prozesse, wie z.B. Photosynthese, Genexpression und Stärke-metabolismus, werden durch Proteinphosphorylierung reguliert, wobei aber der Großteil der beteiligten chloroplastidären Proteinkinasen (cpPKs) und -phosphatasen (cpPPs) im Chloroplasten noch unbekannt sind. *A. thaliana* dient dabei als typische Modellpflanze in der Botanik. Ihr Genom ist komplett sequenziert und mit 125 Mbp auf 5 Chromosomenpaaren relativ klein, was *Arabidopsis thaliana* für die Proteinanalytik aber auch für gezielte Manipulation einzelner Proteine oder Gene und die Beobachtung phenotypischer Auswirkung für die Pflanzenphysiologen interessant macht. Außerdem trägt die Verfügbarkeit einer hohen Zahl von Mutanten dazu bei, dass *Arabidopsis* der bestuntersuchtete und damit wichtigste Modellorganismus in der Botanik ist. Es gelang eine neue Phosphorylierungsstelle des Proteins Lhca4 aus einer komplexen Mischung in dem Lichtsammelungskomplex des Photosystem 1 von *Arabidopsis thaliana* nachzuweisen. Es konnte gezeigt werden, dass die Phosphorylierung von Thr16 unmittelbar durch die Chloroplast Kinase STN7 induziert wird, wenn der Plastoquinon-Pool verringert ist, wie dies bei entsprechenden Mutanten der Fall ist.



a) Das MS/MS Spektrum des phosphorylierten Peptides von Lhca4 zeigt den charakteristischen Neutralverlust (NL) an Thr16.
b) pThr Antikörper zeigt die Phosphorylierung des Lhca4 in den entsprechenden Mutanten, deren Plastoquinon-Pool verringert ist (psae1-3, psad1-1) aber nicht im WT.

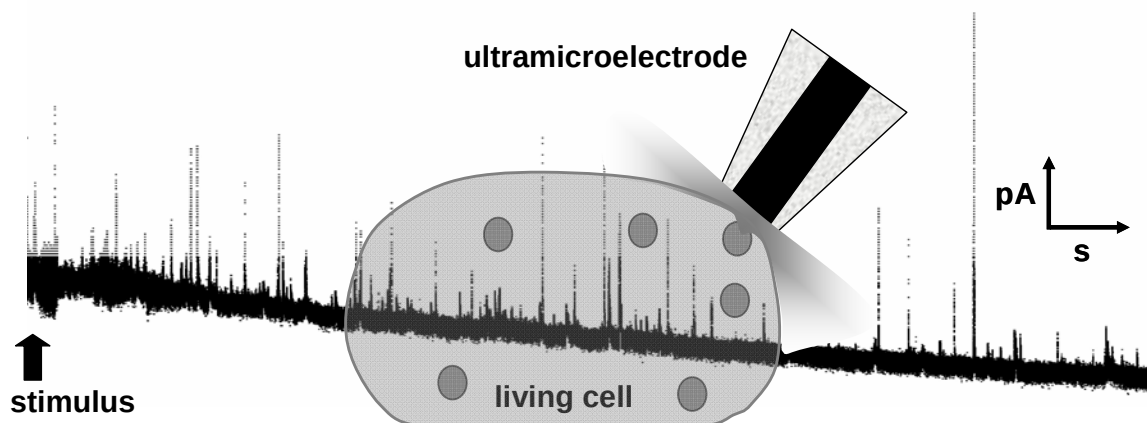
Reduction of the plastoquinone (PQ) pool is known to activate phosphorylation of thylakoid proteins. In the *Arabidopsis thaliana* mutants *psad1-1* and *psae1-3*, oxidation of photosystem I (PSI) is impaired, and the PQ pool is correspondingly over-reduced. We show here that, under these conditions, the antenna protein Lhca4 of PSI becomes a target for phosphorylation. Phosphorylation of the mature Lhca4 protein at Thr16 is suppressed in *stn7 psad1* and *stn7 psae1* double mutants. Thus, under extreme redox conditions, hyperactivation of thylakoid protein kinases and/or reorganization of thylakoid protein complex distribution increase the susceptibility of PSI to phosphorylation.

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

A. Schulte, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* 46 (2007) 8760-8777. Single-Cell Microelectrochemistry. *Angew. Chem.* 119 (2007) 8914-8933. Mikroelektrochemie an einzelnen Zellen. (DOI: 10.1002/anie.200604851).

Nadelförmige voltammetrische Ultramikroelektroden zeigen eine herausragende Sensitivität für die Detektion redoxaktiver Substanzen, eine schnelle Ansprechzeit und Gesamtspitzen-durchmesser im unteren Mikrometerbereich. Diese Charakteristika machen sie zu idealen analytischen Werkzeugen, um die chemische Umgebung und die Aktivität isoliert lebender Zellen, die in ihren vielfältigen Ausgestaltungen die mikroskopischen Baueinheiten der Körper menschlicher, tierischer und weiterer Lebensformen bilden, zu untersuchen. Voraussetzungen für erfolgreiche lokale elektrochemische Messungen in der Nachbarschaft winziger biologischer Objekte sind eine sanfte, stressfreie und akkurate Platzierung der Sondenspitze an der Zelle, eine genaue Kenntnis des erreichten Abstandes zwischen Sonde und Zelle und eine hinreichende Selektivität der Ultramikroelektroden spitze für Substanzen, deren Konzentrationen sich im Lauf der Zeit als Folge zellulärer Vorgänge wie Wachstum, Atmung, oder Transmitter- bzw. Metabolitenaufnahme oder -abgabe ändern. Die Konzepte und Erfolge der *Einzelzellmikroelektrochemie* werden dargestellt, und es wird ein Überblick gegeben über kürzlich erreichte Ergebnisse aus den beteiligten Fachrichtungen, die ihre Arbeiten auf die Erforschung fundamentaler Mechanismen von Zellfunktionen ausgerichtet haben.



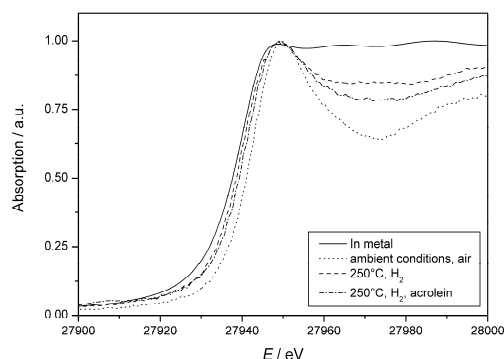
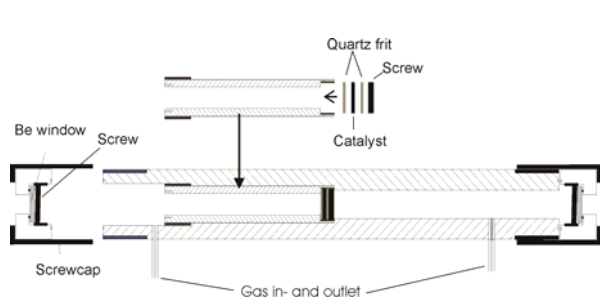
Needle-type voltammetric ultramicroelectrodes have exquisite sensitivity for the detection of redoxactive substances plus rapid response times and total tip diameters in the lower micrometer range. These characteristics make them ideal analytical tools for looking at the chemical environment and the activity of isolated living cells, which in various appearances are the microscopic building blocks of the bodies of human and animal beings and other life forms. Prerequisites for successful local electrochemical measurements in the vicinity of the tiny biological objects are in fact a gentle, stress-free and accurate tip to cell placement, a good knowledge about the established tip-to-cell distance and an appropriate selectivity of the ultramicroelectrode tip for species that may change over time in concentration due to cellular actions such as growth, respiration or transmitter and metabolite uptake or release. The concepts and avenues of *single cell microelectrochemistry* will be considered and an overview given on recent achievements of scientists from the involved disciplines who addressed their work to the exploration of fundamental mechanisms behind cell function.

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>

F. Haass, M. Bron, H. Fuess, P. Claus, *Appl. Catal. A* **318** (2007) 9-16. In situ X-ray investigations on AgIn/SiO₂ hydrogenation catalysts.

Silber-Indium-Katalysatoren zeigen in der Gasphasenhydrierung von Acrolein eine sehr hohe Selektivität zu Allylalkohol, die mit anderen heterogenen Hydrierkatalysatoren nicht erreicht wird. Zur Klärung der Frage, auf welchen strukturellen oder elektronischen Eigenschaften der Katalysatoren dies beruht, wurden in situ-EXAFS-Messungen an AgIn/SiO₂-Katalysatoren unter technischen Bedingungen, d.h. im Reaktionsgemisch bei 250 °C und 10 bar in einem neu konzipierten in situ-Strömungsreaktor durchgeführt. Wir konnten zeigen, dass Indium unter Reaktionsbedingungen in den Katalysatoren in leicht oxidiert Form vorliegt. Es wird vermutet, dass die Adsorptionsgeometrie von Acrolein an die Silberoberfläche durch die Gegenwart von In^{δ+} beeinflusst wird und für die geänderte Selektivität verantwortlich ist.



Silver-indium catalysts exhibit a rather high selectivity to allyl alcohol in the gas phase hydrogenation of acrolein, which is not achieved by other heterogeneous hydrogenation catalysts. In an attempt to evaluate the structural or electronic properties of the catalysts that might be responsible for the observed behavior, in situ-EXAFS measurements have been performed on AgIn/SiO₂ catalysts under technical conditions, i.e. in the presence of the reactants at 250 °C and 10 bar. For this purpose, a novel in situ-reactor has been developed. It could be shown that under reaction conditions oxidized indium is present in the catalyst. We suggest that the adsorption geometry of acrolein at the surface is influenced by the presence of In^{δ+}, which is in turn influencing the selectivity in the hydrogenation reaction.

Dominik Marx

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

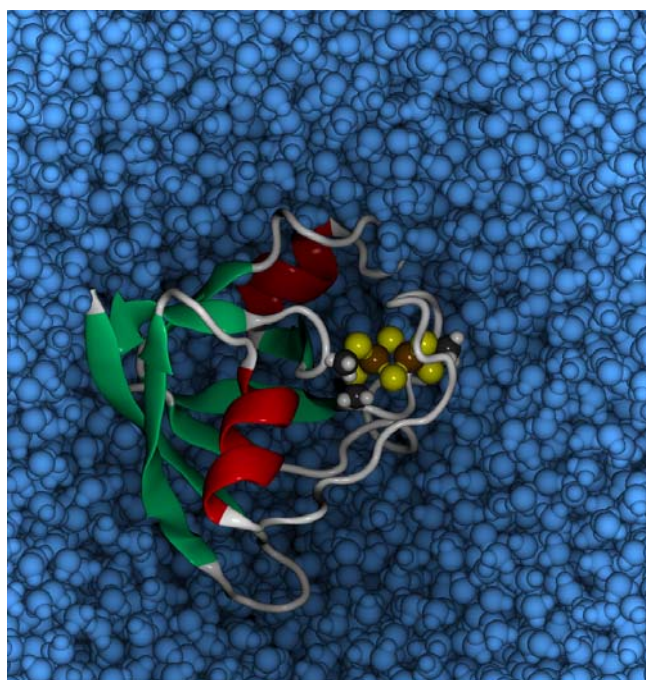
Tel.: ++49-(0)234-3228083; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Dominik.Marx@theochem.rub.de

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

E. Schreiner, N. N. Nair, R. Pollet, V. Staemmler, and D. Marx, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** (2007) 20725-20730. Dynamical magnetostructural properties of *Anabaena* ferredoxin

Eine gemischt quanten/klassische Untersuchung der dynamischen magnetostrukturellen Eigenschaften, kurz der "Magnetodynamik", eines Ferredoxins wurde durchgeführt. Das Protein beherbergt einen [2Fe-2S] Cluster in dem zwei Eisenzentren zu einem low-spin elektronischen Grundzustand gekoppelt sind. Eine Spinprojektionsstechnik ist im Rahmen der DFT formuliert die es erlaubt, multi-determinanten ab initio Molekulardynamik durchzuführen. Mit dieser neuen Technik wurde der Einfluss von thermischen Fluktuationen und Konformationsbewegung auf die Struktur des [2Fe-2S] Clusters sowie die Dynamik der antiferromagnetischen Kopplungskonstante $J(t)$ untersucht. Die Analysen zeigen eine komplexe dynamische Kopplung von J and lokale Schwingungen und grossamplitudige Bewegungen, welche im Sinne von spezifischen Schwingungsmoden und Wasserstoffbrückenbindungen verstanden werden können. Damit geht man über die Goodenough-Kanamori Regeln für winkelabhängige magnetostrukturelle Korrelationen hinaus.



A mixed quantum/classical investigation of the dynamical magnetostructural properties, i.e. "magnetodynamics", of a ferredoxin is carried out. The protein hosts a [2Fe-2S] cluster in which two iron centers are antiferromagnetically coupled to an overall low-spin electronic ground state. A spin projection method is formulated in the framework of DFT that allows for multi-determinant initio molecular dynamics simulations to be carried out. Using this novel scheme the influence of both thermal fluctuations and conformational motion on the structure of the [2Fe-2S] cluster and on the dynamics of the antiferromagnetic coupling constant, $J(t)$, has been investigated. The analyses reveal a complex dynamical coupling of J to both local vi-

brations and large-amplitude motion, which can be understood in terms of specific vibrational modes and distinct hydrogen-bonding patterns. This implies going beyond the Goodenough-Kanamori rules for angular magnetostructural correlations.

Siehe auch RUB Presseinformation:

<http://www.pm.ruhr-uni-bochum.de/pm2007/msg00390.htm>

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glimmerlichtern:

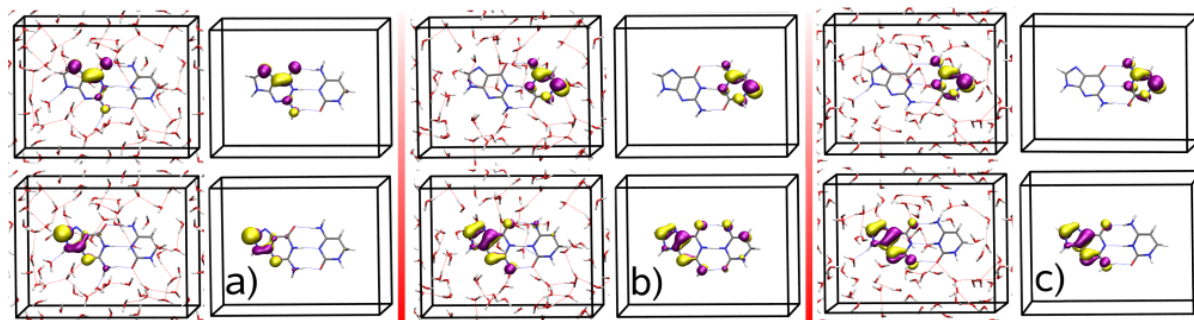
<http://www.theochem.rub.de/go/media.html>

Nikos L. Doltsinis

Lehrstuhl für Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum
Neue Adresse: Department of Physics, King's College London, London WC2R 2LS, UK
Tel.: ++44-(0)20-7848-2156; FAX: ++44-(0)20-7848-2420
email: Nikos.Doltsinis@kcl.ac.uk
<http://www.kcl.ac.uk/schools/pse/physics/people/nikosdoltsinis.html>

P. R. L. Markwick and N. L. Doltsinis *J. Chem. Phys.* **126** (2007) 175102. Ultrafast repair of irradiated DNA: Nonadiabatic ab initio simulations of the GC photocycle.

Nichtadiabatische ab initio Molekuldynamik-Simulationen des photoangeregten Watson-Crick Guanin-Cytosin (GC) DNA-Basenpaares wurden sowohl in der Gasphase als auch in wässriger Lösung durchgeführt. Nach Anregung des an G lokalisierten $\pi\pi^*$ Zustands wird ein gekoppelter Protonen-Elektronen-Transfer (CPET) von G auf C entlang der mittleren H-Brücke beobachtet. Im resultierenden Ladungstransfer-Zustand ist dem System eine konische Durchschneidung zwischen Grund- und angeregtem Zustand zugänglich. Es findet deshalb ein schneller strahlungsloser Zerfall statt, in der Größenordnung 100 fs, gefolgt von einem CPET zurück zur Watson-Crick Ausgangsstruktur. Eine genaue Analyse zeigt einen biexponentiellen Zerfallsmechanismus bei dessen Langzeitkomponente Out-of-plane-Bewegungen eine wichtige Rolle spielen. Der beobachtete ultraschnelle Relaxationsmechanismus könnte beim Schutz der DNA vor UV-Strahlung eine zentrale Bedeutung haben.



Nonadiabatic first-principles molecular dynamics simulations have been performed of the photoexcited Watson-Crick guanine-cytosine (GC) DNA base pair in the gas phase and in aqueous solution. An excited state coupled proton-electron transfer (CPET) from G to C along the central hydrogen bond is observed upon excitation of the $\pi\pi^*$ state initially localized on G. In the resulting charge transfer state a conical intersection between the excited state and the ground state is easily accessible. Therefore radiationless decay is fast, of the order of 100 fs, followed by a rapid CPET back reaction retrieving the initial Watson-Crick structure. A detailed analysis of the mechanism of nonradiative decay suggests a biexponential behavior in which out-of-plane motion plays a special role for the longer decay component. The observed ultrafast deexcitation mechanism may be crucial in preventing UV damage to DNA.

Bernd Meyer

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

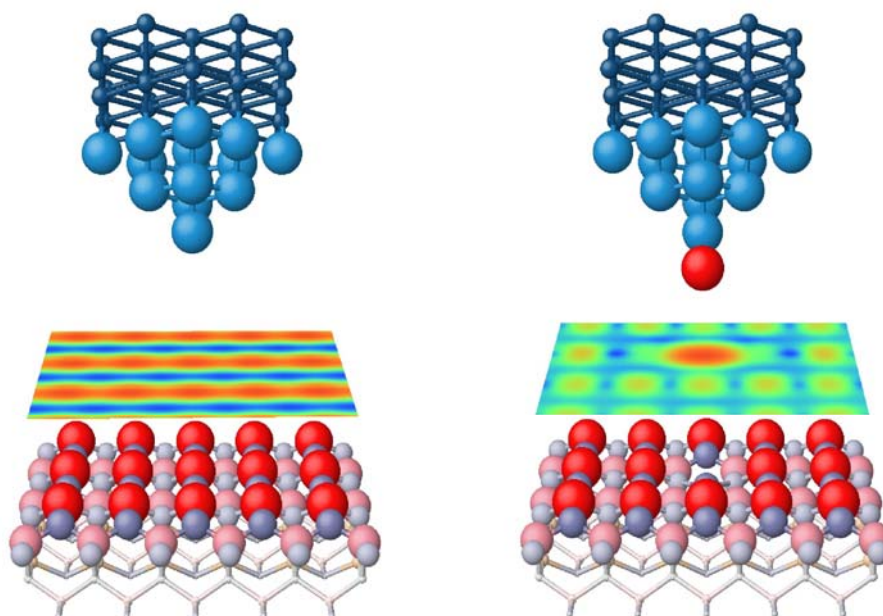
Tel.: +49-(0)234-322-6750, Fax: +49-(0)234-321-4045

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

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

R. Kovacik, B. Meyer, D. Marx, *Angew. Chem.* **119** (2007) 4980; *Angew. Chem. Int. Ed.* **46**, (2007) 4894. F-Zentren versus Dimerleerstellen auf ZnO-Oberflächen: Charakterisierung durch STM- und STS-Rechnungen

Sauerstoff-Leerstellen, auch F-Zentren genannt, gelten landläufig als die Hauptquelle der chemischen Reaktivität von Metalloxid-Oberflächen. Eine Untersuchung der thermodynamischen Stabilität verschiedener atomarer Oberflächendefekte von ZnO durch die Berechnung ihrer Bildungsenergie als Funktion der Redox-Eigenschaften einer umgebenden Gasphase zeigt jedoch, dass für die meisten experimentellen Bedingungen, vom Ultrahochvakuum bis hin zu typischen katalytischen Reaktionstemperaturen und Drücken, ZnO Dimerleerstellen die am häufigsten vorhandenen Oberflächendefekte sind, wogegen F-Zentren weitgehend verdrängt wurden. Berechnete Rastertunnelmikroskopie-Abbildungen und -Spektren geben Richtlinien an, wie die verschiedenen Oberflächendefekte in zukünftigen Experimenten identifiziert werden können.



Oxygen vacancies, also called F-centers, are commonly believed to be the primary source of the chemical reactivity of metal oxide surfaces. Investigating the thermodynamic stability of different atomic surface defects of ZnO by calculating their formation energies as a function of the redox properties of a surrounding gas phase showed, however, that for most experimental conditions, ranging from ultra-high vacuum to temperatures and pressures typically applied in catalytic reactions, that ZnO dimer vacancies are the most abundant type of surface defect, whereas F-centers are strongly suppressed. Calculated scanning tunneling microscopy (STM) images and spectra (STS) provide guidelines on how the different surface defects may be identified in future experiments.

Christof Hättig

Theoretische Chemie – Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum;
D-44780 Bochum

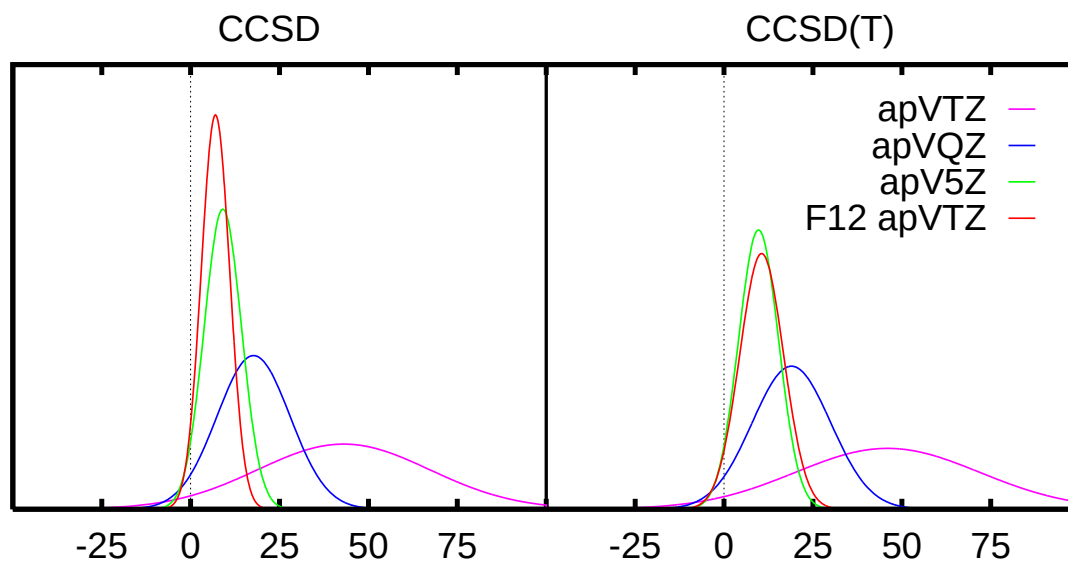
Tel.: ++49-(0)234-3228082; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: christof.haettig@theochem.rub.de

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

D.P. Tew, W. Klopper, C. Neiss, C. Hättig, *PCCP*, **9**, 1921-1930. Quintuple- ζ quality coupled-cluster correlation energies with triple- ζ basis sets.

Die explizit-korrelierte Coupled-Cluster-Methode CCSD(T)(R12) wurde so erweitert, dass F12-Geminalbasisfunktionen verwendet werden können, die exponentiell mit dem interelektronischen Abstand abfallen und im Mittel die Form des Coulombbloches genauer reproduzieren als lineare R12-Methoden. Gleichungen für den starken Orthogonalitätsprojektor im Ansatz 2 wurden hergeleitet und implementiert. Erste Untersuchungen zeigen für diese neue CCSD(T)(F12)-Methode eine schnelle Konvergenz der Korrelationsenergie mit der Orbitalbasis. Typischerweise werden bereits mit einer triple- ζ -Basis 98% der Korrelationsenergie im Basissatzlimit erhalten. Die Genauigkeit der Methode wurde für einen Test-satz von 15 Reaktionsenthalpien, an denen 23 verschiedene Moleküle beteiligt sind, evaluiert. Es zeigt sich, dass die Feststellung im Titel des Artikels sowohl für die gesamte als auch für Differenzen von Korrelationsenergien gilt.



The explicitly-correlated coupled-cluster method CCSD(T)(R12) has been extended to include F12 geminal basis functions that decay exponentially with the interelectronic distance and reproduce the form of the average Coulomb hole more accurately than linear-r(12). Equations derived using the Ansatz 2 strong orthogonality projector are presented. The convergence of the correlation energy with orbital basis set for the new CCSD(T)(F12) method is studied and found to be rapid, 98% of the basis set limit correlation energy is typically recovered using triple-zeta orbital basis sets. The performance for reaction enthalpies is assessed via a test set of 15 reactions involving 23 molecules. The title statement is found to hold equally true for total and relative correlation energies.

Volker Staemmler

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

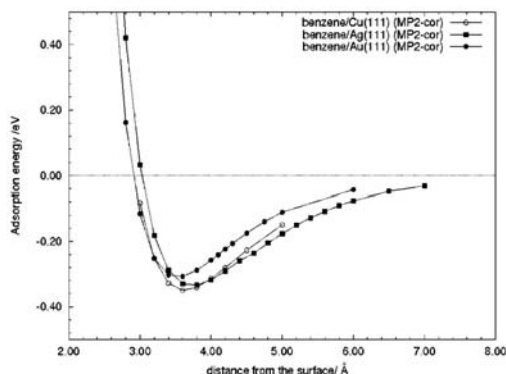
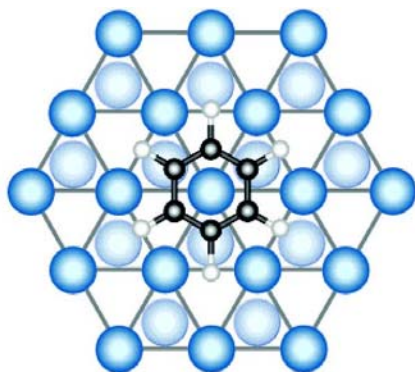
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

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

R. Caputo, B. P. Prascher, V. Staemmler, P. S. Bagus, C. Wöll, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 12778-12784. Adsorption of benzene on coinage metals: A theoretical analysis using wavefunction-based methods

Die korrekte Beschreibung der Adsorption organischer Moleküle an Metall-Oberflächen ist immer noch eine Herausforderung für die Theoretische Chemie. Die populärste Methode, die Dichtefunktional-Theorie (DFT), kann van-der-Waals-Wechselwirkungen (Dispersions-Effekte), die in solchen Systemen dominieren, nicht richtig erfassen. Andererseits haben wellenfunktionsbasierte Methoden Probleme mit ausgedehnten Systemen. Für unsere Berechnung der Adsorption von Benzol an Münzmetallen (Cu, Ag, Au) haben wir daher einen endlichen Cluster von 32 Metallatomen als Modell für die Oberflächen und wellenfunktionsbasierte Methoden (SCF und Störungstheorie 2. Ordnung) gewählt. Unsere Resultate zeigen, daß die Adsorption in den drei Systemen sehr ähnlich ist; die Bindungsabstände liegen zwischen 3.6 und 3.8 Å, die Adsorptionsenergien zwischen 0.30 und 0.40 eV, in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Die Analyse zeigt, daß Pauli-Abstoßung und van-der-Waals-Anziehung die größten Beiträge zur Bindung liefern; die Ladungsübertragung ist sehr gering. Wir finden auch eine große Änderung von etwa -1.0 eV in den Austrittsarbeiten der drei (111)-Flächen; das stimmt sehr gut mit dem Experiment überein.



The correct description of the adsorption of organic molecules on metal surfaces is still a big challenge for quantum chemistry. The most popular method, density functional theory (DFT), cannot properly treat van der Waals interactions (dispersion effects) which are dominant in such systems. Wavefunction based methods, on the other hand, have problems with extended solid surfaces. For our calculations of the adsorption of benzene on coinage metals (Cu, Ag, Au) we have therefore employed a finite cluster of 32 metal atoms to model the surfaces and wavefunction based methods (SCF and second order perturbation theory). Our results show that the adsorption is rather similar in the three systems: The bonding distances range between 3.6 and 3.8 Å and the adsorption energies between 0.30 and 0.40 eV, in good agreement with experimental data. A detailed analysis shows that Pauli repulsion and van der Waals attraction are the main contributions to the interaction mechanism, charge transfer is rather small. Finally, we find a large change of -1.0 eV in the work functions of the metal (111) surfaces upon adsorption, also in good agreement with experiment.

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, *Mol. Phys.* **105** (2007) 2627-2647. Which masses are vibrating or rotating in a molecule?

Nahezu alle quantenchemischen Rechnungen an Molekülen basieren auf der Born-Oppenheimer Näherung (BON). Dabei sucht man zuerst eine Näherungslösung der elektronischen Schrödinger-Gleichung für festgehaltene Kerne, wobei man eine Potentialhyperfläche (PHF) als Funktion der Kernkoordinaten erhält. In einem zweiten Schritt, insbesondere zur Berechnung des Rotations-Schwingungs-Spektrums wird dann die Dynamik der Kerne auf der PHF behandelt. Die Rechtfertigung der BON beruht darauf, dass die Kerne wesentlich schwerer als die Elektronen sind und sich langsamer bewegen. Für nicht-entartete Zustände sind die BO-Fehler von der Größenordnung (m/M) , wobei m die Elektronenmasse und M eine repräsentative Kernmasse ist. Reicht die Genauigkeit der BON nicht aus, so muß man in der herkömmlichen Theorie die Dynamik der Kerne nicht auf einer PHF, sondern einer Vielzahl gekoppelter PHF beschreiben, was sehr aufwendig wird. Hier wird gezeigt, dass die Fehler der BON hauptsächlich darauf beruhen, dass die Elektronen sich teilweise an Schwingung und Rotation beteiligen, was man durch eine Geometrie-abhängige effektive Kern-Masse beschreiben kann, wobei man mit einer einzigen PHF wie in der BON auskommt. Diese effektive Masse ist unterschiedlich für Schwingung und Rotation, wie in der Abb. für das H_2^+ gezeigt wird.

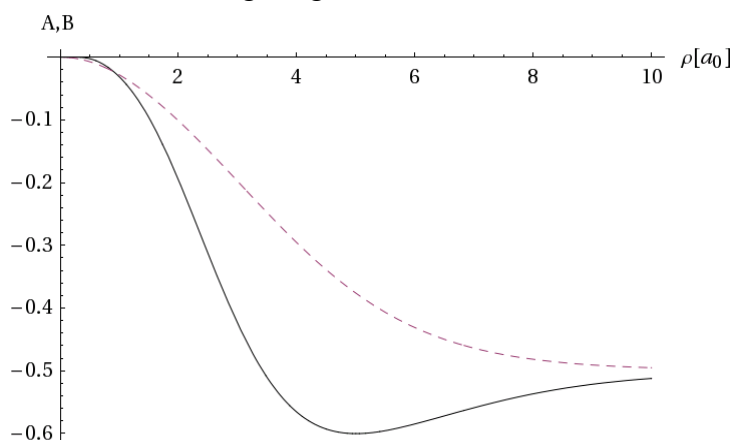


Figure. A (solid line, for vibration) and B (dashed line, for rotation) symbolize the correction to the nuclear mass for H_2^+ . A value of 0 means that two protons are moving, and -0.5 that a proton and a H atom are moving. ρ is the internuclear distance times the optimal orbital exponent, in atomic units. The equilibrium distance is at $\rho = 2.5$

Nearly all quantum chemical molecular calculations are based on the Born-Oppenheimer approximation (BOA). One first cares for an approximate solution of the electronic Schrödinger equation for clamped nuclei, which leads to a potential energy surface (PES) as a function of the nuclear coordinates. In a second step, e.g. for the construction of the vibration-rotation spectra, the nuclear dynamics is treated on the PES. The justification of the BOA is based on the fact that the nuclei are much heavier and move much more slowly than the electrons. For a non-degenerate state the BOA errors are of the order (m/M) , with m the electron mass and M a representative nuclear mass. If this accuracy is insufficient, one must, in the traditional theory, describe the nuclear dynamics on a multitude of coupled PESs, rather than a single one, which is very tedious. Here it is shown that BOA errors are mainly due to a partial participation of the electrons in vibration and rotation, which can be described in terms of a geometry-dependent effective nuclear mass, for a single PES like in the BOA. This effective mass is different for vibration and rotation, as shown on the figure for the H_2^+ ion.

Martin Muhler

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

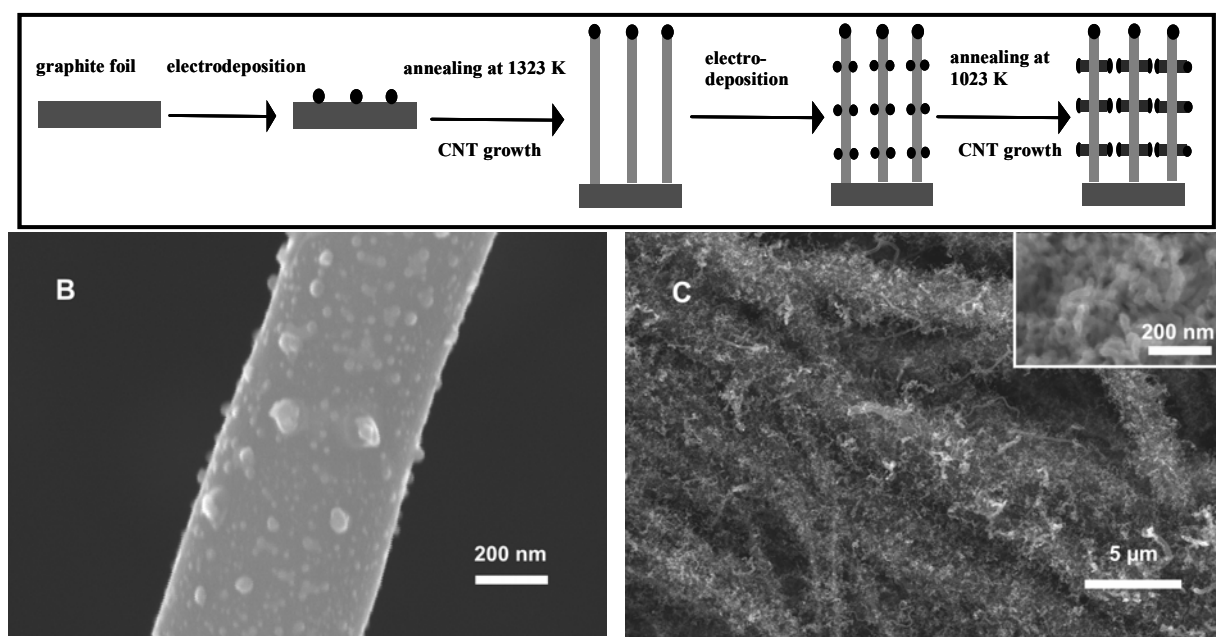
Tel.: ++49-(0)234-3228754; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

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

Nan Li, Xingxing Chen[‡], Leonard Stoica[‡], Wei Xia, Jun Qian, Jens Aßmann, Wolfgang Schuhmann[‡], Martin Muhler, *Adv. Mater.* **19** (2007) 2957-2960. The catalytic synthesis of three-dimensional hierarchical carbon nanotube composites with high electrical conductivity based on electrochemical iron deposition

Es wurde eine hocheffiziente Synthese von hierarchisch strukturierten Kohlenstoff-Kompositen mit hoher spezifischer Oberfläche entwickelt. Die elektrochemische Reduktion wurde als einfach und gut zu kontrollierende Methode zur Abscheidung von Eisen-Nanopartikeln verwendet, die wiederum das Wachstum von Kohlenstoff-Nanoröhren (CNTs) aus Cyclohexan katalysieren. Die unterschiedlichen Morphologien der langen primären und kurzen sekundären CNTs wurde durch die Wachstumsbedingungen im horizontalen Heißwandreaktor gesteuert. Elektrochemische Charakterisierungsmethoden wurden eingesetzt, um die starken Wechselwirkungen zwischen der Graphitfolie und den darauf verankerten langen primären CNTs und zwischen den langen primären und kurzen sekundären CNTs nachzuweisen. Diese sind essentiell für den Einsatz der hierarchisch strukturierten Nanokomposite in Brennstoffzellen und in Sensoren.



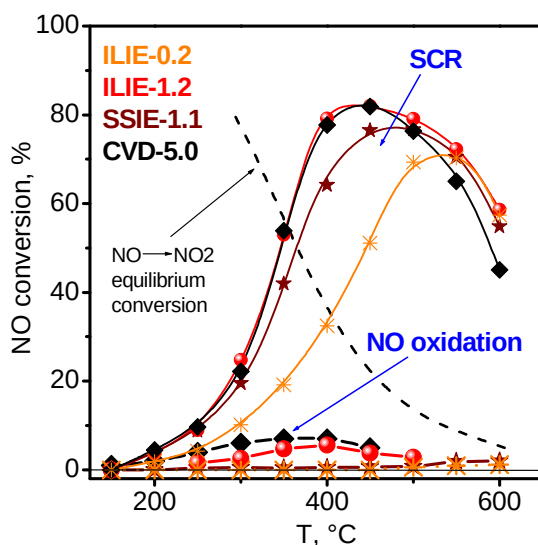
A highly efficient route was developed for the synthesis of hierarchical carbon nanocomposites with high surface area. Electrodeposition was employed as a simple and effective method for the deposition of the iron particles, which were used for the catalytic growth of carbon nanotubes from cyclohexane. Electrochemical studies provided evidence for the strong interaction between the graphite foil and the nanotubes, and between the long primary CNTs and the short secondary CNTs, which are essential for the application of the hierarchical nanocomposite in fuel cell catalysis and in sensor systems.

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/>

A. de Toni, M. Schwidder, A. Brückner, W. Grünert, *Chemie-Ing. Techn.*, **79** (2007) 871-877.
Zentrenstruktur und Vergiftungswirkungen bei der selektiven katalytischen Reduktion von NO mit Ammoniak an Fe-ZSM-5 – Katalysatoren

Die selektive katalytische Reduktion (SCR) von Stickoxiden durch Ammoniak ist eine etablierte Technologie für die Entstickung von Rauchgasen. Sie wird im Interesse der Stickoxideminderung in Dieselabgasen weiterentwickelt, wobei der Ammoniak als Harnstoff in das System eingebracht wird. Gleichzeitig versucht man, von den traditionellen vanadiumhaltigen Katalysatoren auf eisenmodifizierte Zeolithe überzugehen. Umstritten ist der Reaktionsmechanismus an Eisenzeolithen. Dabei ist die Annahme verbreitet, dass NO zunächst auf Eisenzentren zu NO₂ oxidiert wird, denn es ist bekannt, dass die SCR äquimolarer NO/NO₂-Mischungen viel schneller ist als die SCR von NO allein. Dieser Hypothese wurde für mehrere Fe-Zeolith-Katalysatoren durch vergleichende Messungen der normalen SCR (nur NO) und der NO-Oxidation unter identischen Bedingungen nachgegangen. Wie die Abbildung zeigt, ist die NO-Oxidation stets langsamer als die SCR: Die Hypothese, dass die NO-Oxidation ein Teilschritt der SCR ist, muss deshalb verworfen werden.



The selective catalytic reduction (SCR) of nitrogen oxides is a well established NO_x abatement technology for flue gas streams. At present, it is developed to be applied for NO_x reduction in Diesel exhaust, with urea being employed as the ammonia source. At the same time, an effort is made to use iron-modified zeolites instead of the traditional vanadium-based catalysts. The reaction mechanism over Fe zeolites is a matter of debate. It is often assumed that NO is first oxidized to NO₂ over Fe sites, because the SCR of equimolar NO/NO₂ mixtures is much more rapid than the SCR of NO alone. To examine this hypothesis, the SCR of NO and the oxidation of NO were compared over several Fe zeolite catalysts under identical conditions. The figure shows that the oxidation of NO is always slower than its reduction by NH₃. Therefore, NO oxidation cannot be part of the SCR reaction sequence.

Michael Hollmann

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

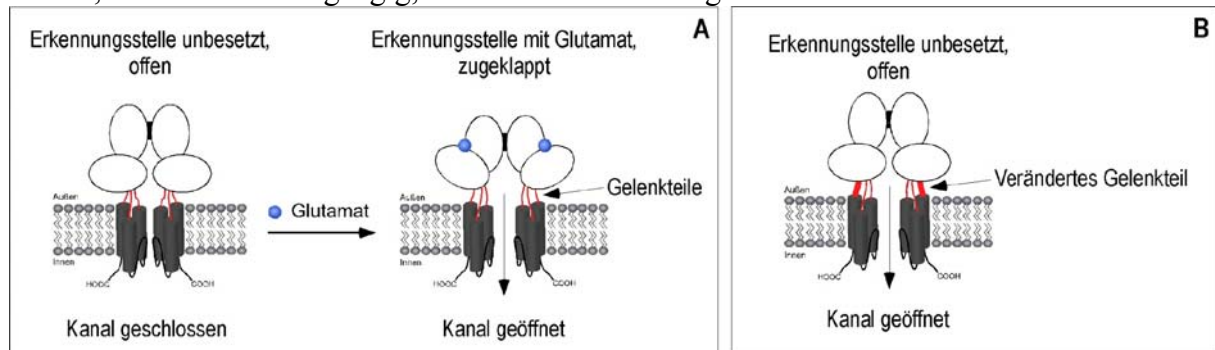
Tel.: ++49-(0)234-3224225; FAX: ++49-(0)234-3214244

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

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

S.M. Schmid, C. Körber, M. Werner, M. Hollmann, *J. Neurosci.* **27**(45) (2007) 12230-12241. AMPA receptor gating is controlled by short segments linking the ligand binding domain to the ion pore. **Pressemitteilung:** <http://www.pm.ruhr-uni-bochum.de/en2007/msg00329.htm>

Neurotransmitterrezeptoren an der Zelloberfläche bestehen aus einer Erkennungsstelle für Glutamat sowie einem Kanal, der sich öffnet, sobald Glutamat bindet (**A**). Dabei sind Glutamaterkennungsstelle und Kanal über einen ausgeklügelten dreiteiligen Gelenkmechanismus miteinander verbunden, die sogenannten *linker A*, *B* und *C*. Über *linker B* war bekannt, dass er bei einer krankhaften Mutation in Mäusen so verändert ist, dass der Kanal konstitutiv offen ist (**B**). Dies blockiert jede normale Signalweiterleitung und führt zum Absterben der Nervenzelle. Wir haben die drei *linker A*, *B* und *C* zwischen verschiedenen ionotropen Glutamaterezeptoren ausgetauscht, um ihre Funktion zu verstehen. Dabei zeigte sich überraschenderweise, dass gerade die beiden *linker*, über die bisher am wenigsten bekannt ist, *A* und *C*, die Funktion der Rezeptoren entscheidend beeinflussen. Die Veränderung eines dieser *linker* (*linker A*) führt ähnlich wie bei der Mausmutation zu ständig geöffneten Kanälen, die Veränderung des anderen (*linker C*) zum Totalverlust der Kanalfunktion. Kombiniert man beide Veränderungen, so erhält man interessanterweise wieder einen normal funktionierenden Rezeptor. Damit kommt es entscheidend auf das Zusammenspiel der *linker* an: sind sie zu schwergängig, kann sich der Kanal nicht mehr öffnen, sind sie zu leichtgängig, steht der Kanal ständig offen.



Neurotransmitter receptors at the cell surface consist of a recognition site for glutamate and a channel that opens upon glutamate binding (**A**). The glutamate recognition site and the channel are linked via an ingenious three-partite hinge mechanism, the so-called linkers A, B, and C. Linker B was known to be altered in a certain mouse mutant and cause a constitutively open ion channel (**B**). This blocks all normal signal transduction and causes neuronal cell death. We exchanged the three linker A, B, and C between different types of ionotropic glutamate receptors to analyze and understand their function. Surprisingly, we found that the two least-known linkers, A and C, critically influence receptor function. Changing one of the linkers (linker A) causes a constitutively open channel as seen in the linker B mouse mutant; replacing the other linker (linker C) completely abolishes channel function. Interestingly, combining both linker mutations in one construct rescues normal ion channel function. Thus, proper interaction of the two linker regions A and C is critical for normal ion channel function. If the linkers are too stiff or sluggish, the channel will not open; if they are too loose and open too easily, a constitutively open channel might result.

Rolf Heumann

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

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

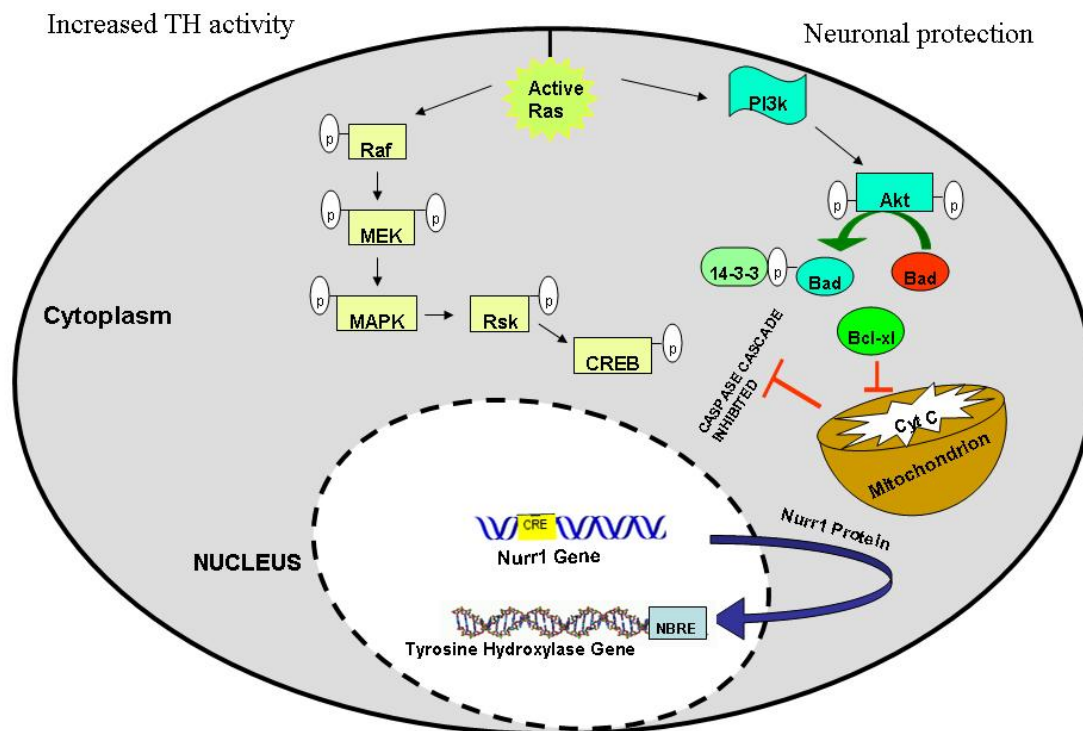
email: Rolf.Heumann@rub.de

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

K. Chakrabarty, T Serchov, S, Mann, I. Dietzel-Meyer, R Heumann *Eur J.Neurosci.* **2007**, 1971 -1981. Enhancement of dopaminergic properties and protection mediated by neuronal activation of Ras in mouse ventral mesencephalic neurons

Wir konnten nachweisen, dass Aktivierung des intrazellulären Signalproteins Ras in Nervenzellen die durch chemische oder mechanische Verletzung erzeugte neuronale Degeneration verhindert. In Kulturen, die aus Neurosphären des sich entwickelnden Gehirns erzeugt wurden, konnten die intrazellulären Signalwege des Ras etabliert werden, die zur Neuroprotektion und Erhöhung der Ausbeute an dopaminergen Nervenzellen (synthetisieren das Enzym Tyrosinhydroxylase, TH) aus Vorläuferzellen führen. Diese dopaminergen Nervenzellen degenerieren bei der Parkinsonschen Krankheit und Implikationen für neue Konzepte zur Therapie werden diskutiert.

Our Model



We have shown previously that activation of the intracellular signalling protein Ras in neurons prevents mechanical or chemical lesion-induced degeneration of neurons, thus mimicking the action of extracellular acting neurotrophins in the brain. Ex vivo cultures derived from neurospheres of the ventral mesencephalic region of the developing brain were established and the signalling pathways were delineated by which Ras promotes an increased number of differentiated dopaminergic neurons with increased resistance against toxic agents. Implications for the treatment of Parkinson's disease have been discussed.

Irmgard Dietzel-Meyer

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

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

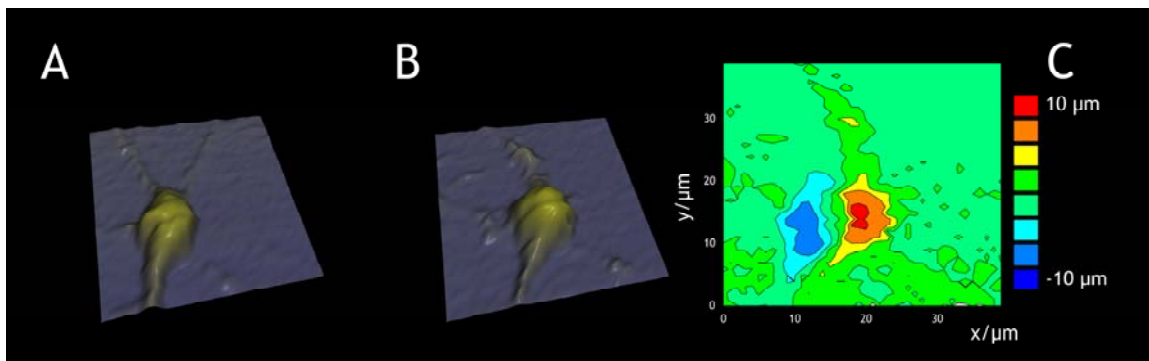
email: Irmgard.D.Dietzel-Meyer @ruhr-uni-bochum.de

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

P. Happel, F. Wehner, I.D. Dietzel. In: *Modern Research and Educational Topics in Microscopy, Microscopy Series n° 3*, Vol. 2, Ed: A. Méndez-Vilas, J. Díaz, Formatex, Badajoz (2007) pp 968-975. Scanning ion conductance microscopy – a tool to investigate electrolyte-nonconductor interfaces.

Wir haben unser in den letzten Jahren entwickeltes Ionenleitfähigkeits-Rastermikroskop (SICM) erfolgreich eingesetzt, um zeitliche Änderungen der Volumina lebender Zellen zu untersuchen, sowie die Oberflächenveränderungen zu beobachten, die die Migration lebender Zellen begleiten. Am Beispiel von Leberzellen als Modellsystem konnten wir zeigen, dass schnelle regulatorische Volumenänderungen, die im Minutenbereich auftreten, der Untersuchung mit Hilfe des SICMs zugänglich sind. Unter Verwendung von Oligodendrozytenvorläuferzellen konnten wir zeigen, dass das SICM darüber hinaus auch zur Untersuchung von Oberflächenänderungen wandernder Zellen eingesetzt werden kann. Dabei ist es uns gelungen, die differenziellen Bewegungen einzelner Membranabschnitte während der Zellwanderung mit bisher unerreichter Genauigkeit zu beobachten.

A,B; sukzessive Scans einer Oligodendrozytenvorläuferzelle im Abstand von ca. 70 Minuten, Scanareal: 40µm x 40µm, Schrittweite: 1 µm lateral und 100 nm vertikal, C: Differenzbild zur Quantifizierung der lateralen Membranbewegung während dieses Zeitraums. Die roten Areale zeigen Höhenzunahmen, die blauen Höhenabnahmen an.



A,B: successive scans of an oligodendrocyte precursor cell at a time interval of approx. 70 minutes. Scanning area: 40µm x 40 µm, 1 µm lateral step size, 100 nm vertical steps. C: difference image quantifying the membrane movements within the time of observation. Red areas correspond to increases, blue areas indicate decreases in height.

We have successfully extended the use of our previously developed scanning ion conductance microscope (SICM) to monitor temporal volume changes of living cells as well as to follow cell surface changes accompanying the movements of migrating cells. We showed that the SICM can be used to monitor fast volume changes occurring in the range of minutes using liver cells as model cells for fast regulatory volume changes. Furthermore, using oligodendrocyte precursor cells we demonstrated that the SICM can also be used to monitor cell surface changes accompanying migrating cells. The method can be used to follow the differential movements of different parts of the plasma membranes of living cells with unprecedented accuracy.

Raphael Stoll

Anal. Chem. / Biochemie II; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

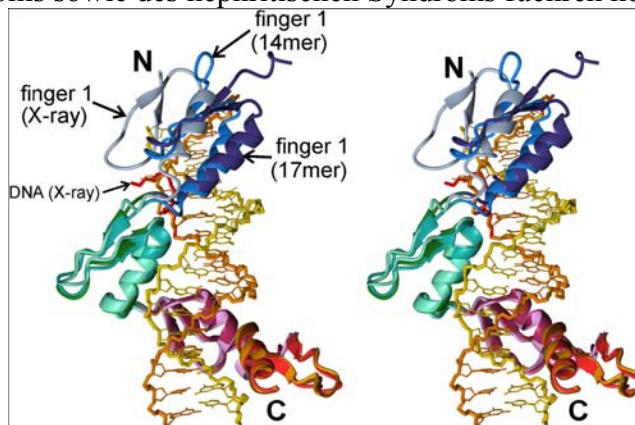
Tel.: ++49-(0)234-3225466; FAX: ++49-(0)234-3205466

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

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

R. Stoll, B.M. Lee, E.W. Debler, J.H. Laity, I.A. Wilson, H.J. Dyson, P.E. Wright, *J. Mol. Biol.* **372** (2007), 1227-1245. Structure of the Wilms Tumor Suppressor Protein Zinc Finger Domain Bound to DNA.

Die Zinkfinger-Domaene des Wilms' Tumorsuppressor-Proteins enthaelt vier kanonische Cys₂His₂-Zinkfinger und bindet bevorzugt an DNA-Sequenzen, die der EGR-1 Konsensus-Sequenz sehr aehnlich sind. Wir konnten sowohl die Roentgenstruktur als auch die Struktur dieser Domaene in Loesung mittels Kernresonanzspektroskopie im Komplex mit zwei verschiedenen DNA-Sequenzen bestimmen. Diese Strukturen bilden nun eine molekulare Basis fuer ein Verstaendnis von Mutationen, die zur Ausbildung des Wilms' Tumors, des Denysh-Drash-Syndroms sowie des nephritischen Syndroms fuehren koennen.



The zinc finger domain of the Wilms tumor suppressor protein (WT1) contains four canonical Cys₂His₂ zinc fingers. WT1 binds preferentially to DNA sequences that are closely related to the EGR-1 consensus site. We report the structure determination by both X-ray crystallography and NMR spectroscopy of the WT1 zinc finger domain in complex with DNA. The X-ray structure was determined for the complex with a cognate 14 base-pair oligonucleotide, and composite X-ray/NMR structures were determined for complexes with both the 14 base-pair and an extended 17 base-pair DNA. This combined approach allowed unambiguous determination of the position of the first zinc finger, which is influenced by lattice contacts in the crystal structure. The crystal structure shows the second, third and fourth zinc finger domains inserted deep into the major groove of the DNA where they make base-specific interactions. The DNA duplex is distorted in the vicinity of the first zinc finger, with a cytidine twisted and tilted out of the base stack to pack against finger 1 and the tip of finger 2. By contrast, the composite X-ray/NMR structures show that finger 1 continues to follow the major groove in the solution complexes. However, the orientation of the helix is non-canonical, and the fingertip and the N terminus of the helix project out of the major groove; as a consequence, the zinc finger side-chains that are commonly involved in base recognition make no contact with the DNA. We conclude that finger 1 helps to anchor WT1 to the DNA by amplifying the binding affinity although it does not contribute significantly to binding specificity. The structures provide molecular level insights into the potential consequences of mutations in zinc fingers 2 and 3 that are associated with Denys-Drash syndrome and nephritic syndrome. The mutations are of two types, and either destabilize the zinc finger structure or replace key base contact residues.

Bernhard Hovemann

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

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

email: <mailto:bernhard.hovemann@rub.de>

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

G. Uhlenbrock, A. Ziegler, S. Pütz, B.T. Hovemann: A Glial Variant of the Vesicular Monoamine Transporter is Expressed in the *Drosophila* Visual System

Um den Mechanismus der Regulierung der Histamin Konzentration zu verstehen, untersuchen wir das visuelle System der Taufliege *Drosophila melanogaster*, in dem Histamin der primäre Neurotransmitter ist, der von Photorezeptorzellen freigesetzt wird. Histamin wird von Histidin Decarboxylase synthetisiert und ist in den Photorezeptorzellen nachweisbar. Es ist allerdings nicht verstanden, wie Histamin in die synaptischen Vesikel transportiert wird, da ein *Drosophila* Ortholog des vesikulären Monoamin Transporters (VMAT) in Photorezeptoren der Fliegen nicht vorhanden ist. Wir zeigen hier, dass eine neuartige *Drosophila* VMAT Spleiß-variante, DVMAT-B, in einem kleinen Teil der Lamina-Glia spezifisch exprimiert ist. Durch Mutation von *dVMAT* wird die Histamin Konzentration reduziert und die Sehfähigkeit beeinträchtigt. Diese Beeinträchtigungen können aber durch Expression von DVMAT-B in Glia aufgehoben werden. In einer Zusammenarbeit mit dem Labor von D. Krantz (UCLA, USA) und I. Meinertzhagen (DU, Canada) haben wir eine neuartige Funktion eines vesikulären Monoamin Transporters in Glia nachgewiesen, die auch für die Histamin Homöostase in anderen Systemen von Bedeutung sein könnte.

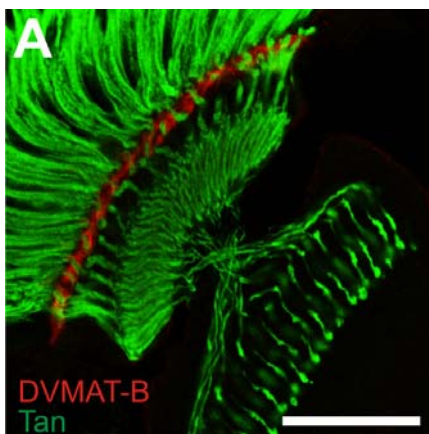


Fig.1a

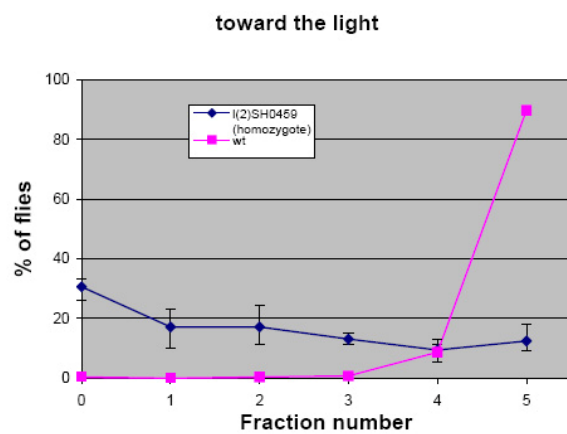


Fig.1b

Figur 1a: Immunzytochemische Markierung von DVMAT-B (rot) und Tan (grün) im 10µm Horizontalschnitt durch den optischen Lobus von *Drosophila*. 1b: Phototaxis Test mit jeweils 100 Fliegen der *dVMAT* Mutante l(2)SH0459 (magenta) im Vergleich zu Wildtyp.

To understand the mechanisms by which histamine levels are regulated we are studying the visual system of *Drosophila melanogaster* in which histamine is the primary neurotransmitter released from photoreceptor cells. Histamine is synthesized by histidine decarboxylase, and localizes to the photoreceptor cell. However it is unclear how histamine is transported into synaptic vesicles, since the *Drosophila* ortholog of VMAT is absent from fly photoreceptors. We demonstrate here that a novel mRNA splice variant of *Drosophila* VMAT (DVMAT-B) is specifically expressed in a small subset of glia in the lamina. Histamine levels are reduced and visual performance is affected by mutation of *dVMAT*, but can be restored by specifically expressing DVMAT-B in glia. In a collaborative effort with the laboratory of David Krantz (UCLA, Los Angeles, USA) and Ian Meinertzhagen (DU, Halifax, Canada) we have revealed a novel function for a vesicular monoamine transporter in glia, which may be relevant to histamine homeostasis in other systems.

Biochemie II – Biochemie polarisierter Zellen; Ruhr-Universität Bochum:
D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3226208; FAX: ++49-(0)234-3214105
email: kai.erdmann@rub.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/mol-neurobio/Erdmann/KErdmann.html>

K.S. Erdmann, H.J. McCrea, Y. Mao, R. Zoncu, S. Lee, S. Paradise, J. Modregger, D. Biemesderfer, D. Toomre, P. De Camilli, *Dev. Cell*, **13**, 377-390. A role of the Lowe syndrome protein OCRL in early steps of the endocytic pathway.

Mutationen im Gen für die Inositol-5-phosphatase OCRL sind für die Entstehung des sogenannten Lowe Syndroms verantwortlich. Das Lowe Syndrom ist durch Defekte im Nervensystem und durch das Auftreten eines Fanconi Syndroms (Resorptionsdefekt in der Niere) charakterisiert. OCRL wurde als Regulator für den intrazellulären Membrantransport vorgeschlagen; eine molekulare Erklärung des Lowe Syndrom Phänotyps existiert zur Zeit nicht. Wir konnten zeigen, dass OCRL transient an sogenannten „coated pits“ lokalisiert vorliegt und mit dem endosomalen Rab5 Effektor APPL1 interagiert. Diese Interaktion wird durch Mutationen, die Lowe Syndrom verursachen, verhindert und stellt eine molekulare Verbindung zu einem Proteinnetzwerk dar, welches für die Resorption in der Niere bzw. für Signaltransduktionsmechanismen im Gehirn verantwortlich ist. Unsere kristallographischen und biochemischen Studien zeigen die Struktur der ASH-RhoGAP-Tandemdomäne sowie ihre Rolle für Bindung des APPL1 Proteins. Unsere Ergebnisse implizieren eine Funktion der OCRL im frühen endocytotischen Vesikeltransport, was mit der Lokalisation der bevorzugten Substrate PI(4,5)P(2) und PI(3,4,5)P(3) an der Plasmamembran im Einklang steht.

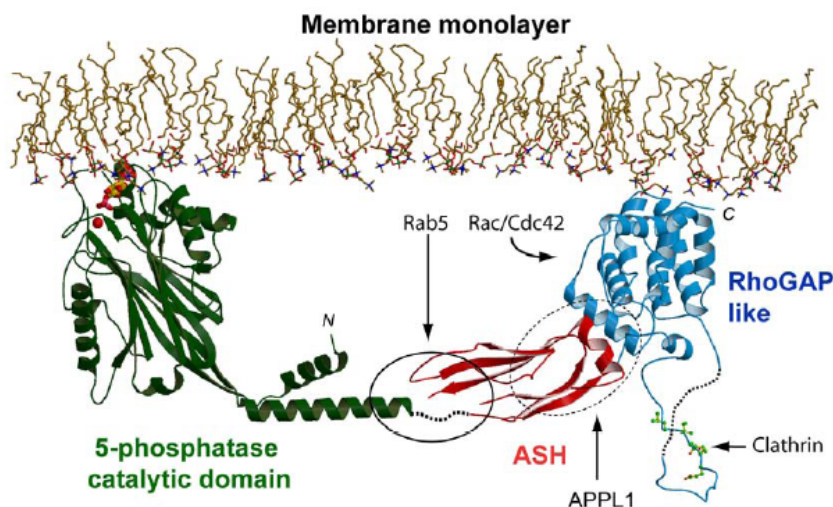


Abbildung 1: Molekulares Modell der Interaktion von OCRL mit der Membran. Die einzelnen Bindungsstellen von Interaktionspartnern sind eingezeichnet.

Mutations in the inositol 5-phosphatase OCRL are responsible for Lowe syndrome, whose manifestations include mental retardation and renal Fanconi syndrome. OCRL has been implicated in membrane trafficking, but disease mechanisms remain unclear. We have shown that OCRL visits late-stage, endocytic clathrin-coated pits and binds the Rab5 effector APPL1 on peripheral early endosomes. The interaction with APPL1, which is mediated by the ASH-RhoGAP-like domains of OCRL and is abolished by disease mutations, provides a link to protein networks implicated in the reabsorptive function of the kidney and in the trafficking and signaling of growth factor receptors in the brain. Crystallographic and biochemical studies reveal the X-ray structure of the ASH-RhoGAP-like tandem domain and its role for APPL1 binding. Our results support a role of OCRL in the early endocytic pathway and suggest a possible consistent with the predominant localization of its preferred substrates, PI(4,5)P(2) and PI(3,4,5)P(3), at the cell surface.

Katrin Sommer

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

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

email: katrin.sommer@rub.de

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

K. Sommer, Die Fachmethoden der Chemie - Anregungen für die Umsetzung des Kompetenzbereiches „Erkenntnisgewinnung“ im Unterricht. (Technical Methods in Chemistry – Suggestions for the implementation of the sphere of competence “gain of knowledge“.) Praxis-Schriftenreihe Chemie. Band 58. Aulis Verlag, Köln 2007

Das Leitmotiv für die Ausführungen in diesem Buch ist zweifellos die Einsicht, dass nicht das reine Wissen, sondern die Methoden des Erwerbs von Wissen heute erforderlich sind.

Da der Begriff „Fachmethoden“ im Titel des Buches steht, erhält er einen beachtlichen Stellenwert und verlangt nach einer fachlichen Auseinandersetzung mit dem Inhalt des Begriffs, die auch prägnant und einleuchtend im ersten Kapitel vorgenommen wird. Die Fachmethoden werden auch richtig in ihrer Bedeutung als Verzahnung von Theorie und Praxis verstanden, wobei dem Experiment eine besondere Wirkung zukommt. Letztlich sind es die Denk- und Arbeitsweisen der Chemie und des Chemieunterrichts, die in diesem Band eindrucksvoll vorgeführt werden.

Die Bedeutung der Fachmethoden wird von der Autorin überzeugend mit einer Reihe gut gewählter Beispiele demonstriert, wobei sie nach der bewährten pädagogischen Erfahrung vom Einfachen zum Komplexen und vom Konkreten zum Abstrakten vorgeht.

(Ausschnitt aus Buchrezension von Prof. Dr. Heinz Schmidkunz, Universität Dortmund)

Zwei Nachweise in einem Reagenzglas – oben Färbung der *Fehling*-Reaktion und unten Färbung der *Biuret*-Reaktion (S. 93)



Two proofs in one test-tube - from top to bottom: the positive Fehling-reaction and the positive Biuret-reaction (p. 93)

The leitmotif for the remarks in this book is without doubt the deeper insight that what is essential today is no pure knowledge but the methods to acquire knowledge.

As the title of the book contains the key term “technical/professional methods” (“Fachmethoden”), it is thus given a considerable significance and demands for a professional discussion on the content of this term. This discussion is concisely and plausibly conducted in the first chapter. The technical/professional methods are rightfully understood in their significance as interlocking theory and practice, giving the experiment specific impact. It is ultimately the way of thinking and operating in chemistry and chemical education that are impressively presented in this volume.

The importance of the technical/professional methods is convincingly demonstrated by the author in a series of well chosen examples following the well proven educational/pedagogical manner to proceed from simple to complex and from concrete to abstract.

(Excerpt from the book review by Prof. Dr. Heinz Schmidkunz, Dortmund University)

Verbundprojekte

Sonderforschungsbereich 558 „Metal-substrate interactions in heterogeneous catalysis“	38
Forschergruppe 630 „Biologische Funktion von Organometallverbindungen"	39
SURMOF (Anchoring of metal-organic frameworks, MOFs, to surfaces).....	40

Veröffentlichungen

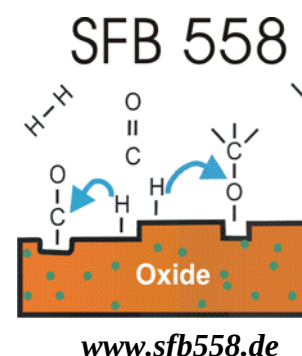
Anorganische Chemie 1	41
Anorganische Chemie 2	42
Organische Chemie 2	45
Physikalische Chemie 1	46
Physikalische Chemie 2	47
Analytische Chemie	48
Theoretische Chemie.....	52
Technische Chemie	54
Biochemie 1.....	56
Biochemie 2.....	57
Didaktik der Chemie	58
 Promotionen an der Fakultät für Chemie und Biochemie 2007	 59

Collaborative research center (Sonderforschungsbereich) SFB 558

“Metal-substrate interactions in heterogeneous catalysis”

Coordination: Ch. Wöll (Physikalische Chemie I) and M. Muhler (Technische Chemie)

The Nobel Prize in Chemistry 2007 was awarded to Prof. Gerhard Ertl "for his thorough studies of fundamental molecular processes at the gas-solid interface". The SFB 558 "Metal-substrate interactions in heterogeneous catalysis" is continuing the research in the new field of modern heterogeneous catalysis in close cooperation with Prof. Ertl. 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. 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 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.

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.

A highlight in 2007 was the joint symposium with SFB 546 "Structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides aggregates" (Coordination: Prof. J. Sauer and Prof. Ch. Limberg) taking place in Berlin. During this symposium titled "From clusters to catalysts – transition metals and transition metal oxides" a lot of new and interesting results have been presented by in the field of catalysis well-known invited speakers and members of both SFBs. In January 2008 the work of the SFB 558 was further strengthened by the approval of the Integrated Graduate School "Physical and Chemical processes at oxide surfaces: from experiment to theory". A closer connection of the PhD students in combination with a well-prepared education programme will further increase the effectiveness of the SFB work.

Forschergruppe 630 "Biologische Funktion von Organometallverbindungen"

Sprecher: 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/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 in dieser von der DFG seit 2006 geförderten ortsverteilten Forschergruppe vereinen eine breite Expertise von der organischen und metallorganischen 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 ("Forschergruppe") will establish organometallic chemistry as part of medicinal chemistry. Funding for this Research Unit by the German Funding Agency (DFG) started in 2006 and is expected to run until 2012. 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.

SURMOF (Anchoring of metal-organic frameworks, MOFs, to surfaces)

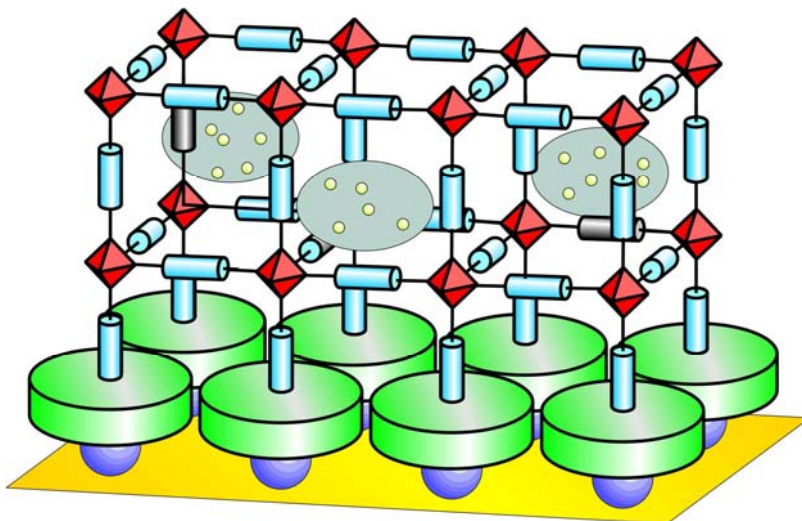
Specific Targeted Research Project

Coordinator: Christof Wöll

www.surmof.eu

Control of growth and properties of structures on a length scale down to molecular dimensions is one of the major challenges in nanotechnology. This project tackles this challenge by merging surface science with coordination chemistry. Seven partners (research institutes and universities) in four European countries participate in the project funded from 10/2006 - 9/2009 with 2.5 Mio. € by the EU. Two groups from the faculty of Chemistry and Biochemistry are involved in this project: Prof. R. A. Fischer (Inorganic Chemistry II) and Prof. C. Wöll (Physical Chemistry I).

Metal-organic frameworks (MOFs) which are coordination polymers consisting of organic ligands linked together by metal ions, are very promising systems due to the virtually unlimited flexibility in their design. Besides appealing properties of the MOF framework itself which makes MOFs most interesting as electrochromic, magnetic, and storage materials, it is the fact that the framework can be loaded with other molecular compounds by employing a guest-host chemistry which creates a tremendous technological potential in a variety of different fields, in particular with respect to catalysis and hydrogen storage. Further applications, e.g., in sensors and in electronics where the length scale below 20 nm requires solutions beyond established concepts, emerge when MOFs are attached to surfaces.



Contrasting existing strategies which are based on the anchoring of bulk-synthesised MOFs on a surface, the present project takes a qualitatively new approach by using surfaces to initiate and control the growth of MOFs. Combining a bottom-up (building of the MOFs from molecular subunits) with a top-down (different types of lithographies) approach, control of MOF patterns in three dimensions is envisaged.

Involving coordination and synthetic organic chemistry, surface science, and modelling a comprehensive approach has been adopted. Ranging from fundamental aspects of nucleation and growth of MOFs to application related issues of their host-guest chemistry different schemes are being explored by experiments on different types of MOFs under conditions which range from ultrahigh vacuum to electrochemical environment.

The results after the first of three project years are listed on the SURMOF web site (www.surmof.eu).

Anorganische Chemie 1

- N. Metzler-Nolte, *Chimia* **61** (2007) 736-741. Medicinal Applications of Metal-Peptide Bioconjugates
- M.C. Kuchta, A. Groß, A. Pinto, N. Metzler-Nolte, *Inorg. Chem.* **46** (2007) 9400-9404. Labelling of the Neuropeptide Enkephalin with Functionalized Tris(pyrazolyl)borate Complexes: Solid Phase Synthesis and Characterization of *p*-[Enk-OH]COC₆H₄TpPtMe₃ and *p*-[Enk-OH]COC₆H₄TpMeRe(CO)₃
- J.L. Jios, S.I. Kirin, N.N. Buceta, T. Weyhermüller, C.O. Della Védova, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **692** (2007) 4209-4214. Synthesis and structural characterization of metallated bioconjugates: C-terminal labeling of amino acids with ferroceneamine
- S.I. Kirin, T. Weyhermüller, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **633** (2007) 2706-2710. The X-ray Single Crystal Structures of an Acid-functionalized Bis(2-picolyl)amine (bpa) Ligand with Pd(II) and Zn(II) display different intermolecular interactions around the common (H₂O)₂(anion)₂ motif
- X. de Hatten, Z. Cournia, I. Huc, J.C. Smith, N. Metzler-Nolte, *Chem. Eur. J.* **13** (2007) 8139-8152. Force-Field Development and Molecular Dynamics Simulations of Ferrocene-Peptide Conjugates as a Scaffold for Hydrogenase Mimics
- S. Pfander, R. Fiammengio, S.I. Kirin, N. Metzler-Nolte, A. Jäschke, *Nucleic Acids Res.* **35** (2007) e25/1–e25/8; doi:10.1093/nar/gkl1110. Reversible site-specific tagging of enzymatically synthesized RNAs using aldehydehydrazine chemistry and protease-cleavable linkers
- J. Caddy, U. Hoffmanns, N. Metzler-Nolte, *Z. Naturforsch.* **62B** (2007) 460-466. Introduction of phosphine-gold(I) precursors into a Cys-modified Enkephalin neuropeptide as part of solid phase peptide synthesis
- M.C. Kuchta, C. Gemel, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **692** (2007) 1310- 314. An Amino Acid Bioconjugate of an Organoplatinum Tris(pyrazolyl)borate Complex: Synthesis and Structure of [*p*-(^tBuO-Phe-CO)]C₆H₄Tp]PtMe₃
- S.I. Kirin, F. Noor, N. Metzler-Nolte, W. Mier, *J. Chem. Educ.* **84** (2007) 108-111. Manual Solid Phase Peptide Synthesis
- E.E. Chufán, C.N. Verani, S.C. Puiu, E. Rentschler, U. Schatzschneider, C. Incarvito, A.L. Rheingold, K.D. Karlin, *Inorg. Chem.* **46** (2007) 3017-3026. Generation and Characterization of [(P)M-(X)-Co(TMPA)]ⁿ⁺ Assemblies; P = Porphyrinate, M = Fe^{III} and Co^{III}, X = O²⁻, OH⁻, O₂²⁻, and TMPA = Tris(2-pyridylmethyl)amine.
- M. Driess, K. Merz, R. Schoenen, *Organometallics* **26(8)** (2007) 2133-2136. From Neutral Zn₄O₄ Clusters to a Cationic ZnO Dimer in Solution.
- S. Pickartz, N. Thomanek, F. Kaufmann, K. Merz, *Ger. Offen.* (2007) DE102005052655. Production and use of nanocrystalline zinc oxide particles.
- G. Dyker, K. Merz, I.M. Oppel, E. Muth, *Synlett* **6** (2007) 897-900. Palladium-Catalyzed Naphthylation of Acenaphthylene.

- N. v. Prondzinski, M. Winter, K. Merz, *Acta Cryst.* **E63** (2007) m1687. Sodium 2,4-dinitrophenolate monohydrate.
- Milanov, R. Thomas, M. Hellwig, R. Bhakta, K. Merz, H.-W. Becker, P. Ehrhart, R. A. Fischer, R. Waser, A. Devi, *Surface and Coatings Technology* **201** (2007) 9109-9116. LI-MOCVD of HfO₂ thin films using engineered amide based Hf precursors.
- N. v. Prondzinski, A. Babai, A.-V. Mudring, K. Merz, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **633** (2007) 1490-1492. [bmpyr]₂Zn[OC₆H₃(NO₂)₂]₄: Influence of an Ionic Liquid on liquid/liquid extraction of metal ions in a biphasic system.
- F. Rieger, A.-V. Mudring, *Chem. Mat.* **2007**, 19, 221. Synthesis, structure, electronical and physical properties of Tl₂TeS₃ – the first characterized thallium thiotellurite.
- F. Rieger, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 446. Phase transition in Tl₂TeO₃ – influence and origin of the lone pair distortion.
- A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chemistry*, **2007**, 6, 882. Thallous Halides – New Aspects of the Stereochemical Activity of Lone Pairs of Heavier Main Group Elements.
- N. v. Prondzinski, A. Babai, A.-V. Mudring, K. Merz, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **2007**, 633, 1490. [(bmpyr)₂{Zn(OC₆H₃(NO₂)₂)₄}]: Influence of an Ionic Liquid on Liquid/Liquid Extraction of Metal Ions in a Biphasic System.
- T. Timofte, *Z. Krist. Suppl. Vol.* **2007**, 070-08-id235. Crystal Structure, Thermal and Spectroscopic Properties of the Ionic Liquid [bmim][Al(hfip)₄].
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Z. Krist. Suppl. Vol.* **2007**, 041-01-id177. [C₁₂mim]₄[EuBr₆][Br·CH₃CN]: A Lanthanide Based Ionic liquid Crystal
- F. Rieger, A.-V. Mudring, *Z. Krist. Suppl. Vol.* **2007**, 080-08-id179. Structures and properties of new thallium tellurites.
- T. Timofte, S. Pitula, A.-V. Mudring, *Inorg. Chem.* **2007**, 46, 10938. Ionic liquids with perfluorinated anions.
- A.-V. Mudring in: R. Rogers, K. Seddon (Eds.) ACS Symposium Series (2007). Ionic Liquids as Versatile Media in Lanthanide Chemistry.

Anorganische Chemie 2

- L. Lu, S. Hu, H.-I Lee, C. Wöll, R.A. Fischer, *J. Nanopart. Res.* **9** (2007) 491-496. Photoinduced growth of Cu nanoparticles on ZnO from CuCl₂ in methanol.
- A. Baunemann, M. Lemberger, A. J. Bauer, H. Parala R.A. Fischer, *Chem. Vap. Depos.* **2-3**, (2007) 78-83. MOCVD of TaN using the all nitrogen coordinated precursors: [Ta(NEtMe)₃(N-*t*-Bu)], [Ta(NEtMe)(N-*t*-Bu){C(N-*i*-Pr)₂(NEtMe)₂}₂] and [Ta(NMeEt)₂(N-*t*-Bu){Me₂N-N(SiMe₃)₂}].
- A. Kempter, C. Gemel, R.A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **13** (2007), 2990-3000. Pt⁰ and Pd⁰ Olefin Complexes of the Metalloid N-Heterocyclic Carbene Analogues [E^I(ddp)] (ddp = 2-{(2,6-diisopropylphenyl)amino}-4-{(2,6-diisopropylphenyl)-imino}-2-pentene; E=Al, Ga): Ligand Substitution, H-H and Si-H Bond Activation, and Cluster Formation.

- T. Thomas, E. Rije, P. Erhardt, A. Milanov, R. Bhakta, A. Baunemann, A. Devi, R.A. Fischer, R. Waser, *J. Electrochem. Soc.* **154** (2007) G77-G84. Thin Films of HfO₂ for high-k Gate Oxide Applications from Engineered Alkoxide- and Amide-Based MOCVD Precursors
- S. Hermes, D. Zacher, A. Baunemann, C. Wöll, R.A. Fischer, *Chem. Mater.* **19** (2007) 2168 - 2173. Selective Growth and MOCVD Loading of Small Single Crystals of MOF-5 at Alumina and Silica Surfaces Modified with Organic Self Assembled Monolayers.
- S. Hermes, T. Witte, T. Hikov, D. Zacher, S. Bahn Müller, G. Langstein, K. Huber, R.A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **129** (2007) 5324 - 5325. Trapping Metal-Organic Framework Nanocrystals: An in-situ Time Resolved Light Scattering Study on the Crystal Growth of MOF-5 in Solution.
- W.-H Zhang, X. Zhang, Z. Hua, H. Parala, F. Schroeder, S. Hermes, T. Cadenbach, J. Shi, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **19** (2007) 2663-2670. Synthesis, Bifunctionalization, and Application of Isocyanurate-based Periodic Mesoporous Organosilicas.
- A. Devi, R. Bhakta, A. Milanov, M. Hellwig, D. Barreca, E. Tondello, R. Thomas, P. Ehrhart, M. Winter, R.A. Fischer, *Dalton Trans.* **16** (2007) 1671-1676. „Synthesis and characterization of zirconium-amido guanidinato complex: A potential precursor for ZrO₂ thin film.
- D. Zacher, A. Baunemann, S. Hermes, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **17** (2007) 2785-2792. Deposition of microcrystalline [Cu₃(btc)₂] and [Zn₂(bdc)₂(dabco)] at alumina and silica surfaces modified with patterned self assembled organic monolayers: evidence of surface selective and oriented growth.
- O. Shekhah, H. Wang, T. Strunskus, R. Chelmowski, D. Zacher, R.A. Fischer, Ch. Wöll, *Langmuir* **23** (2007) 7440-7442. Layer-by-layer growth of metal-Organic Open Frameworks on a functionalized organic surface.
- R. Thomas, R. Bhakta, P. Ehrhart, R.A. Fischer, R. Waser, A. Devi, *Surface Coatings and Technology* **201** (2007) 9135-9140. Liquid injection MOCVD of TiO₂ and SrTiO₃ thin films from [Ti(OPri)₂(tbaoac)₂]: Film properties and compatibility with [Sr(thd)₂].
- A. Milanov, R. Thomas, M. Hellwig, K. Merz, H.-W. Becker, P. Ehrhart, R.A. Fischer, R. Waser, A. Devi, *Surface Coatings and Technology* **201** (2007) 9109-9116. LI-MOCVD of HfO₂ thin films using engineered amide based Hf precursors.
- D. Rische, H. Parala, A. Baunemann, T. Thiede, R.A. Fischer, *Surface Coatings and Technology* **201** (2007) 9125-9130. Guanidinato based precursors for MOCVD of metal nitrides (M_xN; M = Ta, W).
- M. Lemberger, S. Thiemann, A. Baunemann, H. Parala, R.A. Fischer, J. Hinz, A.J. Bauer H. Ryssel, *Surface Coatings and Technology* **201** (2007) 9154-9158. MOCVD of tantalum nitride thin films from TBTEMT single source precursor as metal electrodes in CMOS applications.
- R. Naumann d'Alnoncourt, M. Becker, J. Sekulic, R.A. Fischer, M. Muhler, *Surface Coatings and Technology* **201** (2007) 9035-9040. The preparation of Cu/Al₂O₃ catalysts via CVD in a fluidized-bed reactor.

- W.-H. Zhang, X. Zhang, L. Zhang, F. Schroeder, P. Harish, S. Hermes, J. Shi, R.A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **19** (2007), 4320-4326. Synthesis of periodic mesoporous organosilicas with chemically active bridging groups and high loadings of thiol groups
- K. Rajalingam, A. Bashir, M. Badin, F. Schröder, N. Hardman, T. Strunskus, R.A. Fischer, Ch. Wöll, *ChemPhysChem* **8** (2007) 657-660. Chemistry in Confined Geometries: Reactions at an Organic Surface.
- A. Kempter, C. Gemel, R.A. Fischer, *Organometallics*, **26** (2007) 4257-4264. Ni(0) Olefin Complexes coordinated by Ga^I(DDP) (DDP = bulky bis-imidinate).
- A. Kempter, C. Gemel, T. Cadenbach, R.A. Fischer, *Inorg. Chem.* **46** (2007) 9481-9487. Synthesis and Structure of New Compounds with Zn-Ga Bonds: Insertion of the Gallium(I) Bisimidinate Ga(DDP) into Zn-X (X = CH₃, Cl) and the Homoleptic Complex Cation [Zn(GaCp^{*})₄]²⁺.
- M. Cokoja, H. Parala, A. Birkner, O. Shekhah, M. W. E. van den Berg, R.A. Fischer, *Chem. Mater.* **19** (2007) 5721-5733. Organometallic Synthesis of Colloidal α -/ β -NiAl Nanoparticles and Selective Aluminum Oxidation in α -Ni_{1-x}Al_x Nanoalloys.
- M. Hellwig, A. Milanov, D. Barecca, J.-L. Deborde, R. Thomas, M. Winter, U. Kunze, R.A. Fischer, A. Devi, *Chem. Mater.* **19** (2007) 6077–6087. Stabilization of Amide-Based Complexes of Niobium and Tantalum using Malonates as Chelating Ligands: Precursor Chemistry and Thin Film Deposition.
- O. Shekhah, H. Wang, S. Kowarik, F. Schreiber, M. Paulus, M. Tolan, C. Sternemann, F. Evers, D. Zacher, R.A. Fischer, Ch. Wöll, *J. Am. Chem. Soc.* **129** (2007) 15118-15119. Step-by-step route for the synthesis of metal organic frameworks.
- R. Bhakta, H. Bettinger, A. Devi, *Electrochem. Soc. Trans.* 2007, **2**, 89-104. Investigations into the decomposition mechanism of [Ti(OPrⁱ)₂(thd)₂] using matrix isolation techniques
- R. Thomas, R. Bhakta, A. Milanov, A. Devi, P. Ehrhart, *Chem. Vap. Deposition*, 2007, **13**, 98-104. Thin films of ZrO₂ for high-*k* applications employing engineered alkoxide and amide based MOCVD precursors
- W. Xia, Y. Wang, V. Hagen, A. Heel, G. Kasper, U. Patil, A. Devi, M. Muhler, *Chem. Vap. Deposition*, 2007, **13**, 37-41. The synthesis of ZrO₂/SiO₂ nanocomposites by the two-step CVD of a volatile halogen-free Zr alkoxide in a fluidized-bed reactor.
- M. Tafipolsky, R. Schmid, *Surf. Coat. Technol.* 2007, **201**, 8818-8824. Theoretical determination of accurate reate constant: Application to the decomposition of a single-molecule precursor.
- M. Tafipolsky, R. Schmid, *Chem. Vap. Deposition* 2007, **13**, 84-90. Thermodynamic Stability of Small GaN_n Clusters as Intermediates in GaN CVD.
- S. Amirjalayer, M. Tafipolsky, R. Schmid, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, **46**, 463-466. Molecular Dynamics Simulation of Benzene Diffusion in MOF-5: Importance of Lattice Dynamics.
- M. Tafipolsky, S. Amirjalayer, R. Schmid, *J. Comput. Chem.* 2007, **28**, 1169-1176. An ab initio parametrized forcefield for the metal-organic framework MOF-5.

- H. Köstler, R. Schmid, U. Rüde, C. Scheit, *Computing and Visualization in Science* 2007, online DOI:10.1007/s00791-007-0062-0. A parallel multigrid accelerated Poisson solver for ab initio molecular dynamics applications

Organische Chemie 2

- C. Kolano, J. Helbing, G. Bucher, W. Sander, and P. Hamm, *J. Phys. Chem. B* **111** (2007) 11297-11302. Intramolecular disulfide bridges as a phototrigger to monitor the dynamics of small cyclic peptides.
- C. Kolano, J. Helbing, W. Sander, and P. Hamm, *Springer Ser. Chem. Phys.* **88** (2007) 424-426. Towards a molecular movie: real time observation of hydrogen bond breaking by transient two-dimensional-IR spectroscopy in a cyclic peptide.
- L. Koziol, M. Winkler, K.N. Houk, S. Venkataramani, W. Sander, and A.I. Krylov, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 5071-5080. The 1,2,3-Tridehydrobenzene Triradical: 2B or Not 2B? The Answer is 2A!
- Mardyukov, E. Sanchez-Garcia, P. Rodziewicz, N.L. Doltsinis, and W. Sander, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 10552-10561. Formamide Dimers: A Computational and Matrix Isolation Study.
- W. Sander, M. Winkler, B. Cakir, D. Grote, and H.F. Bettinger, *J. Org. Chem.* **72** (2007) 715-724. Dehydrophenylnitrenes: Matrix Isolation and Photochemical Rearrangements
- S. Venkataramani, M. Winkler, and W. Sander, *Angew. Chem., Int. Ed.* **46** (2007) 4888-4893. *Angew. Chem.* (2007), 119, 4974. Trifluoro-1,3,5-tridehydrobenzene.
- R. Bhakta, H. F. Bettinger, A. Devi, *Electro. Chem. Soc. Trans.* **2** (2007) 89-104. Investigation of Thermal Decomposition of the Titanium MOCVD Precursor [Ti(OPri)₂(thd)₂], Employing Matrix Isolation-FTIR Technique.
- O. Volkov, P. Paetzold, H. F. Bettinger, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **633** (2007) 846-850. The Anions B₂₄H₂₃³⁻ and B₃₆H₃₄⁴⁻ from the Thermal Protolysis of B₁₂H₁₂²⁻.
- H. F. Bettinger, *Inorg. Chem.* **46** (2007) 5188-5195. BN-Analogues of Vinylidene Transition Metal Complexes: The Borylnitrene Isomer.
- H. F. Bettinger, *Organometallics* **26** (2007) 6263-6267. Reversible Formation of Organyl(oxo)boranes RBO (R = C₆H₅, CH₃) from Boroxins: A Matrix Isolation Study.
- H. F. Bettinger, M. Filthaus, *J. Org. Chem.* **72** (2007), 9750-9752. Halogen-Metal Exchange in 1,2-Dibromobenzene and the possible Intermediacy of 1,2-Dilithiobenzene.
- H. F. Bettinger, R. Mondal, D. C. Neckers, *Chem. Commun.* (2007) 2509-2511. Stable Photoinduced Charge Separation in Heptacene.
- Z. Chen, D. Jiang, X. Lu, H. F. Bettinger, S. Dai, P. v. R. Schleyer, K. N. Houk, *Org. Lett.* **9** (2007), 5449-5452. Singlet Diradical Character of Cyclacenes and Short Zigzag Nanotubes.

- M. Hagel, J. Liu, O. Muth, H. J. Estevez Rivera, E. Schwake, L. Sripanom, G. Henkel, G. Dyker, *Eur. J. Org. Chem.* **2007**, 3573-3582. Para-Quinoid Compounds by Nucleophilic Aromatic Substitution with Hydride as Leaving Group
- G. Dyker, K. Merz, I. M. Oppel, E. Muth, *Synlett* **2007**, 897-900. Palladium-Catalyzed Naphthylation of Acenaphthylene
- D. G. Dyker, A. Thöne, G. Henkel, *Beilstein J. Org. Chem.* **2007**, **3**:28. Reactions of Glycidyl Derivatives with Ambident Nucleophiles. Part 2: Amino Acid Derivatives

Physikalische Chemie 1

- L. Ruppel, A. Birkner, G. Witte, C. Busse, Th. Lindner, G. Paasch, Ch. Wöll, *J. Appl. Phys.*, **102**, 033708, (2007). A defect-free thin film pentacene diode: Interplay between transport and scanning tunneling microscope tip tunneling injection
- G. Tzvetkov, N. Schmidt, T. Strunskus, Ch. Wöll, R. Fink, *Surf. Sci.*, **601**, 9, 2089-2094 (2007). Molecular adsorption and growth of naphthalene films on Ag(100)
- K. Fossler, J. H. Kang, R.G. Nuzzo and Ch. Wöll, *Journal of Chemical Physics*, **126**, 194707, (2007). The adsorption of linear alkanes on Cu(111): Temperature and chain length dependence of the softened vibrational mode
- Ch. Wöll, *Prog. Surf. Sci.*, **82**, 55-120, (2007). The Chemistry and Physics of Zinc Oxide Surfaces
- M.G. Badin, A. Bashir, S. Krakert, Th. Strunskus, A. Terfort and Ch. Wöll, *Angew. Chemie, Int. Ed.*, **46**, 3762-3764 (2007). Kinetically Stable, Flat Lying Thiolate Monolayers. Deutsch: *Angew. Chemie*, **119**, 3837-3839 (2007), Kinetisch stabile, flach liegende Thiolat-Monoschichten
- K. Rajalingam, A. Bashir, M. Badin, F. Schröder, N. Hardman, Th. Strunskus, R. A. Fischer and Ch. Wöll. *ChemPhysChem*, **8**, 657 – 660, 2007. Chemistry in confined geometries: Reactions at an organic surface
- S. Kowarik, A. Gerlach, W. Leitenberger, J. Hu, G. Witte, Ch. Wöll, U. Pietsch, F. Schreiber, *Thin Solid Films*, **515**, 5606-5610, (2007). Energy-dispersive X-ray reflectivity and GID for real-time growth studies of pentacene thin films
- Y. Wang, X. Xia, A. Urban, H. Qiu, J. Strunk, B. Meyer, M. Muhler, and Ch. Wöll, *Angew. Chemie, Intern. Ed.*, **46**, 7315-7318 (2007). Tuning the reactivity of oxide surfaces by charge-accepting adsorbates. Deutsch: *Angew. Chemie*, **119**, 7456-7459 (2007), Die Steuerung der Reaktivität von Oxidoberflächen durch ladungsakzeptierende Adsorbate
- P. Cyganic, M. Buck, T. Strunskus, A. Shaporenko, G. Witte, M. Zharnikov, and Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. C*, **111**, 45, 16909-16919 (2007). Influence of Molecular Structure on Phase Transitions: A Study of Self-Assembled Monolayers of 2-(Aryl)-Ethane Thiols
- O. Shekhah, H. Wang, T. Strunskus, P. Cyganic, D. Zacher, R.A. Fischer, and Ch. Wöll, *Langmuir*, **23**, (14) 7440-7442 (2007). Layer-by-Layer Growth of Oriented Metal organic Polymers on a functionalized organic surface

- G. Witte, K. Hänel, C. Busse, A. Birkner, Ch. Wöll, *Chem. Mater.*, **19**, 4228-4233 (2007). Molecules coining patterns into a metal: the hard core of soft matter
- D. Käfer, L. Ruppel, and G. Witte, *Phys. Rev. B* **2007**, **75**, 085309. Growth of Pentacene on Clean and Modified Gold Surfaces.
- S. Kowarika, A. Gerlach, W. Leitenberger, J. Hua, G. Witte, C. Wöll, U. Pietsch, F. Schreiber, *Thin Solid Films* **2007**, **515**, 5606. Energy-dispersive X-ray reflectivity and GID for Real-time Growth Studies of Pentacene Films.
- D.V. Pham, Y. Gravenstein, C. Bock, U. Kunze, D. Käfer, G. Witte, and Ch. Wöll, *AIP Conference Proceedings*, **2007**, Vol. **893**, 363. Reduced Sheet Resistance In Pentacene Field-Effect Transistors using Thiol-Modified Electrodes.
- D. Käfer, A. Bashir and G. Witte, *J. Phys. Chem. C* **2007**, **111**, 10546. Interplay of Anchoring and Ordering in aromatic Self-Assembled.
- D. Käfer and G. Witte, *Chem. Phys. Lett.* **2007**, **442**, 376. Evolution of Pentacene Films on Ag(111): growth beyond the first monolayer.
- C. Bock, D.V. Pham, U. Kunze, D. Käfer, G. Witte, A. Terfort, *Appl. Phys. Lett.* **2007**, **91**, 052110. Influence of anthracene-2-thiol treatment on the device parameters of pentacene bottom-contact transistors.
- P. Cyganik, M. Buck, Th. Strunskus, A. Shaporenko, G. Witte, M.N. Zharnikov, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. C* **2007**, **111**, 16909. Structure-Property Relationships in Self-Assembled Monolayers of Thiols: A Study on Phase Transition

Physikalische Chemie 2

- S. Ebbinghaus, S.J. Kim, M. Heyden, X. Yu, U. Heugen, M. Gruebele, D.M. Leitner, and M. Havenith, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **104** (2007), 20749-20752. An extended dynamical hydration shell around proteins
- Metzelthin, M. Havenith, *Molecular Physics* **105** (2007), 3025-3027. Observation of the $R(0.5) \ ^2\Pi_{1/2}$ transition of $^{15}\text{N}^{18}\text{O}$ in helium nanodroplets
- M. Havenith, *Hydrogen-Transfer Reactions* **1** (2007), 33-51. Coherent proton tunneling in hydrogen bonds of isolated molecules: carboxylic dimers
- M. Havenith, *Nachrichten der Chemie* (November 2007). Das Terahertz-Fenster öffnet sich: Ein neuer Blick auf schwingende Gerüste und tanzende Wassermoleküle
- M. Ortlieb, Ö. Birer, M. Letzner, G.W. Schwaab, M. Havenith, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007), 12192-12199. Observation of Rovibrational Transitions of HCl, (HCl)₂, and H₂O-HCl in Liquid Helium Nanodroplets
- Gutberlet, G.W. Schwaab and M. Havenith, *Chem. Phys.* **in press** (2007), doi: 10.1016/j.chemphys.2007.08.025. High resolution IR spectroscopy of the carbonyl stretch of (DCOOD)₂
- M. Ortlieb, M. Havenith, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007), 7355-7363 (part of the Roger Miller memorial issue). Proton transfer in (HCOOH)₂: An IR-high resolution spectroscopic study of the antisymmetric C-O stretch

- I. Kopf, J.S. Samson, G. Wollny, Ch. Grunwald, E. Bründermann, and M. Havenith, *J. Phys. Chem. C* **111** (2007), 8166-8171. Chemical Imaging of Microstructured Self-Assembled Monolayers with Nanometer Resolution
- G.W. Schwaab, K. Schroeck, M. Havenith *Phys. Rev. A* **75** (2007), 032522/1-032522/6. Amplification of Terahertz pulses in gases beyond thermodynamic equilibrium
- S. Rudolph, G. Wollny, K. von Haeften, and M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **126** (2007) 124318. Probing Collective Excitations in Helium Nanodroplets: Observation of Phonon Wings in the Infrared Spectrum of Methane
- K. Kleinermanns, M. Havenith, Th. Koop, *Nachrichten aus der Chemie* **55** (2007), 285-288. Physikalische Chemie des Wassers
- M. Havenith, **1** (2007), 33-53, edited by J.T. Hynes, J.P. Klinman, H.-H. Limbach, R.L. Schowen, Wiley-VCH. Coherent proton tunneling in hydrogen bonds of isolated molecules: carboxylic dimers Hydrogen-Transfer Reactions
- H. Weingärtner, P. Sasisanker, C. Dagenet, P. J. Dyson, I. Krossing, J. M. Slattery, T. Schubert, *J. Phys. Chem. B*, **111** (2007) 4775-4780. The dielectric response of room-temperature ionic liquids: Effect of cation variation.
- C. Schröder, C. Wakai, H. Weingärtner, O. Steinhauser, *J. Chem. Phys.*, **126** (2007) 084511/1-084511-13. Collective rotational dynamics of ionic liquids. A computational and experimental study of 1-butyl-3-methyl-imidazolium tetrafluoroborate.
- A. Wulf, R. Ludwig, P. Sasisanker, H. Weingärtner, *Chem. Phys. Lett.*, **439** (2007) 323-326. Molecular reorientation in ionic liquids: a comparative dielectric and magnetic relaxation study.
- A. Oleinikova, H. Weingärtner, M. Cahplin, E. Diemenann, H. Boegge, A. Müller, *Chem. Phys. Chem.*, **8** (2007) 646-649. Self-association based on interfacial structured water leads to $\{\text{Mo}_{154}\}_{\approx 1165}$ super clusters. A dielectric study.
- D. Constantinescu, H. Weingärtner, C. Herrmann, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46** (2007) 8887-8889. Protein denaturation by ionic liquids and the Hofmeister series: A case study of aqueous solutions of ribonuclease A.

Analytische Chemie

- S. Schäfer, W. S. Sheldrick, *J. Organomet. Chem.* **692** (2007) 1300 - 1309. Coligand tuning of the DNA binding properties of half-sandwich organometallic intercalators: influence of the polypyridyl (pp) and monodentate ligands ($\text{L} = \text{Cl}$, $(\text{NH}_2)_2\text{CS}$, $(\text{NMe}_2)_2\text{CS}$) on the DNA interaction of $(\eta^5\text{-pentamethylcyclopentadienyl})\text{iridium(III)-dipyridoquinoxaline}$ and $\text{-dipyridophenazine}$ complexes.
- Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **633** (2007) 529 - 532. Solvothermal synthesis and structures of the dimeric and polymeric hexaselenidomanganese(II) complexes $[\{\text{Mn}(\text{Se}_6)(\text{tren})\}_2]$ and $[\text{Mn}(\text{Se}_6)(\text{tren})]_2$.
- S. Schäfer, I. Ott, R. Gust, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2007) 3034 - 3046. Influence of the polypyridyl (pp) ligand size on the DNA binding properties, cytotoxicity and cellular uptake of organoruthenium(II) complexes of the type $[(\eta^6\text{-C}_6\text{Me}_6)\text{Ru}(\text{L})(\text{pp})]^{n+}$ ($\text{L} = \text{Cl}$, $n = 1$; $\text{L} = (\text{NH}_2)_2\text{CS}$, $n = 2$).

- J. Will, A. Kyas, W. S. Sheldrick, D. Wolters, *J. Biol. Inorg. Chem.* **12** (2007) 883 - 894. Identification of (η^6 -arene)ruthenium(II) protein binding sites in *E. coli* cells by combined multidimensional liquid chromatography and ESI tandem mass spectrometry: specific binding of [$(\eta^6$ -p-cymene)RuCl₂(DMSO)] to stress-regulated proteins and to helicases.
- D. Maity, J. Marek, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, M. Ali, *Mol. Catal.* **A270** (2007) 153 - 159. Synthesis, crystal structure and catalytic oxidation of aromatic hydrocarbons by oxovanadium(V) complexes of aminebis(phenolate) ligands.
- J. Chakraborty, N. Shaikh, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, P. Vojtišek, P. Banerjee, *Struct. Chem.* **18** (2007) 157 - 164. Synthesis, crystal and molecular structure of coordination polymers constructed by self-assembly of NiN₄ cores with 2,2'-iminodibenzoate and nitroprusside ions.
- S. Basu, R. Acharyya, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, S. Bhattacharya, *Struct. Chem.* **18** (2007) 209 - 215. Synthesis, structure and electrochemical properties of some thiosemicarbazone complexes of iridium.
- Kromm, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E63** (2007) m537 - m539. Bis(1,4,7-triazacyclononane)manganese(II)di- μ_2 -diselenido-bis[selenidoarsenate(III)].
- M. Scharwitz, T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E63** (2007) m105 - m107. Carbonyl(diethyldithiocarbamato)(η^5 -pentamethylcyclopentadienyl)iridium(III) trifluoromethanesulfonate.
- M. Scharwitz, T. van Almsick, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E63** (2007) m230 - m232. S-Methylcysteinato(η^5 -pentamethylcyclopentadienyl)-iridium(III) trifluoromethanesulfonate.
- Ray, D. Dutta, P. C. Mondal, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, M. Ali, *Polyhedron* **26** (2007) 1012 - 1022. Synthesis, crystal structure, electrochemical and kinetic studies on a cyano-bridged Cu^{II}-Ni^{II}-Cu^{II} hetero-trinuclear complex.
- D. Mishra, S. Naskar, S. K. Chattopadhyay, A. Barbieri, F. F. Barigelletti, M. G. B. Drew, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *Inorg. Chim. Acta* **360** (2007) 2231 - 2344. Tuning of the redox potential and visible absorption band of ruthenium(II) complexes of benzimidazolyl derivatives: synthesis, characterization, spectroscopic and redox properties, X-ray structures and DFT calculations.
- J. Chakraborty, M. Nandi, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, L. Sorace, A. Bhaumik, P. Banerjee, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2007) 5033 - 5044. Nickel complexes with N₂O donor ligands: synthesis, structures, catalysis and magnetic studies.
- M. Scharwitz, I. M. Oppel, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E63** (2007) m2065 - u395. Bis[(diethyldithiocarbamato)(η^5 -pentamethylcyclopentadienyl)iridium(III)] Bis(perchlorate).
- J. Chakraborty, P. Roy, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, P. Banerjee, *Polyhedron* **26** (2007) 3609 - 3616. Synthesis, crystal structures and magnetic properties of three Ni(II) complexes having an NiN₄ core with argentocyanide, terephthalate and dicyanamide ions: from discrete molecules to a helical network.

- T. Kolev, B. B. Koleva, M. Spiteller, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 10084 - 10089. 2-Amino-4-nitroaniline, a known compound with unexpected properties.
- D. Maity, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, M. Ali, *Ind. J. Chem.* **46** (2007) 1057 - 1062. Synthesis, crystal structure and fluorescence studies of two manganese(III) complexes of aminebis(phenolate) ligands.
- Koleva, T. Tsanev, T. Kolev, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E63** (2007) o3356 - u2030. 3,4-Diaminopyridinium hydrogensquarate.
- J. Will, D. Wolters, W. S. Sheldrick, *J. Biol. Inorg. Chem.* **12** (2007) P093. Multidimensional LC-ESI MS/MS analysis of protein targets for cisplatin and $[(\eta^6\text{-p-cymene})\text{RuCl}_2(\text{DMSO})]$ in human blood serum and *E. coli* cells.
- M. Harlos, M. Scharwitz, I. Ott, R. Gust, W. S. Sheldrick, *J. Biol. Inorg. Chem.* **12** (2007) P233. Influence of the heteroaromatic ligand size on the DNA binding properties and cytotoxicity of polypyridyl rhodium(III) and iridium(III) complexes.
- S. Hazra, S. Naskar, D. Mishra, S. I. Gorelsky, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, S. K. Chattopadhyay, *Dalton Trans.* (2007) 4143 - 4148. Synthesis, X-ray crystal structure and DFT calculations of bis (N-(2-picolylpicolinamido)Mn(II) hexafluorophosphate.
- R. Bieda, W. S. Sheldrick, *Acta Cryst.* **E63** (2007) m2473 - u355. *fac*-Trichloridotris(pyrazole)rhodium(III).
- S. B. Artemkina, N. G. Naumov, Y. V. Mironov, W. S. Sheldrick, A. V. Virovets, D. Fenske, *Russ. J. Coord. Chem.* **33** (2007) 867 - 875. Electroneutral coordination frameworks based on octahedral $[\text{Re}_6(\mu_3\text{-Q})_8(\text{CN})_6]^{4+}$ complexes (Q = S, Se, Te) and the Mn^{2+} cations.
- W. S. Sheldrick, M. Harlos, R. Gust, I. Ott, Europäische Patentanmeldung EP 03 150 276.9. (2007). Octahedral metal(III) polypyridyl complexes and their use in prevention and treatment of cancer.
- W. Xia, X. Chen, S. Kundu, Y. Wang, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Surf. Coat. Technol.* **201** (2007) 9232–9237. Growth of carbon nanofibers on carbon nanotubes catalyzed by electrodeposited iron.
- N. Li, X. Chen, L. Stoica, W. Xia, J. Qian, J. Aßmann, W. Schuhmann, M. Muhler, *Adv. Mater.* **19** (2007) 2957-2960. The catalytic synthesis of three-dimensional hierarchical carbon nanotube composites with high electrical conductivity based on electrochemical iron deposition
- A. Schulte, W. Schuhmann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 8760-8777. Single-Cell Microelectrochemistry. *Angew. Chem.* **119** (2007) 8914-8933. Mikroelektrochemie an einzelnen Zellen. (DOI: 10.1002/anie.200604851)
- K. Eckhard, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **53** (2007) 1164-1169. Localised visualisation of O_2 consumption and H_2O_2 formation by means of SECM for the characterisation of fuel cell catalyst activity
- B. Ngounou, E. H. Aliyev, D. A. Guschin, Y. M. Sultanov, A. A. Efendiev, W. Schuhmann; *Bioelectrochem.* **71** (2007) 81-90. Parallel synthesis of libraries of anodic

and cathodic functionalized electrodeposition paints as immobilization matrix for amperometric biosensors

- N. Li, J. Assmann, W. Schuhmann, M. Muhler, *Anal. Chem.* **79** (2007) 5674-5681. Spatially resolved characterization of catalyst-coated membranes by distance-controlled scanning mass spectrometry utilizing catalytic methanol oxidation as gas-solid probe reaction
- W. Xia, X. Chen, S. Kundu, Y. Wang, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Surface and Coatings Technology* **201** (2007) 9232–9237. Chemical vapor synthesis of secondary carbon nanotubes catalyzed by iron nanoparticles electrodeposited on primary carbon nanotubes
- H. B. Yildiz, J. Castillo, D. A. Guschin, L. Toppare, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **159** (2007) 27-34 . A phenol biosensor based on the electrochemically controlled integration of tyrosinase in a redox polymer
- R. Szamocki, A. Velichko, F. Mücklich, S. Reculosa, S Ravaine, S. Neugebauer, W. Schuhmann, R. Hempelmann, A. Kuhn, *Electrochem. Commun.* **9** (2007) 2121-2127. Improved enzyme immobilization for enhanced bioelectrocatalytic activity of porous electrodes
- K. Karnicka, K. Eckhard, D. A. Guschin, L. Stoica, P. J. Kulesza, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **9** (2007) 1998-2002. Visualisation of the local bio-electrocatalytic activity in biofuel cell cathodes by means of redox competition scanning electrochemical microscopy (RC-SECM)
- K. Eckhard, C. Kranz, H. Shin, B. Mizaikoff, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **79** (2007) 5435-5438. Frequency dependence of the electrochemical activity contrast in AC-SECM and AFM-AC-SECM imaging
- K. V. Dmytruk, O. V. Smutok, O. B. Ryabova, G. Z. Gayda, V. A. Sibirny, W. Schuhmann, M. V. Gonchar, A. A. Sibirny, *BMC Biotechnology* **7** (2007) 33. Isolation and characterization of mutated alcohol oxidases from the yeast *Hansenula polymorpha* with decreased affinity toward substrates and their use as selective elements of an amperometric biosensor. (<http://www.biomedcentral.com/1472-6750/7/33>)
- K. Eckhard, M. Etienne, A. Schulte, W. Schuhmann; *Electrochem. Commun.* **9** (2007) 1793-1797. Constant-distance mode AC-SECM for the visualisation of corrosion pits
- K. Eckhard, H. Shin, B. Mizaikoff, W. Schuhmann, C. Kranz, *Electrochem. Commun.* **9** (2007) 1311–1315. Alternating current (AC) impedance imaging with combined atomic force scanning electrochemical microscopy (AFM-SECM)
- X. Chen, N. Li, K. Eckhard, L. Stoica, W. Xia, J. Aßmann, M. Muhler, W. Schuhmann, *Electrochem. Commun.* **9** (2007) 1348–1354. Pulsed electrodeposition of Pt nanoclusters on carbon nanotube-modified carbon materials using diffusion restricting viscous electrolytes
- C. Lau, S. Borgmann, M. Maciejewska, B. Ngounou, P. Gründler, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **22** (2007) 3014–3020. Improved specificity of reagentless amperometric PQQ-sGDH glucose biosensors by using indirectly heated electrodes

- D. Schäfer, M. Maciejewska, W. Schuhmann, *Biosensors & Bioelectronics* **22** (2007) 1887-1895. SECM visualization of spatial variability of enzyme-polymer spots. 1. Discretisation and interference elimination using artificial neural networks
- D. Ruhlrig, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **19** (2007) 191-199. Spatial imaging of Cu^{2+} -ion release by combining alternating current and underpotential stripping mode scanning electrochemical microscopy.
- M. Etienne, P. Dierkes, T. Erichsen, W. Schuhmann, I. Fritsch, *Electroanalysis* **19** (2007) 318-323. Constant-distance mode scanning potentiometry. High resolution pH measurements in three-dimensions.
- A. Schulte, W. Schuhmann, in "Electrochemical Methods for Neuroscience" (A.C. Michael, L.M. Borland, eds.), CRC Press, 2007. (ISBN: 9780849340758). Scanning Electrochemical Microscopy as a Tool in Neuroscience
- S. Isik, J. Castillo, A. Blöchl, E. Csöregi, W. Schuhmann, *Bioelectrochem.* **70** (2007) 173-179. Simultaneous detection of l-glutamate and nitric oxide from adherently growing cells at known distance using disk shaped dual electrodes
- M. Bron, D. Teschner, A. Knop-Gericke, F.C. Jentoft, J. Kröhnert, J. Hohmeyer, C. Volckmar, B. Steinhauer, R. Schlögl, P. Claus, *Phys.Chem.Chem.Phys.* **9** (2007) 3559-3569. Silver as acrolein hydrogenation catalyst: Intricate effects of catalyst nature and reactant partial pressures. (Invited article)
- S. Fiechter, I. Dorbandt, P. Bogdanoff, M. Bron, J. Radnik, M. Fieber-Erdmann, *J. Phys. Chem. C* **111** (2007) 477-487. Surface modified ruthenium nanoparticles: structural investigation and surface analysis of a novel catalyst for oxygen reduction.
- F. Haass, M. Bron, H. Fuess, P. Claus, *Appl. Catal. A* **318** (2007) 9-16. In situ X-ray investigations on AgIn/SiO_2 hydrogenation catalysts.

Theoretische Chemie

- E. Schreiner, N.N. Nair, R. Pollet, V. Staemmler, D. Marx, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** (2007) 20725-20730. Dynamical magnetostructural properties of *Anabaena* ferredoxin. see also coverage in the media: Magnetische Effekte in Eisen-Schwefel Proteinen Chemie.DE Information Service GmbH: <http://www.chemie.de/news/d/76026/> (21.12.2007)
- M. Masia, H. Forbert, D. Marx, *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 12181-12191; part of the "Giacinto Scoles Festschrift". Connecting Structure to Infrared Spectra of Molecular and Autodissociated HCl -Water Aggregates
- M. Böckmann, C. Peter, L. Delle Site, N.L. Doltsinis, K. Kremer, D. Marx, *J. Chem. Theory Comput.* **3** (2007) 1789-1802. Atomistic Force Field for Azobenzene Compounds Adapted for QM/MM Simulations with Applications to Liquids and Liquid Crystals
- A. Chandra, M.E. Tuckerman, D. Marx, *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 145901-1 -- 145901-4 Connecting Solvation Shell Structure to Proton Transport Kinetics in Hydrogen-Bonded Networks via Population Correlation Functions

- R. Kovacik, B. Meyer, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 4894-4897. Centers versus Dimer Vacancies on ZnO Surfaces: Characterization by STM and STS Calculations. *Angew. Chem.* **119** (2007) 4980-4984. F-Zentren versus Dimerleerstellen auf ZnO-Oberflächen: Charakterisierung durch STM- und STS-Rechnungen
- A. Chandra and D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 3676-3679. Creating Interfaces by Stretching the Solvent Is Key to Metallic Ammonia Solutions. *Angew. Chem.* **119** (2007) 3750-3753. Creating Interfaces by Stretching the Solvent Is Key to Metallic Ammonia Solutions
- R. Pollet and D. Marx, *J. Chem. Phys. (Communication)* **126** (2007) 181102-1 - 181102-3. Ab initio simulation of a gadolinium-based magnetic imaging contrast agent in aqueous solution
- G. Mathias and D. Marx, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **104** (2007) 6980-6985. Structures and spectral signatures of protonated water networks in bacteriorhodopsin. see also coverage in the media: V. Helms: *Physik Journal* **6(6)** (2007) 22-23. WLAN für die Zelle. *Chemie.DE Information Service GmbH*: www.bionity.com/news/d/63769/ (19.04.2007) Wie Protonen durch die Zellmembran wandern. *GIT Labor-Fachzeitschrift* **51(6)** (2007) 455. Protonenwanderung: Wasser spielt eine funktionelle Rolle
- K. Katsiev, M. Batzill, U. Diebold, A. Urban, B. Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 186102. Growth of One-dimensional Pd Nanowires on the Terraces of a Reduced SnO₂(101) Surface
- Y. Umeno, C. Elsässer, B. Meyer, P. Gumbsch, M. Nothacker, J. Weissmüller, F. Evers, *Europhys. Lett.* **78** (2007) 13001. Ab initio study of surface stress response to charging
- Y. Wang, R. Kovacik, B. Meyer, K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, H. Qui, F. Traeger, D. Langenberg, M. Muhler, Ch. Wöll, *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 5624. CO₂ Activation by ZnO via Formation of an Unusual Tridentate Surface Carbonate. *Angew. Chem.* **119** (2007) 5722. CO₂-Aktivierung durch ZnO unter Bildung eines ungewöhnlichen dreizähligen Oberflächencarbonats
- A. Hellweg, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* 2007, **127**:024307. On the internal rotations in p-Cresol in its ground and first electronically excited states
- T. Fleig, S. Knecht, C. Hättig, *J. Phys. Chem. A* 2007, **111**:5482-5491. Quantum-chemical investigation of the structures and electronic spectra of the nucleic acid basis at the coupled cluster CC2 level
- C. Neiss, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* 2007, **126**:154101. Frequency-dependent nonlinear optical properties with explicitly correlated coupled-cluster response theory using the CCSD(R12) model
- D. P. Tew, W. Klopper, C. Neiss, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2007, **9**:1921-1930. Quintuple-zeta quality coupled-cluster correlation energies with triple-zeta basis sets.
- A. Hellweg, C. Hättig, S. Höfener, W. Klopper, *Theor. Chem. Acc.* 2007, **117**:587-597. Optimized accurate auxiliary basis sets for RI-MP2 and RI-CC2 calculations for the atoms Rb to Rn.

- Y. Wang, R Kováčik, B. Meyer, K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, H. Qiu, F. Traeger, D. Langenberg, M. Muhler, C. Wöll *Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007) 5624-5627. CO₂ activation by ZnO through the formation of an unusual tridentate surface carbonate
- Y. Wang, R Kováčik, B. Meyer, K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, H. Qiu, F. Traeger, D. Langenberg, M. Muhler, C. Wöll *Angew. Chem.* **119** (2007) 5722-5725. CO₂–Aktivierung durch ZnO unter Bildung eines ungewöhnlichen dreizähligen Oberflächencarbonats
- R. Caputo, B. P. Prascher, V. Staemmler, P. S. Bagus, C. Wöll *J. Phys. Chem. A* **111** (2007) 12778-12784. Adsorption of benzene on coinage metals: A theoretical analysis using wavefunction-based methods
- W. Kutzelnigg, *J. Comput. Chem.* **28** (2007) 25-34. What I like about Hückel theory
- W. Liu, W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **126** (2007) 114107. Quasirelativistic theory. II Theory at matrix level
- W. Kutzelnigg, *J. Chem. Phys.* **126** (2007) 201103. Completeness of a kinetically balanced Gaussian basis
- W. Kutzelnigg, D. Mukherjee, *Adv. Chem. Phys.* **134** (2007) 293. Generalized Normal Ordering. Irreducible Brillouin Conditions and Contracted Schrödinger equations. Reduced Density Matrix Mechanics (D. Mazziotti ed.) Wiley, NJ
- W. Kutzelnigg, *Mol. Phys.* **105** (2007) 2627-2647. Which masses are vibrating or rotating in a molecule?

Technische Chemie

- W. Xia, Y. Wang, V. Hagen, A. Heel, G. Kasper, U. Patil, A. Devi, M. Muhler, *Chem. Vap. Dep.* **13** (2007) 37-41. The Synthesis of ZrO₂/SiO₂ Nanocomposites by the Two-Step CVD of a Volatile Halogen-Free Zr Alkoxide in a Fluidized-Bed Reactor.
- B.R. Reddy, P. Bharali, P. Saikia, A. Khan, S. Loidant, M. Muhler, W. Grünert, *J. Phys. Chem. C* **111** (2007) 1878-1881. Hafnium Doped Ceria Nanocomposite Oxide as a Novel Redox additive for Three-Way Catalysts.
- B. Rohe, R. Weiss, S. Vukojevic, C. Baltes, M. Muhler, M. Tausch, M. Epple, *J. Inorg. Chem.* (2007) 1723-1727. CuO/ZnO Nanoparticles in a Matrix of Amorphous Silica as High-Surface Precursors of Methanol Synthesis.
- X. Xinyu, R. Naumann d'Alnoncourt, J. Strunk, S. Litvinov, M. Muhler, *Appl. Surf. Sci.* **253** (2007) 5851-5855. Isothermal adsorption kinetics on heterogeneous surfaces.
- W. Xia, R. Naumann d'Alnoncourt, M. Muhler, *Chemie Ingenieur Technik* **6** (2007) 721-728. Die oberflächenchemische Modifikation von Kohlenstoff-Nanoröhren für die Anwendung in der heterogenen Katalyse.
- X. Xia, J. Strunk, S. Litvinov, M. Muhler, *J. Phys. Chem.* **111** (2007) 6000-6008. Influence of Re-adsorption and Surface Heterogeneity on the Microkinetic Analysis of Temperature-Programmed Desorption Experiments.

- Y. Wang, R. Kováčik, B. Meyer, K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, H. Qiu, F. Traeger, D. Langenberg, M. Muhler, C. Wöll, *Angew. Chem.* **46** (2007) 5624-5627. CO₂ Activation by ZnO through the Formation of an Unusual Tridentate Surface Carbonate.
- B. Reddy, P. Lakshmanan, P. Bharali, P. Saikia, G. Thrimurthulu, M. Muhler, W. Grünert, *J. Phys. Chem C* **111** (2007) 10478-10483. Influence of Alumina Silica, and Titania Supports on the Structure and CO Oxidation Activity of Ce_xZr_{1-x}O₂ Nanocomposite Oxides.
- Y. Wang, X. Xia, A. Urban, H. Qiu, J. Strunk, B. Meyer, M. Muhler, Ch. Wöll, *Angew. Chem.* **119** (2007) 7456-7459. Die Steuerung der Reaktivität von Oxidoberflächen durch ladungsakzeptierende Adsorbate.
- Y. Wang, X. Xia, A. Urban, H. Qiu, J. Strunk, B. Meyer, M. Muhler, Ch. Wöll, *Angew. Chem.* **46** (2007) 7319-7323. Tuning the Reactivity of Oxide Surfaces by Charge-Accepting Adsorbates.
- W. Xia, Y. Chen, S. Kundu, X. Wang, G. Grundmeier, Y. Wang, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Surf. & Coat. Techn.* **201** (2007) 9232-9237. Chemical vapor synthesis of secondary carbon nanotubes catalyzed by iron nanoparticles electrodeposited on primary carbon nanotubes.
- R. Naumann d'Alnoncourt, M. Becker, J. Sekulic, R. A. Fischer, M. Muhler, *Surf. & Coat. Techn.* **201** (2007) 9035-9040. The preparation of Cu/Al₂O₃ catalysts via CVD in a fluidized-bed reactor.
- N. Li, J. Assmann, W. Schuhmann, M. Muhler, *Anal. Chem.* **79** (2007) 5674-5681. Spatially Resolved Characterization of Catalyst-Coated Membranes by Distance-Controlled Scanning Mass Spectrometry Gas-Solid Probe Reaction.
- W. Xia, Y. Wang, R. Bergsträßer, S. Kundu, M. Muhler, *Appl. Surf. Sci.* **254** (2007) 247-250. Surface characterization of oxygen-functionalized multi-walled carbon nanotubes by high-resolution X-ray photoelectron spectroscopy and temperature-programmed desorption.
- X. Xia, W. Busser, J. Strunk, M. Muhler, *Langmuir* **23** (2007) 11063-11066. Thermodynamics of Carbon Monoxide Adsorption on Polycrystalline Titania Studied by Static Adsorption Microcalorimetry.
- H. Over, M. Muhler, A.P. Seitsonen, *Surf. Sc.* **601** (2007) 5659-5662. Comment on „CO oxidation on ruthenium: The nature of the active catalytic surface“ by D.W. Goodman, C.H.F. Peden, M.S. Chen.
- W. Xia, V. Hagen, S. Kundu, Y. Wang, C. Somsen, G. Eggeler, G. Sun, G. Grundmeier, M. Stratmann, M. Muhler, *Adv. Mater.* **19** (2007) 3648-3652. Controlled Etching of Carbon Nanotubes by Iron-Catalyzed Steam Gasification.
- N. Li, X. Chen, L. Stoica, W. Xia, J. Qian, J. Aßmann, W. Schuhmann, M. Muhler, *Adv. Mater.* **19** (2007) 2957-2960. The Catalytic Synthesis of Three-Dimensional Hierarchical Carbon Nanotube Composites with High Electrical Conductivity Based on Electrochemical Iron Deposition.
- X. Xia, R. Naumann d'Alnoncourt, M. Muhler, *J. Therm. Anal. Cal.* **91** (2007) 167-172. Entropy of adsorption of carbon monoxide on energetically heterogeneous surfaces.

- A. de Toni, M. Schwidder, A. Brückner, W. Grünert, *Chemie-Ing. Techn.*, **79** (2007) 871-877. Zentrenstruktur und Vergiftungswirkungen bei der selektiven katalytischen Reduktion von NO mit Ammoniak an Fe-ZSM-5 – Katalysatoren
- Yu. V. Guryev, I. I. Ivanova, V. V. Lunin, W. Grünert, M. W. E. van den Berg, *Appl. Catal. A* **329** (2007) 26. Characterization of Metal Segregation in Pt-Re/Al₂O₃ Reforming catalysts
- E. Berrier, O. Ovsitser, E. V. Kondratenko, M. Schwidder, W. Grünert, A. Brückner, *J. Catal.* **249** (2006) 67-78. Temperature-dependent N₂O decomposition over Fe-ZSM-5: Identification of sites with different activity
- M. Reichinger, H. Gies, M. van den Berg, W. Grünert, Chr. Kirschhock, *Stud. Surf. Sci. Catal.* **170** (2007), 276-28. Micro-meso materials from TS-1 seeds: Structure - Properties
- M. W. E. van den Berg, S. Hermes, F. Schröter, M. Czokoja, R. A. Fischer, M. Muhler, and W. Grünert, *Hasylab report*, 2007. XAFS of MOF-5 encapsulated nanoparticles
- W. Grünert, *Chem.-Ing.-Techn.* **79** (2007) 7479-7480. „Industrial Catalysts – A Practical Approach“ von Jens Hagen (Wiley-VCH Weinheim 2006): Buchrezension

Biochemie 1

- Z.-L. Ma, M. Werner, C. Körber, I. Joshi, M. Hamad, P. Wahle, M. Hollmann, *J. Neurosci. Res.* **85**(1) (2007) 99-115. Quantitative analysis of co-transfection efficiencies in studies of ionotropic glutamate receptor complexes.
- S. Kott, M. Werner, C. Körber, M. Hollmann, *J. Neurosci.* **27**(14) (2007) 3780-3789. Electrophysiological properties of AMPA receptors are differentially modulated dependent on the associated member of the TARP family. Pressemitteilung: <http://www.pm.ruhr-uni-bochum.de/pm2007/msg00156.htm>
- C. Körber, M. Werner, J. Hoffmann, C. Sager, M. Tietze, S.M. Schmid, S. Kott, M. Hollmann, *J. Biol. Chem.* **282**(26) (2007) 18758-18766. Stargazin interaction with AMPA receptors is critically dependent on the amino acid at the narrow constriction of the ion channel.
- C. Körber, M. Werner, S. Kott, Z.-L. Ma, M. Hollmann, *J. Neurosci.* **27**(31) (2007) 8442-8447. The transmembrane AMPA receptor-regulatory protein $\gamma 4$ is a far more efficient modulator of the electrophysiological properties of AMPA receptors than stargazin ($\gamma 2$).
- S.M. Schmid, C. Körber, M. Werner, M. Hollmann, *J. Neurosci.* **27**(45) (2007) 12230-12241. AMPA receptor gating is controlled by short segments linking the ligand binding domain to the ion pore. Pressemitteilung: <http://www.pm.ruhr-uni-bochum.de/en2007/msg00329.htm>
- R.W. Teichert, E.C. Jimenez, V. Twede, M. Watkins, M. Hollmann, G. Bulaj, B. Olivera, *J. Biol. Chem.* **282**(51) (2007) 36905-36913. Novel conantokins from *Conus parvus* venom are specific antagonists of NMDA receptors.

- C. Schmidt, M. Hollmann, *J. Mol. Biol.* **376** (published electronically in advance, Dec. 8, 2007). Apparent homomeric NR1 currents observed in *Xenopus* oocytes are caused by an endogenous NR2 subunit.
- S.M. Schmid, M. Hollmann, *Channels* **1**(6) (2007) 404-407. What does it take to gate AMPA receptors?
- E. Guschina, B.J. Benecke, *Biochim. Biophys. Acta* 2007, [Epub ahead of print]. Specific and non-specific mammalian RNA terminal uridylyl transferases
- A. R. Gruber, D. Koper-Emde, M. Marx, H. Tafer, S. Bernhart, G. Obermosterer, A. Mosig, I.L. Hofacker, P.F. Stadler, B.J. Benecke, *J. Mol. Evol.* 2007, [Epub ahead of print]. Invertebrate 7S K RNAs.

Biochemie 2

- Sandoval, M., Sandoval, R., Thomas, U., Spilker, C., Smalla, KH., Falcon, R., Marengo, JJ., Calderon R., Saavedra, V., Heumann, R., Bronfman, F., Garner CC., Gundelfinger, ED., Wynecken, U., *J Neurochem.* 2007, 1672-1684. Antagonistic effects of TrkB and p75(NTR) on NMDA receptor currents in post-synaptic densities transplanted into *Xenopus* oocytes
- Sokolova, V., Kovtun, A., Heumann, R., Epple, M., *Journal of Biological Inorganic Chemistry, J Biol Inorg Chem.* 2007, 174 – 179. Tracking the pathway of calcium phosphate/DNA nanoparticles during cell transfection by incorporation of red-fluorescing TRITC-BSA into these nanoparticles
- Sokolova, V., Kovtun, A., Prymak, O., Meyer-Zaika, W., Kubareva, E.A., Romanova, E.A., Oretskaya, T.S., Heumann, R., Epple, M., *Journal of Materials Chemistry* 2007, 721 – 727. Functionalisation of calcium phosphate nanoparticles by oligonucleotides and their application for gene silencing
- P. Happel, F. Wehner, I.D. Dietzel. In: *Modern Research and Educational Topics in Microscopy, Microscopy Series n° 3*, Vol. 2, Ed: A. Méndez-Vilas, J. Díaz, Formatex, Badajoz (2007) pp 968-975. Scanning ion conductance microscopy – a tool to investigate electrolyte-nonconductor interfaces.
- K. Chakrabarty, T. Serchov, S.A. Mann, I.D. Dietzel, R. Heumann *Eur. J. Neurosci*, **25** (2007) 1971-1981. Enhancement of dopaminergic properties and protection mediated by neuronal activation of Ras in ventral mesencephalic neurons
- S. Wagner, C. Heseding, C. Szlachta, J.R. True, H. Prinz, B.T. Hovemann, *J. Comp. Neurol.* (2007). *Drosophila* photoreceptors express cysteine peptidase Tan
- J. Borycz, J.A. Borycz, S. Wagner, R. Romero-Calderon, B.T. Hovemann, D.E. Krantz, I.A. Meinertzhagen, (2007) Effects of the Vesicular Monoamine Transporter Inhibitor Reserpine on the Head Contents of Biogenic Amines in *Drosophila*, SFN **37** Annual Meeting, San Diego, 879.17/H9
- C. Berghaus, M. Schwarten, R. Heumann & R. Stoll, *Biomol. NMR Assgn.* **1** (2007), 45-47. Sequence-specific ¹H, ¹³C, and ¹⁵N backbone assignment of the GTPase rRheb in its GDP-bound form.

- M. Schwarten, C. Berghaus, R. Heumann & R. Stoll, *Biomol. NMR Assgn.* **1** (2007), 105-108. Sequence-specific ^1H , ^{13}C , and ^{15}N backbone assignment of the activated 21 kDa GTPase rRheb.
- R. Stoll, B.M. Lee, E.W. Debler, J.H. Laity, I.A. Wilson, H.J. Dyson, P.E. Wright, *J. Mol. Biol.* **372** (2007), 1227-1245. Structure of the Wilms Tumor Suppressor Protein Zinc Finger Domain Bound to DNA.
- C. P. Fetzter, J. Sauvageau, G. Kock, C. Berghaus, J.-A. Bangert, M. Dicks, R. Heumann, K.S. Erdmann, R. Stoll, *Biomol. NMR Assgn.* **1** (2007), 151-153. Sequence-specific ^1H , ^{13}C , and ^{15}N backbone assignment of the 28 kDa PDZ2/PDZ3 tandem domain of the protein tyrosine phosphatase PTP-BL.

Didaktik der Chemie

- K. Sommer, Die Fachmethoden der Chemie - Anregungen für die Umsetzung des Kompetenzbereiches „Erkenntnisgewinnung“ im Unterricht. *Praxis-Schriftenreihe Chemie*. Band **58**. Aulis Verlag, Köln 2007
- S. Flügel, K. Sommer, *RAAbits Chemie*, Raabe Verlag Stuttgart, **2007**, 20 Seiten. Inhaltsstoffe von Soft- und Energy-Getränken – Ein Schülerpraktikum.
- D. Dähnhardt, K. Sommer, M. Euler, *Unterricht Chemie* 2007, **99**, 4-10. Lust auf Naturwissenschaft und Technik
- Hüttner, R. Wieczorek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* 2007, **99**, 11-18. Rote Blätter und Fotosynthese – Das Schülerprojekt „Welche Farbstoffe in der Pflanze stecken“

Promotionen in der Fakultät für Chemie und Biochemie 01.01.2007 – 31.12. 2007

Badin, Mihaela Georgeta

Self-Assembled Monolayers on Gold Substrates made from Functionalized Thiols and Dithiols

1. Referent: Prof. Dr. Chr. Wöll

Disputation: 23.11.2007

Balakrishnan, Sangeetha

Structure and dynamics of fluids in confinement: A case study of water, protein, and ionic liquid in reverse micelles and microemulsions

1. Referent: Prof. Dr. H. Weingärtner

Disputation: 10.12.2007

Baltes, Christian

Hochdurchsatz-Untersuchungen der Synthese/Struktur/Aktivitäts-Beziehungen bei Cu/ZnO/Al₂O₃-Katalysatoren für die Methanolsynthese

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 11.10.2007

Bergsträßer, Ralf

Atomic Layer Deposition von Siliciumdioxid auf nanoskaligem Titandioxid mit Silicium-tetrachlorid als Precursor - ein kontinuierliches, katalysatorfeies und industriell umsetzbares Verfahren

1. Referent: Prof. Dr. M. Muhler

Disputation: 20.04.2007

Cokoja, Mirza

Nanometallurgy in Organic Solution: Organometallic Synthesis of Intermetallic Transition Metal Aluminide and -Zincide Nanoparticle

1. Referent: Prof. Dr. R. Fischer

Disputation: 22.06.2007

Comotti, Massimiliano

'Nano-design' as a Powerful Tool in Gold Catalyzed Oxidation Reactions

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 11.10.2007

Ebbinghaus, Simon

THz Spectroscopy of Biomolecules

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

Disputation: 23.11.1007

Eckhard, Kathrin

Hochauflösende elektrochemische Rastermikroskopie zur Visualisierung lokaler Oberflächenaktivität- Anwendung in der Korrosions- und Brennstoffzellenforschung -

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 14.06.2007

Grote, Dirk

Matrix ESR - und IR-spektroskopische Charakterisierung fluorierter Dehydrophenylnitrene und TR-ESR-Untersuchungen an Alkoxy-carbonylradikalen

1. Referent: Prof. Dr. W. Sander

Disputation: 20.12.2007

Grote-Westrick, Christian

Intrazelluläre Mechanismen der Stickstoffmonoxid-vermittelten Endothelzellwanderung

1. Referent: Prof. Dr. R. Heumann

Disputation: 24.09.2007

Guschina, Elena

Klonierung, Expression und funktionelle Analyse RNA-uridylierender Enzyme

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

Disputation: 06.06.2007

Heugen, Udo

Aufbau des THz-p-Germanium-Laser Spektrometers zur Bestimmung des Einflusses von Sacchariden auf die Wasserdynamiken im Sub-Piko-Sekunden Bereich

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

Disputation: 11.10.2007

Hohage, Oliver

Makrochelatformung und sequenzabhängige Spaltung bei den Reaktionen von Cisplatin mit methionin- und cysteinhaltigen Peptiden

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

Disputation: 07.02.2007

Jeromin, Monika

Functional studies of NMDA receptor concytemers in *Xenopus laevis* oocytes

1. Referent: Prof. Dr. M. Hollmann

Disputation: 20.04.2007

Kempter, Andreas

Coordination chemistry of the low-valent group 13 NHC-analogue Ga(DDP) (DDP = bulky bis-imidinate) to transition metal centers: Insertions, substitution reactions and cluster formation'

1. Referent: Prof. Dr. R. Fischer

Disputation: 26.09.2007

Koop, Andrea

Funktionelle Konsequenzen einer Einzelnukleotid-Polymorphismus-induzierten Mutation im humanen kardialen Ryanodinrezeptor (RyR2)

1. Referent: Prof. Dr. Roger S. Goody

Disputation: 11.07.2007

Kößmeier, Katja Tina

Strukturelle und biochemische Untersuchungen der Kernporen- und Kerntransportproteine

1. Referent: Prof. Dr. A. Wittinghofer

Disputation: 12.07.2007

Kovacik, Roman

Characterization of Catalyst Surfaces by Ab-initio Thermodynamics and STM Data Calculations

1. Referent: P.D. Dr. B. Meyer

Disputation: 08.06.2007

Kunzelmann, Simone

Molekularer Mechanismus der GTP-Hydrolyse durch das humane Guanylat-bindende Protein 1

1. Referent: Prof. Dr. Christian Herrmann

Disputation: 29.01.2007

Langenberg, Deler

Untersuchungen an verschiedenen Metalloxiden und deren Oberfläche und Wachstum metallischer Schichten

1. Referent: Prof. Dr. Chr. Wöll

Disputation: 10.09.2007

Managadze, David

Biogenesis of Microbodies in the Filamentous Fungus *Neurospora Crassa*

1. Referent: Prof. Dr. R. Erdmann

Disputation: 13.07.2007

Muratova, Nelli

Highly Distributed Copper Nanoparticles on Carbon Supports for Methanol Steam Reforming'

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 30.07.2007

Neugebauer, Sebastian

Nanoporelektrodensysteme für signalverstärkte elektrochemische DNA-Sensoren und Immunoassay

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 16.11.2007

Olejnuk, Stefan

Entwicklung einer Anlage zur Herstellung von Metalloxiden in hoher spezifischer Oberfläche

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 06.07.2007

Palkovits, Regina

Anwendungen von geordnetem mesoporösem Siliciumdioxid in der heterogenen Katalyse

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 02.02.2007

Pechlivanis, Marcos

Dissecting the prenylsensitivity of then N-Ras:hSOS1:N-Ras-interaction

1. Referent: PD Dr. J. Kuhlmann

Disputation: 02.02.2007

Pelster, Stefan

Untersuchung der Festkörperbildung von Silicaten mittels Massenspektrometrie

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 20.04.2007

Polyakov, Mykola

Entwicklung einer Anlage zur Herstellung von Metalloxiden in hoher spezifischer Oberfläche"

1. Referent: Prof. Dr. W. Grünert

Disputation: 06.07.2007

Reichinger, Markus

Poröse Silikate mit hierarchischer Porenstruktur: Synthese von mikro-/mesoporösen MCM-41 und MCM-48 Materialien aus zeolithischen Bausteinen des MFI-Gerüststrukturtyps

1. Referent: Prof. Dr. H. Gies

Disputation: 13.07.2007

Reis, Stephanie

Einfluss der FHC-verursachenden Mutation cTnI-R145G auf das Kontraktionsverhalten adulter Kardiomyocyten

1. Referent: Prof. Dr. J. Jaquet

Disputation: 13.04.2007

Röhrs, Sonja

Chronologie der Wnt-Zielgenexpression und Visualisierung des nukleären β -Catenin/TCF-Komplexes

1. Referent: P.D. Dr. Oliver Müller

Disputation: 11.05.2007

Ruhlig, Dirk

Globale und lokale elektrochemische Methoden zur Untersuchung des Korrosionsverhalten von NiTi Formgedächtnislegierungen

1. Referent: Prof. Dr. W. Schuhmann

Disputation: 09.11.2007

Rumplecker, Anja

Host-Guest Chemistry of Mesoscopically Ordered Porous Materials

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 11.05.2007

Streukens, Udo

Thermodynamische und katalytische Eigenschaften von Titan- und Cer-dotierten komplexen Aluminiumhydriden

1. Referent: Prof. Dr. F. Schüth

Disputation: 02.11.2007

Schäfer, Sven

Darstellung, DNA-Wechselwirkungen und Zytotoxizität organometallischer Intercalatoren

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

Disputation: 20.04.2007

Schreiner, Eduard

Biochemical Aspects of Iron-Sulfur Systems: Magnetostructural Properties of Ferredoxins and Prebiotic Peptide Synthesis Involving Pyrite

1. Referent: Prof. Dr. D. Marx

Disputation: 26.09.2007

Schröter, Marie-Katrin

Kolloidale Cu-Katalysatoren für die Methanolsynthese in der flüssigen Phase

1. Referent: Prof. Dr. R. Fischer

Disputation: 11.05.2007

Schulz, Frank

Monooxygenases - Experiments to Turn a Class of Enzymes into a Toolbox for Biocatalysis

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

Disputation: 27.04.2007

Taglieber, Andreas

New Reactivities of Old Enzymes

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

Disputation: 29.11.2007

Tenbusch, Matthias

Neue Impfstrategien auf der Basis von Fusionsproteinen

1. Referent: Prof. Dr. med. K. Überla

Disputation: 22.06.2007

Ternette, Nicola

Optimierung der Expression des F-Oberflächenproteins des respiratorischen Syncytialvirus zur Impfstoffentwicklung

1. Referent: Prof. Dr. med. K. Überla

Disputation: 09.02.2007

Venkataramani, Sugumar

Synthesis and Characterization of Perhydro- and Perfluoro-*tris*(dehydro)benzene Triradicals - Matrix Isolation Infrared Spectroscopic and Quantum Chemical Studies

1. Referent: Prof. Dr. W. Sander

Disputation: 07.12.2007