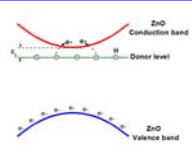
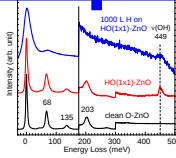
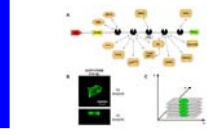
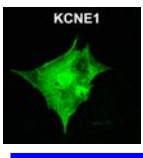
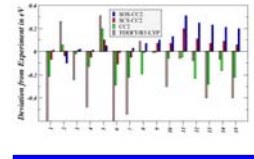
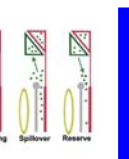
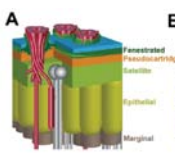
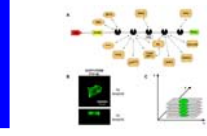
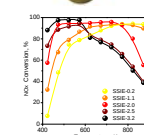
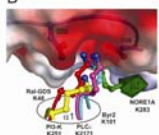
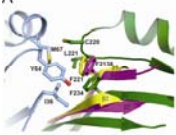
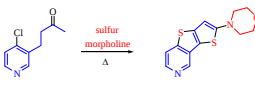
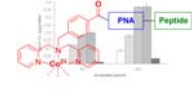
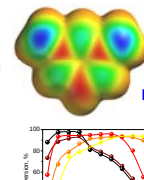
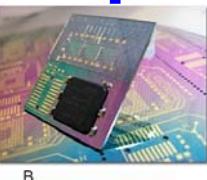
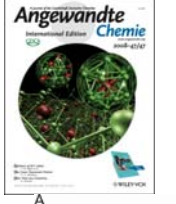
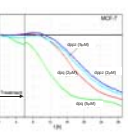
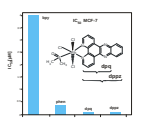
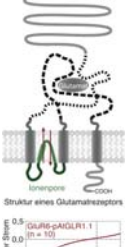
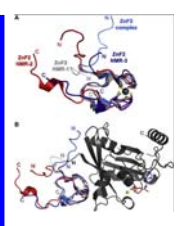
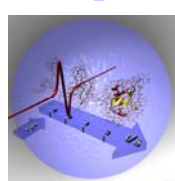
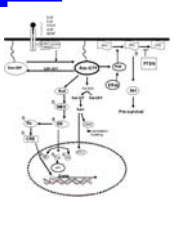
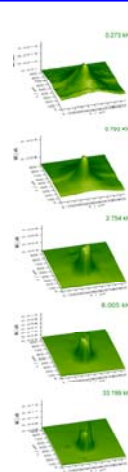
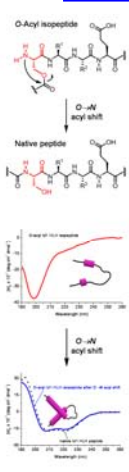
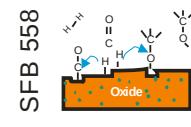
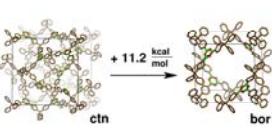
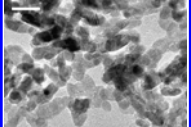
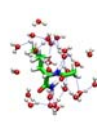
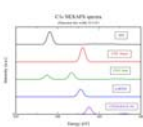
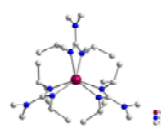


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2008



Research 2008

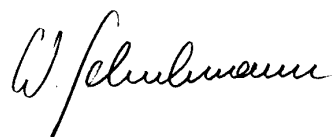
Faculty of Chemistry and Biochemistry

Ruhr-Universität Bochum

Wie in den vergangenen Jahren soll auch dieser Rückblick auf die Forschung der Fakultät für Chemie und Biochemie einen kurzen Eindruck über die Vielfältigkeit der Forschungsaktivitäten in der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum vermitteln. Wir sind stolz auf unsere Forschungsergebnisse, die in einer großen Zahl von Publikationen in international referierten Zeitschriften niedergelegt sind.

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) vertiefende Einblicke erhalten. Sicher sind die Leiter der Arbeitsgruppen auch jederzeit bereit, telephonisch oder während eines Besuches über ihre Forschungsergebnisse mit Ihnen zu diskutieren.

Bochum, den

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 1

Prof. Dr. John McCaskill	10
Prof. Dr. Chiara Cabrele	11

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	12
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	13

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christof Wöll	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 S. Sheldrick	18
Dr. Dirk Wolters	19
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)	20
Dr. Bron	21

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	22
Prof. Dr. Christof Hättig	23
Prof. (em.) Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie)	24
Dr. Jörg Behler	25
Prof. (em.) Dr. Werner Kutzelnigg	26

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	27
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	28

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	29
Prof. Dr. Guiscard Seebohm (Kationenkanäle)	30

Lehrstuhl für Biochemie 2

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

Didaktik der Chemie

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

Sonderforschungsbereich 558

Integriertes Graduiertenkolleg im Sonderforschungsbereich 558	38
Forschergruppe 618 „Die Aggregation kleiner Moleküle...“	39
Forschergruppe 630 „Biologische Funktion von Organometallverbindungen“	40

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

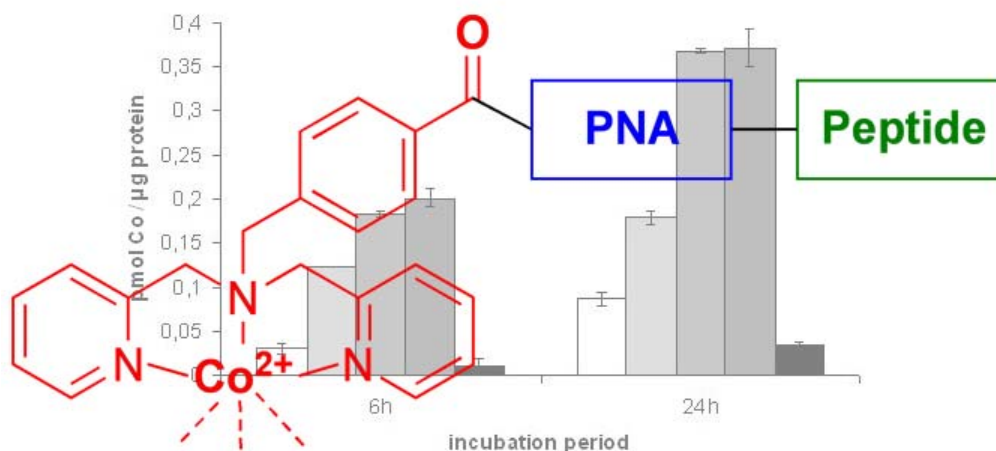
Tel.: ++49-(0)234-3224153; FAX: ++49-(0)234-3214378

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

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

S. I. Kirin, I. Ott, R. Gust, W. Mier, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 955 – 959. Synthesis of Metal Bioconjugates with Peptides and Peptide Nucleic Acids (PNA) and Study of their Cellular Uptake and Intracellular Distribution by Atomic Absorption Spectroscopy

Metallionen spielen in der biologischen Chemie eine große Rolle. Erst seit kurzem ist bekannt, daß ihre intrazelluläre Verteilung deutlich differenziert ist und von sog. Metallo-chaperonen kontrolliert wird. Im Gegensatz dazu ist praktisch nichts über intrazelluläre Gradienten und die Verteilung von Metallionen in artifiziellen Systemen, wie z. B. metallhaltigen Wirkstoffen, bekannt. In dieser Arbeit haben wir gezielt metallhaltige Peptide und Peptid-Nucleinsäuren (peptide nucleic acids, PNA) hergestellt und ihre Aufnahme und *intrazelluläre* Verteilung in Krebszellen mittels Atom-Absorptions-spektroskopie (AAS) untersucht. Da die AAS eine spezifische und quantitative Detektion der Metallionen gestattet öffnet diese Methode ein "anorganisches" Fenster auf Fragen von fundamentaler Relevanz für die biologische und medizinische Chemie.



Metal ions play a pivotal role in biological chemistry. It has only recently been recognized that *intracellular* concentrations are not uniform but distinct differences exist. Moreover, not only the uptake but also intracellular trafficking are tightly regulated by so-called metallo-chaperones. In contrast to this cellular machinery, the issue of intracellular gradients and directed delivery has been almost neglected in artificial metal-containing systems, including almost all metal-based drugs and drug-delivery systems. In this work, metal-peptide and metal-peptide nucleic acid (PNA) conjugates were prepared specifically for directed intracellular delivery. Atomic Absorption Spectroscopy (AAS) was employed to quantify accurately the cellular uptake of these metal bioconjugates. Because AAS is specific and sensitive for metal ions, this work opens an "inorganic" window to address questions of fundamental relevance for biological and medicinal chemistry.

S.-F. Tang, A. Babai, A.-V. Mudring, *Angew. Chem. Int. Ed.* **120** (2008) 7631. Low melting europium ionic liquids as luminescent soft materials.

B. Mallick, B. Balke, C. Felser, A.-V. Mudring, *Angew. Chem. Int. Ed.* **120** (2008) 7635. Dysprosium room temperature ionic liquids exhibiting strong luminescence and response to magnetic fields.

Ionische Flüssigkeiten (IFs) haben in den letzten Jahren beträchtliche Aufmerksamkeit erregt. Viele der ihnen zueigenen Eigenschaften wie ein vernachlässigbarer Dampfdruck, weiter Flüssigkeitsbereich, gute thermische Stabilität und Leitfähigkeit, ein breites elektrochemisches Fenster sind vorteilhaft für viele Anwendungen. Als Salze bestehen IFs aus Ionen und können für eine bestimmte Anwendung über die Kation-Anion-Kombination maßgeschneidert werden. Metall-basierte IFs sind viel versprechende neue Materialien, da in ihnen die Eigenschaften von IFs mit magnetischen, optischen und katalytischen Eigenschaften, die vom Metall-Kation stammen, kombiniert werden können. Durch den Einsatz eines komplexen Eu(III)-Anions gelang uns die Synthese der ersten lumineszierenden Ionischen Flüssigkeit. Allerdings sind dreiwertige Lanthanid-Verbindungen nicht nur wegen ihre optischen sondern auch magnetischen Eigenschaften interessant. Die dreiwertigen Ionen Gd-Tm besitzen hohe magnetische Momente von $8 \mu_B$ bis $11 \mu_B$. Mit ihnen gelang es tatsächlich eine lumineszierende Flüssigkeit, die sich durch einen Magneten manipulieren lässt, herzustellen (siehe Photo).



Ionic liquids have received substantial attention in recent years. Their inherent properties such as negligible vapour pressures, wide liquidus ranges, good thermal stabilities, considerable electric conductivities, wide electrochemical windows have been shown to be advantageous for a large number of applications. As salts, ionic liquids are composed of distinct cations and anions which make them widely tuneable and they may be designed for specific applications through the choice of the respective ion combination. Metal-containing ionic liquids are auspicious new materials which can favourably combine the properties of ionic liquids with magnetic, photophysical/optical or catalytic properties that origin from the metal incorporated in the complex anion. By using a complex Eu(III) anion we managed to synthesise the first luminescent ionic liquid. However, trivalent lanthanide are not only of interest as luminescent but also as magnetic metal centres. Especially the ions Gd-Tm have high local magnetic moments ranging from $8 \mu_B$ to $11 \mu_B$. The challenge we took is to synthesize room temperature liquids that combine the properties of a soft luminescent materials with a ferrofluid (see photo).

Ulrich Schatzschneider

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie

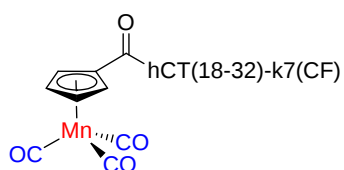
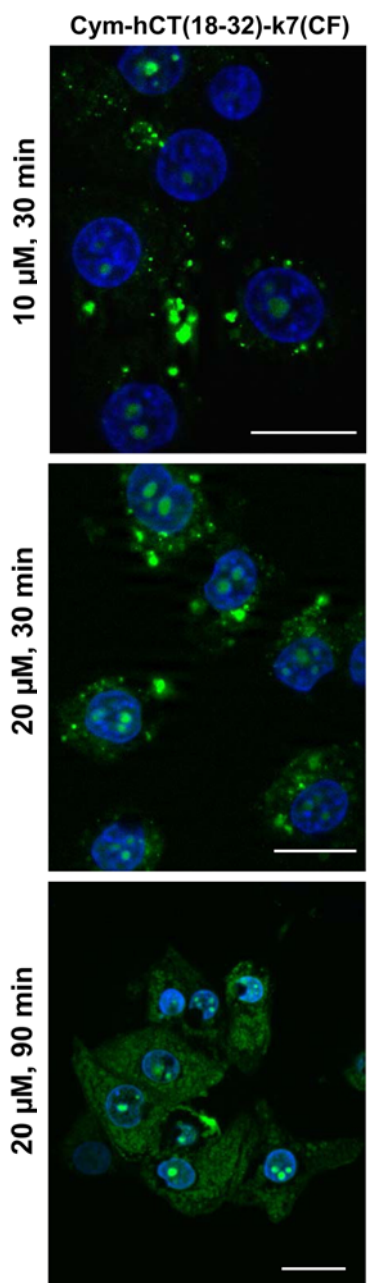
Ruhr-Universität Bochum NC 3/74, D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224187, FAX: ++49-(0)234-3214378

email: ulrich.schatzschneider@rub.de

<http://www.rub.de/ac1/uli>

I. Neundorf, J. Hoyer, K. Splith, R. Rennert, H.W. Peindy N'Dongo, U. Schatzschneider, *Chem. Commun.* (2008) 5604-5606. Cymantrene conjugation modulates the intracellular distribution and induces high cytotoxicity of a cell-penetrating peptide



In der Bioorganometallchemie besteht ein großes Interesse an der Markierung von physiologisch aktiven Molekülen mit Metallkomplexen für Anwendungen in der medizinischen Diagnostik und Therapie. Besonders vielversprechend ist die Funktionalisierung von Peptiden, da diese eine Vielzahl von biologischen Zielstrukturen aufweisen und die Zellaufnahme kleiner Moleküle erleichtern, sei es über rezeptorvermittelte Prozesse oder durch passive Diffusion durch die Zellmembran. Mit Hilfe der Festphasenpeptidsynthese haben wir ein Cymantren-Derivat an das *cell-penetrating peptide* hCT(18-32)-k7 angeknüpft. Dies führt zu einer signifikanten Veränderung der intrazellulären Verteilung des resultierenden Biokonjugats in menschlichen MCF-7-Brustkrebszellen im Vergleich zum unmodifizierten Peptid. Wie durch Fluoreszenzmikroskopie gezeigt werden konnte (Abbildung links; blau: angefärbte Zellkerne, grün: Carboxyfluorescein-markiertes Cymantren-Biokonjugat) kommt es zu einer deutlichen Anreicherung des Biokonjugats im Zellkern. Während sowohl das unmodifizierte Peptid wie auch die Cymantrenverbindung selbst keine toxische Wirkung auf die Zellen zeigen, weist das Biokonjugat eine signifikante Zytotoxizität mit einem IC_{50} -Wert von $36 \mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$ auf.

In bioorganometallic chemistry, there is an ongoing interest in the labelling of physiologically active molecules with metal complexes for applications in the diagnosis and therapy of human diseases. The functionalization of peptides is especially promising since they have a wide array of biological targets and can promote cellular uptake of attached "cargo" either via specific receptors or by passive diffusion across the membrane. We have used solid-phase peptide synthesis (SPPS) to connect a cymantrene ($\text{CpMn}(\text{CO})_3$) derivative to cell-penetrating peptide hCT(18-32)-k7. This significantly alters the intracellular distribution of the bioconjugate in human MCF-7 breast cancer cells compared to the unmodified peptide and leads to an increased nuclear accumulation, as visualized by fluorescence microscopy (see figure to the left; blue: nuclear staining, green: carboxyfluorescein-labeled cymantrene bioconjugate). While the peptide and the cymantrene compound themselves are not toxic, the bioconjugate shows a significant cytotoxicity with an IC_{50} value of $36 \mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$.

Roland A. Fischer

Lehrstuhl für Anorganische Chemie II - Organometallics & Materials;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-32 24174; FAX: ++49-(0)234-32 14174
email: roland.fischer@ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac2>

T. Cadenbach, T. Bollermann, C. Gemel, I. Fernandez, M. von Hopffgarten, G. Frenking and R. A. Fischer, "Twelve One-Electron Ligands Coordinating One Metal Center: Structure and Bonding of $[\text{Mo}(\text{ZnCH}_3)_9(\text{ZnCp}^*)_3]$ " *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 9150-9154.



Prototyp für neuartige molekulare Nano-legierungen ist eine Verbindung in der ein zentrales Molybdän-Atom von zwölf Zink-Atomen umgeben ist. Dieses ikosaedrische Metallklümpchen ist von einer Kohlenwasserstoffhülle umgeben und dadurch überraschend stabil. Dieser Aufbau ist auf andere Metallzentren und Strukturen übertragbar. Die quantentheoretische Analyse von Prof. Dr. Gernot Frenking (Marburg) bestätigt, dass die radialen Bindungen zwischen Molybdän und Zink stark sind, wohingegen die peripheren Zink-Atome einander kaum binden. Daher kann das Zink gegen andere Metalle ausgetauscht werden, sogar gegen Gold. Das entspricht der Eigenschaft von Metallen Legierungen zu bilden. Für die Modellierung dieses Phänomens auf molekularer Ebene wurden jetzt leistungsfähige chemische Synthesemethoden gefunden. Die neuen Mo-

leküle tragen zum besseren Verständnis der chemischen Bindungsverhältnisse zwischen Metallatomen bei und sind auch als Vorstufen für Katalysatoren interessant.

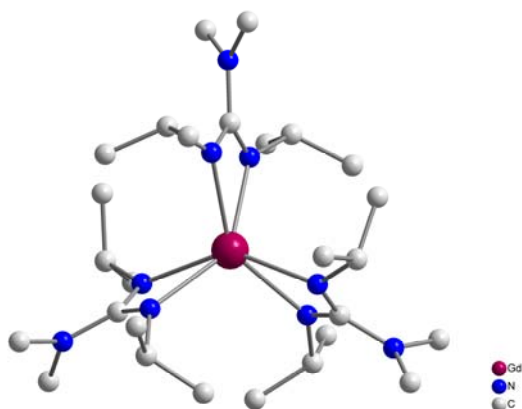
A prototype of new "nano alloys" is a compound containing one central molybdenum atom binding twelve zinc atoms. The icosahedral metal core is wrapped into hydrocarbons and therefore surprisingly stable. Its construction is transferable to both other metal centers and other structures.

The quantum theoretical analysis of Prof. Dr. Gernot Frenking (Marburg) confirms that the radial bonds between molybdenum and zinc are strong whereas the peripheric zinc atoms bind barely to each other. Therefore zinc can be exchanged by other metals, even by gold. This matches with the property of metals to form alloys. For a modeling of this phenomenon on a molecular level new synthetic methods are discovered now. The new molecules help to understand the chemical binding properties between metal atoms and are also interesting as precursors for catalyst.

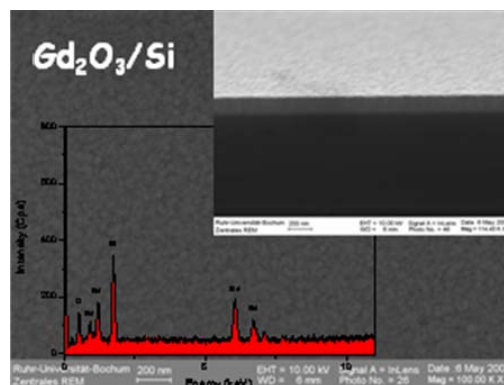
Anjana Devi

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/devi>

A. P. Milanov, R. A. Fischer, A. Devi, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 11405 – 11416. Synthesis, characterization and thermal properties of homoleptic rare-earth guanidates: Promising precursors for MOCVD and ALD of rare-earth oxide thin films.



[Gd(ⁱPr-Me₂N-GUAN)₃]

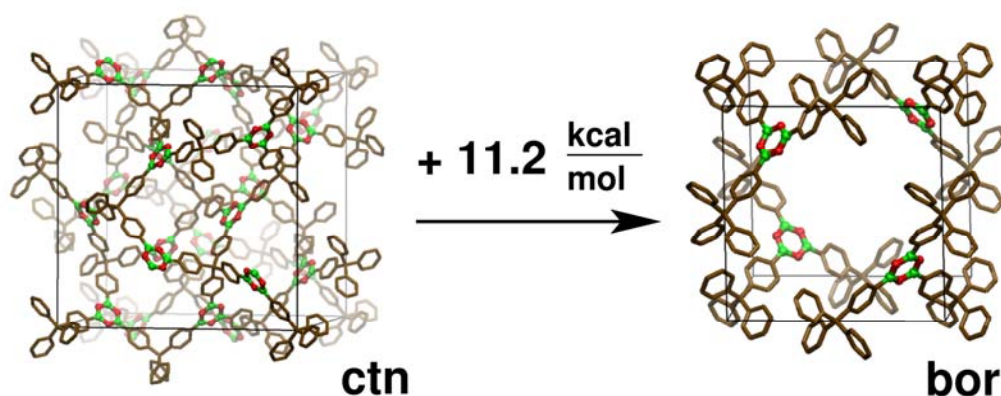


In Hinsicht deren potentiellen Anwendung als Precursoren für die Metallorganischen Chemischen Dampfabcheidung (MOCVD) und die Atomlagenabscheidung (ALD), wurde unter Verwendung von Guanidinen als Chelat-Liganden eine Reihe homoleptischen Seltenerd Komplexen von Sc, Y, Gd und Dy entwickelt. Die Verbindungen sind flüchtig und weisen ein sauberes Sublimationsverhalten sowie außergewöhnliche thermische Stabilität nicht nur bei der Verdampfungs- sondern auch bei einer für den ALD-Prozess typischen Abscheidungstemperatur auf. Aufgrund der relativ begrenzten Auswahl an zugänglichen Precursoren für die MOCVD und ALD von Seltenerdoxid, stellen die neu entwickelten Seltenerd-Guanidinato Komplexe eine vielversprechende Alternative dar. Die Einsetzbarkeit dieser Verbindungen als Precursoren für die Abscheidung von einheitlichen, stöchiometrischen Seltenerdoxid-Dünnschichten mittels MOCVD und ALD wurde erfolgreich bewiesen.

With the use of guanidates as chelating ligands, a series of novel homoleptic rare-earth complexes of Y, Gd and Dy were developed in view of their potential application as precursors for metalorganic chemical vapor deposition (MOCVD) and atomic layer deposition of rare-earth (RE) oxide thin films. The compounds were found to be volatile showing clean sublimation behavior and possess extraordinary thermal stability at temperatures as high as the evaporation and deposition temperature during an ALD process. Given the limited choice of precursors available for MOCVD and ALD of RE oxides, these compounds are very promising as alternative precursors. The feasibility of using the tris-guanidinato complexes for the growth of highly uniform and stoichiometric RE-oxide thin films by MOCVD and ALD is demonstrated.

R. Schmid, M. Tafipolsky, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 12600-12601. An Accurate Force Field Model for the Strain Energy Analysis of the Covalent Organic Framework COF-102

Die neue Substanzklasse der 3D-vernetzten kovalent-organischen Netzwerke (COFs) hat aufgrund ihrer großen inneren Oberfläche ein großes Potenzial in vielen Anwendungsbereichen. COF-102 besteht aus trigonalen und tetraedrischen Monomeren, die ein 3,4-Netzwerk bilden. Topologisch sind dabei die zwei hochsymmetrischen Netzwerke **ctn** und **bor** denkbar, wobei die Pulverdiffraktogramme für das **ctn** Netz sprechen. Wir konnten nun erstmals mit einem sehr genauen molekülmechanischen Kraftfeld die relative sterische Energie solcher supramolekular isomeren Netzwerke berechnen, wobei sich eine energetische Präferenz für die **ctn** Topologie ergab. Bei der Parametrisierungsstrategie handelt es sich um eine von uns neu entwickelte Methode, die mittels eines genetischen Algorithmus das Kraftfeld bezüglich einer quantenmechanisch berechneten Referenz justiert. Damit konnte die Netzwerktopologie ohne Rückgriff auf experimentelle Daten bestimmt werden, wobei durch die atomistische Simulation auch die Ursachen dafür im Detail analysiert werden konnten.



The new class of 3D-connected covalent organic frameworks (COFs) has a high potential in numerous fields of application, because of the large inner surface. COF-102 is formed by trigonal and tetrahedral monomers, leading to a 3,4-connected net. The two highly symmetric networks **ctn** and **bor** are possible in this case. The powder diffraction data clearly speaks for the presence of the **ctn** net. We could for the first time compute the relative steric energies for such supramolecular isomeric networks, using a highly accurate molecular mechanics force field: the **ctn** net is found to be energetically preferred. The parameterization strategy is a new approach developed by us, which is based on a genetic algorithm used to calibrate the force field with respect to quantum mechanically calculated reference data. Thus, the network topology could be determined without using experimental input. Because of the atomistic simulation the origin for this preference could be analyzed in full detail.

John McCaskill

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

Tel: +49-(0)234-32-27702 Fax: +49-(0)234 32-14047

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

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

PACE - Programmable Artificial Cell Evolution

an EU Integrated Project 2004-2008 (FP6-IST-FET-002035)

http://www.istpace.org/Web_Final_Report/the_pace_report/index.html

In PACE, a consortium of some 13 partners and 2 cooperating groups from 8 European countries and the USA have investigated a novel basis for evolvable IT using complex chemical systems that self-organize and self-reproduce: artificial chemical cells. While it would have been premature for PACE to have aimed to deliver the first novel chemical cell, the project has established novel IT technology for programming semi-autonomous chemical systems and effective architectures for artificial cells. PACE has also integrated and extended a suite of physical and chemical simulation tools at multiple scales to promote the design of information-intensive autonomous chemical systems. The project has evaluated the adaptive and evolutionary potential of chemical artificial cells and how they can be programmed to perform useful tasks for a chemically-active, "immersed" rather than embedded, IT. The project has constructed novel chemical systems that can serve as an effective basis for reducing the complexity of artificial cells. In particular, the BioMIP research group at RUB in PACE has developed and tested a novel digital electronic-chemical microprocessor technology in connection with a new machine architecture based on a real-time microscale feedback loop - the "omega machine" - on the hard task of bootstrapping chemistry towards artificial cell autonomous operation.

Other partners in PACE have developed algorithms and the technology to optimize rather general experimental protocols, that contribute to make chemical optimization more programmable. The project has also constructed a platform for controlling and monitoring the self-assembly of multiple artificial cells, that have been functionalized by specific surface structures. Finally, much of the significant progress in PACE is attributable to the integration achieved via a whole range of scientific meetings at the newly formed European Center for Living Technology - now an autonomous lasting legacy of the PACE project.

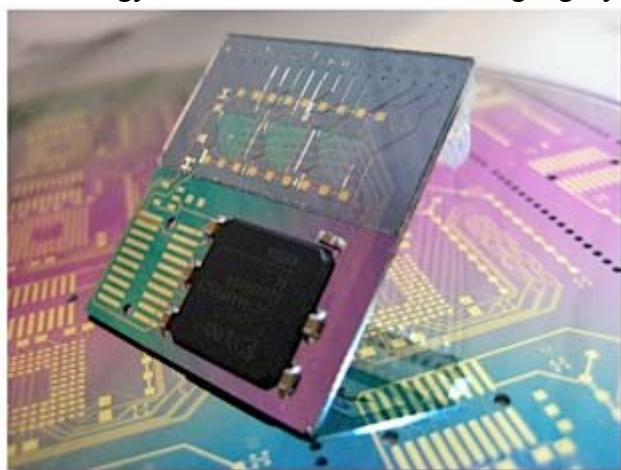
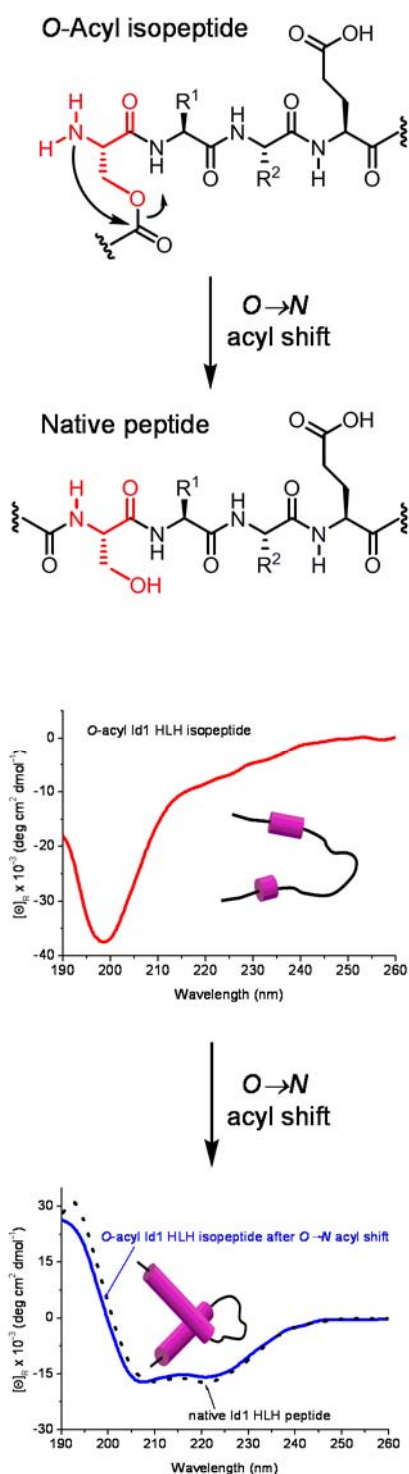


Fig. 1 Example of an electronically programmable chemical microprocessor developed in PACE by BioMIP, that allows electronic control of chemical reactions via a multitude of digitally pulsed electrodes that influence local molecular concentrations and transport. The microfluidic channel network in the upper half is connected via 18 capillaries at the rear. The integrated reprogrammable FPGA chip (lower right) interfaces the electrodes to an external computer (wires not shown). The lateral dimension of the whole chemical microprocessor is ca 20 mm

S. D. Kiewitz, T. Kakizawa, Y. Kiso, C. Cabrele, *J. Peptide Sci.* **14** (2008) 1209-1215.
Switching from the unfolded to the folded state of the helix-loop-helix domain of the Id proteins based on the O-acyl isopeptide method

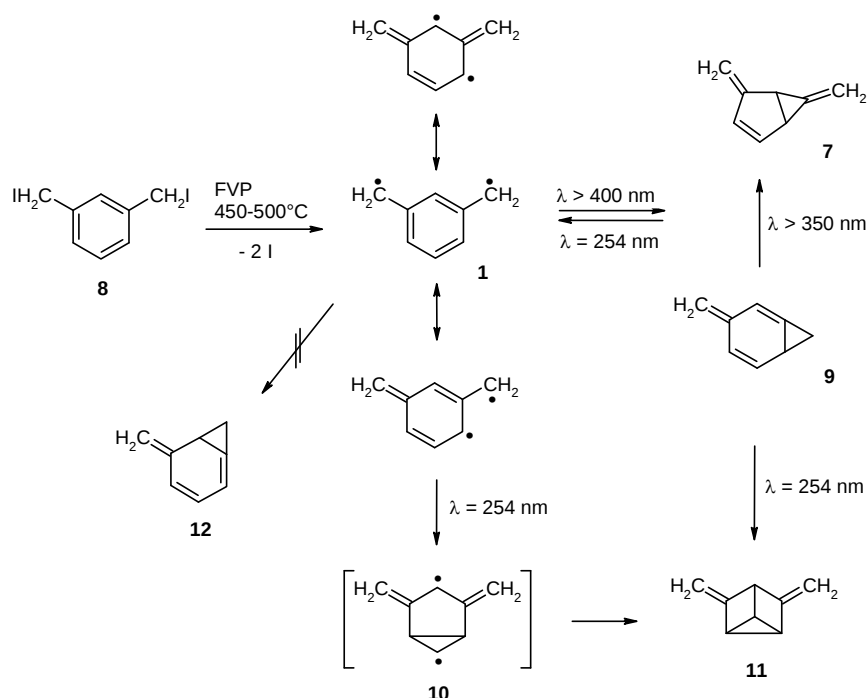


Die Id Proteine (Id1-4) sind negative Helix-Loop-Helix (HLH) Transkriptionsfaktoren, die eine Schlüsselrolle in der Embryogenese, aber auch in Gefäßerkrankungen und Tumorwachstum spielen. Die hoch konservierten Id HLH Domänen, die essentiell für die Heterodimerisierung mit ubiquitären und Gewebe-spezifischen bHLH Proteinen sind, können auch selbst assoziieren und α -Helix-reiche Strukturen bilden, die erhebliche Stabilität unter thermischen und chemischen Denaturierungsbedingungen aufweisen. Der Austausch einzelner Aminosäuren wird gut toleriert, jedoch führt der Ersatz einer Amid- durch eine Ester-Bindung über die Serin Seitenkette an der Schnittstelle Loop-Helix-2 zum totalen Verlust der sekundären Struktur. Dieses O-Acyl Id HLH Isopeptid kann allerdings unter physiologischen Bedingungen zum nativen Peptid durch eine intramolekulare O → N Acyl-Migration umwandeln, was die komplette Rückgewinnung der HLH Faltung ermöglicht, wie es mit Circular dichroismus gezeigt wurde. Demzufolge liegt es nahe, dass der Schnittpunkt Loop-Helix-2 ein Schlüsselement der Bildung und Stabilisierung der Id HLH Domäne ist. Weiterhin zeigt diese Arbeit die erfolgreiche Anwendung von O-Acyl Isopeptiden als konformative Schalter.

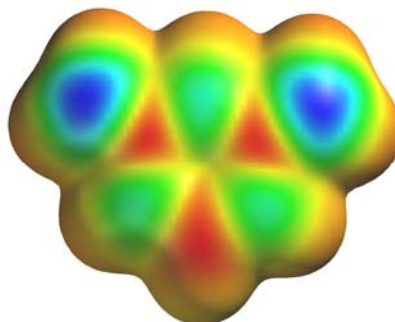
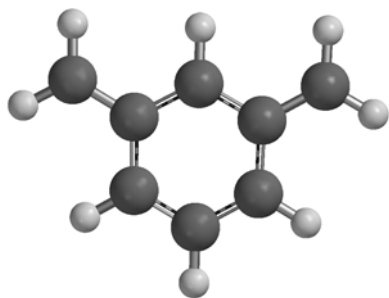
The Id proteins (Id1-4) are negative helix-loop-helix (HLH) transcription factors that play a key role during development and in pathological events, including tumor and vascular diseases. The highly conserved Id HLH domains, being essential for heterodimerization with ubiquitous and tissue-specific bHLH proteins, can also self-associate into α -helix-rich structures that show remarkable stability upon thermal and chemical denaturing conditions. Single amino acid substitution is well tolerated, in contrast, replacement of one single backbone amide with an ester bond using the side chain of a serine residue at the loop-helix-2 junction leads to a complete loss of the secondary structure. However, the O-acyl Id HLH isopeptide can be converted into the native one by triggering an intramolecular O → N acyl shift under physiological conditions, which is accompanied by complete recovery of the HLH fold, as shown by circular dichroism. This observation suggests that the loop-helix-2 junction is a key element in the folding and stabilization of the Id HLH domains. Furthermore, this work emphasizes the application of O-acyl isopeptides as powerful tools to achieve an efficient and reversible conformational switch

W. Sander, D. Grote, S. Kossmann, F. Neese, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 4396 – 4403.
2,3,5,6-Tetrafluorophenylnitren-4-yl: EPR Spectroscopic Characterization of a Quartet Ground State Nitreno Radical

m-Xylylene **1** is the parent molecule of all high-spin polyradical systems with *meta*-phenylene coupling units used to design organic magnetic materials. All the syntheses of **1** reported so far are based on UV photolysis of suitable precursors. However, as shown here, diradical **1** is highly photolabile, and therefore its yield is diminished by secondary photolysis. Only small amounts of **1** survive in photostationary equilibria, and high yields of **1** can only be obtained if photochemical steps are avoided in its synthesis.



The synthesis of **1** via FVP of **8** has a number of advantages compared to the previously known photochemical routes: (i) up-scaling to obtain preparative amounts of **1** is easily possible, (ii) no photochemical step is necessary that reduces the yield of the photolabile **1**, and (iii) the diradical **1** can be trapped in inert gas matrices without the formation of close radical pairs.



Gerald Dyker

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

D-44780 Bochum

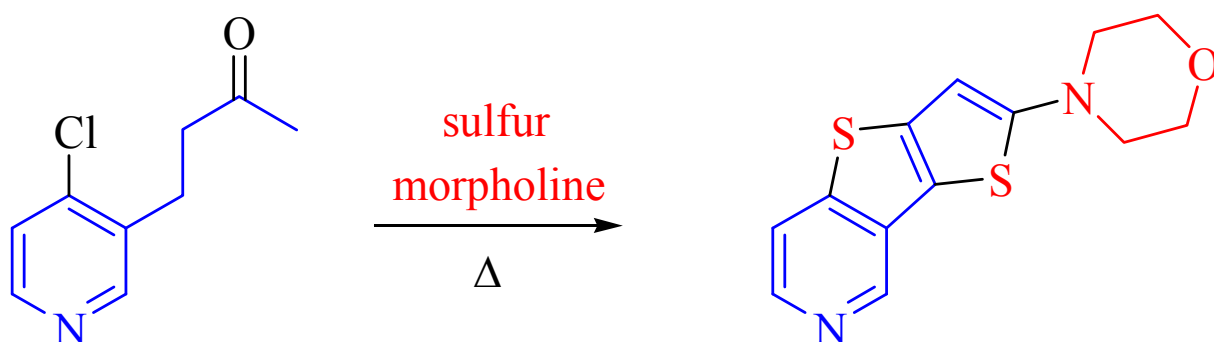
Tel.: ++49-(0)234-3224551; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: Gerald.Dyker@rub.de

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

D. Kadzimirsz, D. Kramer, L. Sripanom, K. Merz, I. M. Oppel, N. Doltsinis, G. Dyker, *J. Org. Chem.* **73** (2008), 4644-4649. A Domino Annulation Reaction under Willgerodt-Kindler Conditions

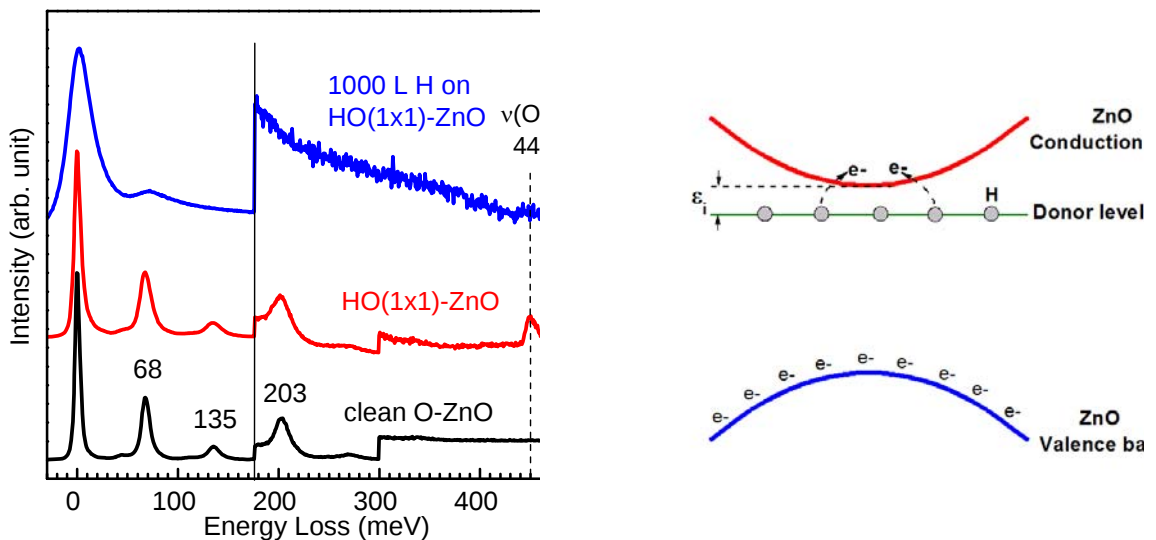
Kaum ein Experiment erinnert mehr an Alchemie als eine Willgerodt-Kindler-Reaktion: in einer dampfenden Mixtur aus elementarem Schwefel, einem stinkenden Amin und dem eigentlichen Substrat entwickelt sich darüberhinaus Schwefelwasserstoff, während eine an Wunder grenzende Transformation voranschreitet. Bei der klassischen Version der Willgerodt-Kindler-Reaktion erhält man Thioamide aus Ketonen. Wir fanden einen Dominoprozess, der zudem zwei Cyclisierungs-Schritte beinhaltet und polycyclische Hetarene ergibt, die als DNA-Interkalatoren in Betracht kommen.



One can hardly imagine an experiment which appears more alchemy-like than a Willgerodt-Kindler reaction: in a fuming mixture of elemental sulphur, a smelly amine and the substrate hydrogen sulfide is developed, while an apparently miraculous transformation proceeds. The classic version of the Willgerodt-Kindler reaction results in the formation of thiamides a final products. We found a domino process, which additionally includes two cyclization steps, resulting in polycyclic hetarenes, which are promising candidates for DNA intercalation.

Hengshan Qiu, Bernd Meyer, Yuemin Wang, Christof Wöll, *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008) 236401. Ionization Energies of Shallow Donor States in ZnO Created by Reversible Formation and Depletion of H Interstitials.

Die elektronischen Effekte von interstitiellen H-Atomen in ZnO wurden mittels hochauflösender Elektronenenergieverlust-Spektroskopie (HREELS) untersucht. Eine reversible ZnO-Dotierung erfolgt durch Belegung der (0001)-orientierten ZnO-Einkristallen mit atomarem Wasserstoff. Bei niedrigen Temperaturen erzeugen die interstitiellen H-Atome flache Donorzustände in der Bandlücke. Bei relativ hohen Temperaturen können die Elektronen ins Leitungsband angeregt werden. Mit Hilfe von HREELS konnte das Vorhandensein der niederenergetischen Plasmonen, die aus der begrenzten Ladungsträger-konzentration im Leitungsband resultieren, nachgewiesen werden. Bei Temperaturen höher als 100 K wurde eine starke, Plasmon-induzierte Verbreiterung des quasielastischen Signals in HREELS beobachtet. Eine detaillierte HREELS-Studie zur Temperaturabhängigkeit ergab eine Bindungsenergie der flachen Donorzustände von 25 ± 5 meV.



The electronic effects of H atoms at interstitial sites in ZnO have been investigated by high resolution electron energy loss spectroscopy (HREELS). A reversible doping is achieved by exposing single crystalline (0001)-oriented ZnO substrates to atomic hydrogen. At low temperatures, interstitial H atoms form shallow donor states. At sufficiently high temperatures, the electrons are excited into the conduction band. We use EELS to demonstrate the presence of low-energy plasmons resulting from this finite density of charge carriers in the conduction band. Above temperatures of 100 K, a strong, plasmon-induced broadening of the quasielastic peak in the HREELS data is observed. The analysis of the temperature dependence yields a donor level ionization energy of 25 ± 5 me.

Christian Herrmann

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

D-44780 Bochum

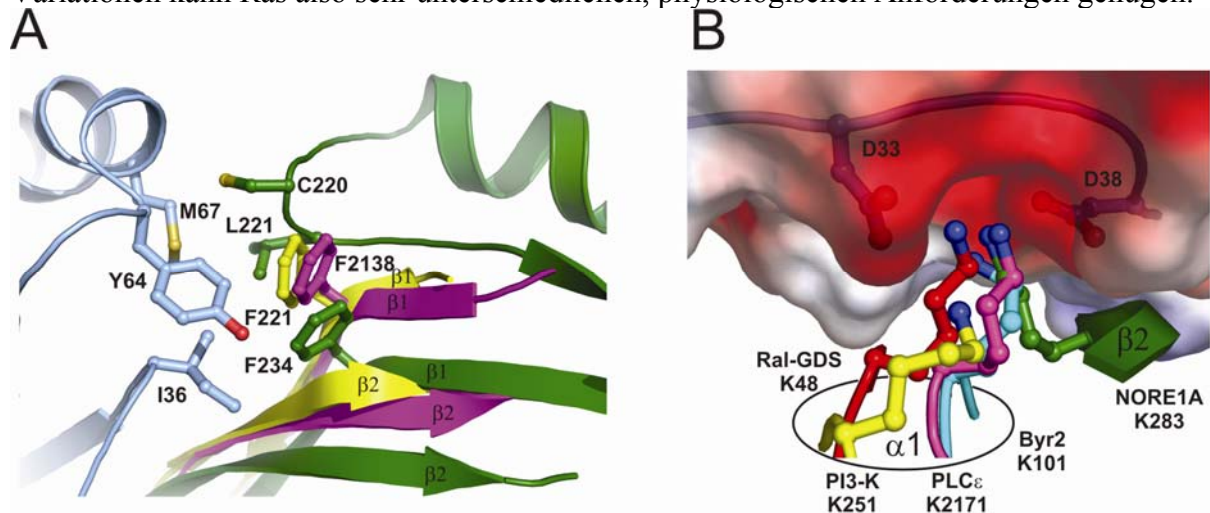
Tel.: ++49-(0)234-3224173; FAX: ++49-(0)234-3214785

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

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

B. Stieglitz, C. Bee, D. Schwarz, Ö. Yildiz, A. Moshnikova, A. Khokhlatchev, C. Herrmann, *EMBO J.* **27** (2007) 1995-2005. Novel type of Ras effector interaction established between tumor suppressor NORE1A and Ras switch II.

Zelluläre Signalvermittlung wird durch Aktivierungskaskaden bestimmter Proteine bewerkstelligt, so aktiviert beispielsweise Ras die Effektoren Raf- und PI3-Kinase durch Bildung spezifischer aber kurzlebiger Prozesse. In unserer Publikation charakterisieren wir mit NORE1A ein Tumorsuppressor Protein (RASSF-Familie), das in einem weiteren Ras-Signalweg eine Rolle spielt, allerdings nicht auf Grundlage enzymatischer Aktivität sondern durch seine Adapterfunktion: über NORE1A wird ein Multiprotein-Komplex assembliert. Wir zeigen mit Hilfe einer Mutationsanalyse und einer Röntgenstruktur, dass die Interaktion zwischen Ras und NORE1A einerseits über klassische Effektor-Bindungsmotive zustande kommt (B), dass aber andererseits eine zusätzliche Domäne über vornehmlich hydrophobe Aminosäuren (A) dafür verantwortlich ist, dass dieser Komplex eine etwa 100fach längere Lebenszeit hat als Ras im Komplex mit Raf oder PI3K. Aufgrund kleiner, molekularer Variationen kann Ras also sehr unterschiedlichen, physiologischen Anforderungen genügen.



A class of putative Ras effectors named Ras association domain family (RASSF) represents non-enzymatic adaptors which were shown to play an important role in tumor suppression. RASSF5, a member of this family exists in two splice variants known as NORE1A and RAPL. Both of them are involved in distinct cellular pathways triggered by Ras and Rap, respectively. Here we describe the crystal structure of Ras in complex with the Ras binding domain (RBD) of NORE1A/RAPL. While all Ras effectors share a common topology in their RBD creating an interface with the switch I region of Ras, NORE1A/RAPL RBD reveals additional structural elements forming a unique Ras switch II binding site. Consequently, the contact area of NORE1A is extended compared to other Ras effectors. We demonstrate that the enlarged interface provides a rationale for an exceptionally long lifetime of the complex. This is a specific attribute characterizing the effector function of NORE1A/RAPL as adaptors, in contrast to classical enzymatic effectors like Raf, RalGDS or PI3K which are known to form highly dynamic short-lived complexes with Ras.

Martina Havenith-Newen

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

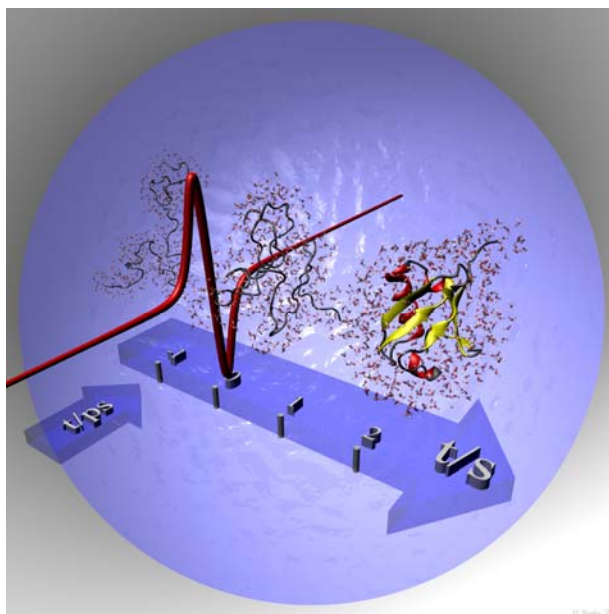
Tel.: ++49-(0)234-3224249; FAX: ++49-(0)234-3214183

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

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

S.J. Kim, B. Born, M. Havenith, M. Gruebele, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 6486-6489.
Real-Time Detection of Protein-Water Dynamics upon Protein Folding by Terahertz Absorption Spectroscopy.

Änderungen von Proteinstruktur und Dynamik während der Proteinfaltung sind mit Hilfe von verschiedenen biophysikalischen Methoden wie Zirkular Dichroismus und Fluoreszenzspektroskopie nachweisbar. Jedoch existieren kaum Methoden, mit denen der Einfluss des Wassers bei biophysikalischen Prozessen hinreichend charakterisiert werden kann. Deshalb haben wir Terahertz Absorptionsspektroskopie mit Stopped-flow Mischtechniken kombiniert und ein Spektrometer entwickelt, welches uns ermöglicht, die kollektiven Dynamiken des Wassernetzwerks von Proteinen während der Proteinfaltung in Echtzeit zu beobachten. Mit kinetischer Terahertz Absorptionsspektroskopie (*KITA*) konnten wir erstmalig nachweisen, dass das Protein-Wassernetzwerk um das Protein Ubiquitin innerhalb weniger Millisekunden umorientiert wird. Erst danach setzt die Ausbildung der Tertiärstruktur des Ubiquitin ein. Insgesamt nimmt die eigentliche Faltung einen Zeitraum von 0,9 Sekunden ein.



Changes in protein structure and dynamics during folding are well traceable with various biophysical methods, such as circular dichroism and fluorescence spectroscopy. However, there is a lack of powerful methods which are capable of characterising the influence of water on biophysical processes. Therefore, we combined terahertz absorption spectroscopy with stopped-flow mixing techniques and set up a spectrometer which facilitates the real-time detection of collective protein-water network dynamics upon folding. For the first time, kinetic terahertz absorption (*KITA*) spectroscopy revealed that the protein-water network around ubiquitin proteins is reoriented within a few milliseconds. After that, ubiquitin's tertiary structure formation sets in. The intrinsic folding process takes place on a total time scale of 0.9 seconds.

Hermann Weingärtner

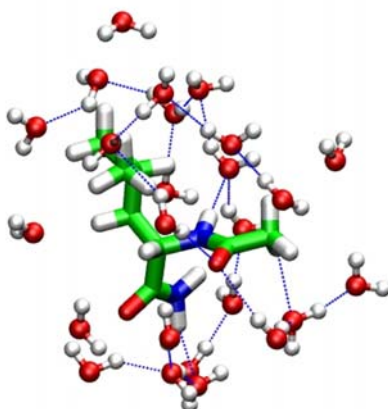
Physikalische Chemie der Flüssigkeiten; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-32-25535; FAX: ++49-(0)234-32-14293

email: hermann.weingaertner@ruhr-uni-bochum.de

P. Sasisanker, H. Weingärtner, *ChemPhysChem* **9** (2008) 2802-2808. Hydration Dynamics of Water near an Amphiphilic Model Peptide at Low Hydration Levels: A Dielectric Relaxation Study.

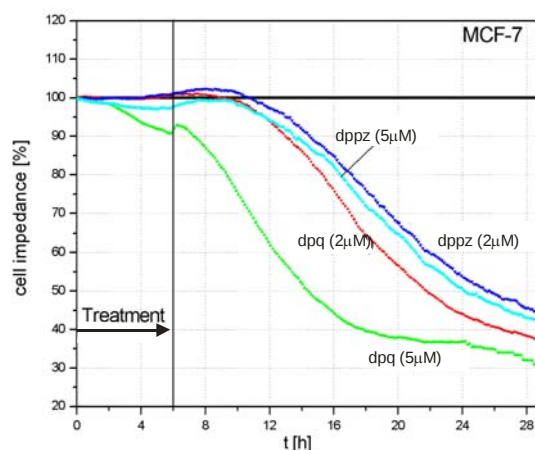
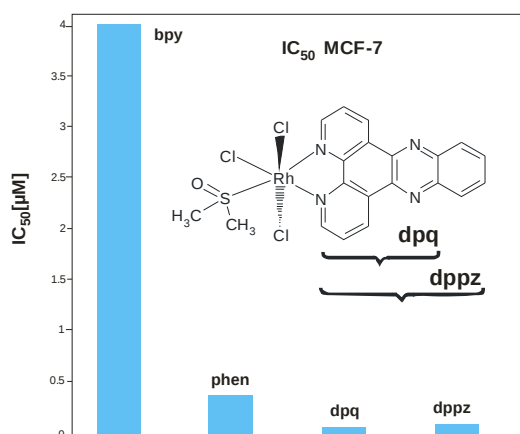
Die Hydratation und Hydratationsdynamik von in Wasser gelösten Biomolekülen stellt oft einen Schlüssel zum Verständnis ihrer biomolekularen Funktion dar. Um die Hydratationsdynamik eines einfachen, amphiphilen Modellpeptids zu untersuchen, haben wir dielektrische Relaxationsexperimente an wässrigen Lösungen von N-Acetyl-leucine-amide (NALA) bei 298 K durchgeführt. Die Experimente überdecken Zustände, in denen Wasser einige Hydratationsschalen aufbaut, bis hin zu Zuständen, in denen einzelne Wassermoleküle oder kleine Wassercluster von mehreren Peptidmolekülen umgeben sind. Die dielektrischen Spektren weisen zwei Moden auf der Zeitskala von 10 ps bzw. 100 ps auf. Gegenüber reinem Wasser ist die schnelle Mode nur um einen Faktor verlangsamt. Die entsprechende Bewegung kann der Umorientierung von Wassermolekülen zugeordnet werden und umfasst sowohl freies Wasser als auch Hydratwasser. Sogar in Lösungen, in denen alle Wassermoleküle in Kontakt mit dem Gelösten stehen, bleibt die schnelle Mode dominierend. Die langsame Mode spiegelt Peptid-Wasser-Kopplungen und einige wenige, stark verlangsamte Wassermoleküle wider. Eine vielfach vorhergesagte langsame Bewegung der Mehrzahl der Wassermoleküle an der Grenzfläche zum Peptid wird nicht beobachtet.



Hydration and hydration dynamics of biomolecular solutes in water is often key to their biomolecular function. To characterize the hydration dynamics of a simple amphiphilic model peptide, we have conducted a dielectric relaxation study of aqueous solutions of N-acetyl-leucine-amide (NALA) at 298 K. The experiments range from states, where water builds up several hydration layers, to states, where single waters or small water clusters are shared by several NALA molecules. The dielectric spectra reveal two modes on the 10 ps and 100ps time scales. The fast mode is assigned to water reorientation comprising bulk water as well as hydration water. Even if all water molecules are in contact with the solute, this fast component is dominating, and its dynamics is retarded by less than a factor of two with regard to neat water. The slow relaxation mode is mainly founded in peptide-water couplings and a few slowly reorienting hydration waters. An often postulated pronounced slowing-down of the majority of water molecules at the peptide–water interface is not observed.

M. Harlos, I. Ott, R. Gust, H. Alborzinia, S. Wölfl, W. S. Sheldrick, *J. Med. Chem.* **51** (2008) 3924 - 3933. Synthesis, biological activity and structure-activity relationships for potent cytotoxic rhodium(III) polypyridyl complexes

Meridionale Polypyridyl-Rhodiumkomplexe des Typs *mer*-[RhCl₃(DMSO)(pp)] stellen eine vielversprechende neue Klasse von hoch wirksamen Mitteln für die Behandlung von Lymphoma und Leukämie dar. Ihre *in vitro* Cytotoxizität weist eine starke Abhängigkeit von der Flächengröße des Polypyridyl-Liganden auf. So nimmt der IC₅₀-Wert für humane MCF-7 Zellen (Brustkrebs) von 4,0 über 0,40 bis 0,079 μ M innerhalb der Reihe pp = bpy, phen, dpq ab. Mit Hilfe eines Sensorchips konnte eine deutliche zeitabhängige Abnahme des intrazellulären Sauerstoffverbrauchs und der extrazellulären Ansäuerung verfolgt werden. Die Behandlung mit den Komplexen führt zu einem spezifischen apoptotischen Zelltod unter Beteiligung des intrinsischen mitochondrialen Mechanismus. Für Patienten mit rezidierender akuter lymphatischer Leukämie werden in *ex vivo*-Studien wesentlich höhere Apoptosiswerte im Vergleich zu herkömmlichen Mitteln beobachtet.



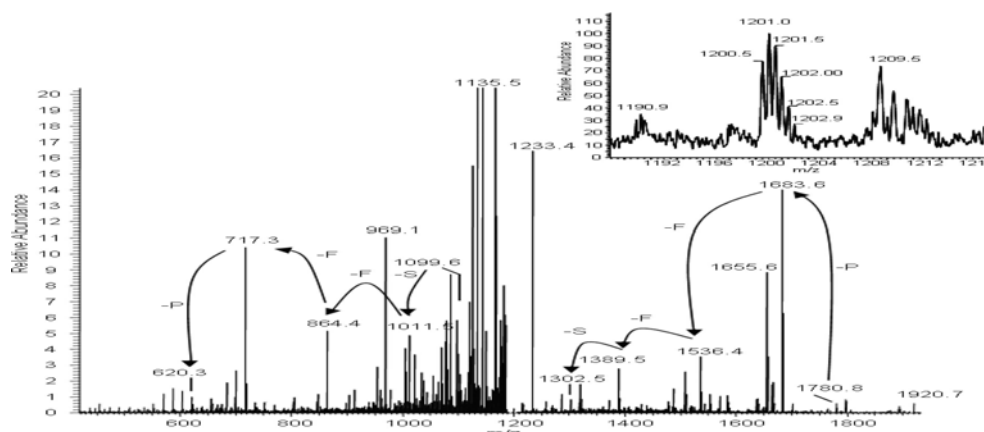
Meridional rhodium(III) polypyridyl complexes of the type *mer*-[RhCl₃(DMSO)(pp)] represent a promising novel class of highly potent cytotoxic agents for the treatment of lymphoma and leukemia. A strong dependence on the surface area of the polypyridyl ligand is apparent for their *in vitro* cytotoxicities. For instance the IC₅₀ value for human MCF-7 cells (breast carcinoma) decreases from 4.0 over 0.40 to 0.079 μ M within the series pp = bpy, phen, dpq. Significant time-dependent decreases in cellular oxygen consumption and the rate of extracellular acidification were monitored with a cell-based sensor chip. The complexes induce specific apoptotic cell death via the intrinsic mitochondrial pathway and cause negligible necrotic damage. In *ex vivo* trials, much higher apoptosis levels are observed for cells taken from patients with acute lymphoblastic leukemia than for standard clinical drugs such as daunorubicin.

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>

M. Gertz, F. Fischer, D. Wolters, C. Steegborn. Proc Natl Acad Sci U S A. 2008 Apr 15;105(15):5705-9. Activation of the lifespan regulator p66Shc through reversible disulfide bond formation.

Einen komplexen Sicherheitsmechanismus, der geschädigte Zellen nur dann in den Zelltod treibt, wenn sie nicht mehr zu retten sind, haben Proteinforscher der Ruhr-Universität um Juniorprofessor Dr. Clemens Steegborn und Dr. Dirk Wolters aufgeklärt. Sie identifizierten zum einen den Teil des Proteins p66Shc, der für den Selbstmord einer Zelle zuständig ist, und ermittelten zum anderen den genauen Mechanismus seiner Regulation. Zur Einleitung der Selbstzerstörung müssen mehrere Proteinkomponenten als Komplex zusammenwirken. Der Komplex kann durch Reparaturmechanismen der Zelle abgebaut werden, offenbar genau so lange, wie auch die Zellschäden noch reparabel sind. Erst wenn die Zelle rettungslos defekt ist, geht sie zugrunde. p66Shc spielt bei zahlreichen Alterungs-assoziierten Krankheiten eine Rolle, so etwa bei Arteriosklerose oder Altersdiabetes. Das macht das Protein zu einem interessanten Forschungsobjekt für Alterungsprozesse wie auch zu einem möglichen Ziel für neue Medikamente.



MS/MS Spektrum und MS Spektrum (*Inset*) des über Disulfidbrücken verbrückten Peptids LNSMRPFFSC-S-S-CSFFPRMSNL. Isotopenauflösung des MS Spektrums zeigt die Doppelladung des entsprechenden Peptids bei $m/z = 1200,5$ Da. Vier der p66Shc-Moleküle verbinden sich über solche Disulfidbrücken und können so den Zelltod einleiten.

Protein researchers at the Ruhr University on the team from Junior Professors Dr. Clemens Steegborn and Dr. Dirk Wolters have clarified a complex safety mechanism that drives damaged cells to cell death when they can no longer be rescued. They identified on the one hand the part of Protein p66Shc that is responsible for a cell's suicide and they additionally ascertained the precise mechanism of its regulation. In order for the self-destruction to be initiated, several protein components must work together as a complex. The complex can apparently be decomposed by the cell's repair mechanisms for precisely as long as the cell damages are repairable. P66Shc plays a role in numerous aging-related diseases, for example arteriosclerosis or age-related diabetes. This makes the protein an interesting object for research, both in terms of the aging process and as a possible source of new medications.

Wolfgang Schuhmann

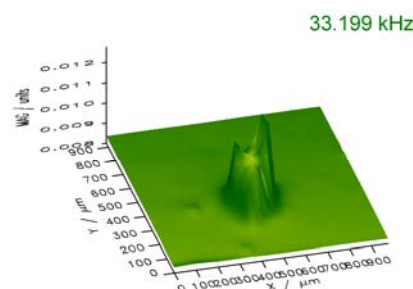
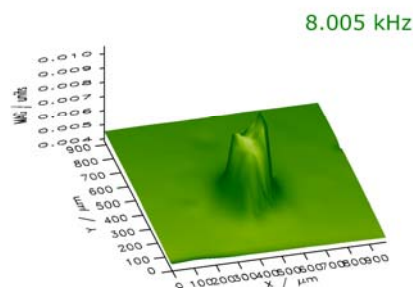
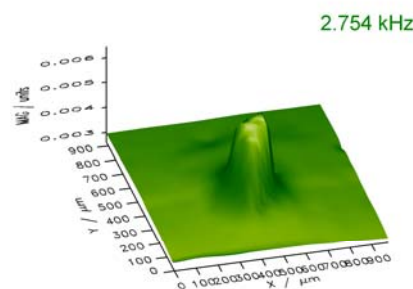
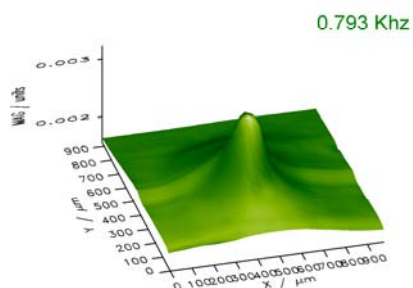
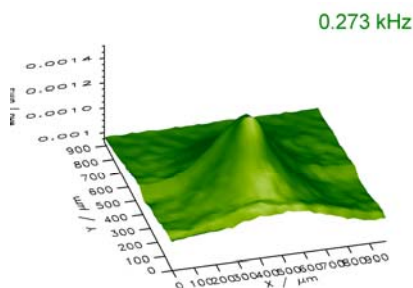
Anal. Chem. - Elektroanalytik & Sensorik; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

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

K. Eckhard, T. Erichsen, M. Stratmann, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **14** (2008) 3968-3976.
Frequency-dependent alternating-current scanning electrochemical microscopy (4D AC-SECM) for local visualization of corrosion sites



Um die Entstehung lokaler Korrosionsphänomene untersuchen zu können, bedarf es ortsauflösender Methoden, die beispielsweise Lochfraß oder Korrosionsvorstufen mit hoher lateraler Auflösung visualisieren können. Bei der Abbildung lokaler elektrochemischer Aktivität mittels wechselstrombasierter elektrochemischer Rastermikroskopie (AC-SECM) ist der Kontrast in hohem Maße abhängig von der gewählten Anregungsfrequenz. Um den Informationsgehalt der erhaltenen Bilder zu erhöhen und optimalen elektrochemischen Kontrast zu erzielen, wird vorgeschlagen, an jedem Punkt des Rastergitters, ein komplettes Frequenzspektrum aufzunehmen, anstatt die Oberfläche mit einer einzigen, willkürlich gewählten Anregungsfrequenz abzurastern. Dadurch werden vierdimensionale Datensätze erhalten (4D AC-SECM). Der Aufbau des neu entwickelte Instrumentes, seine Funktionsweise und erste Ergebnisse zur Abbildung korrodierender Oberflächen werden gezeigt.

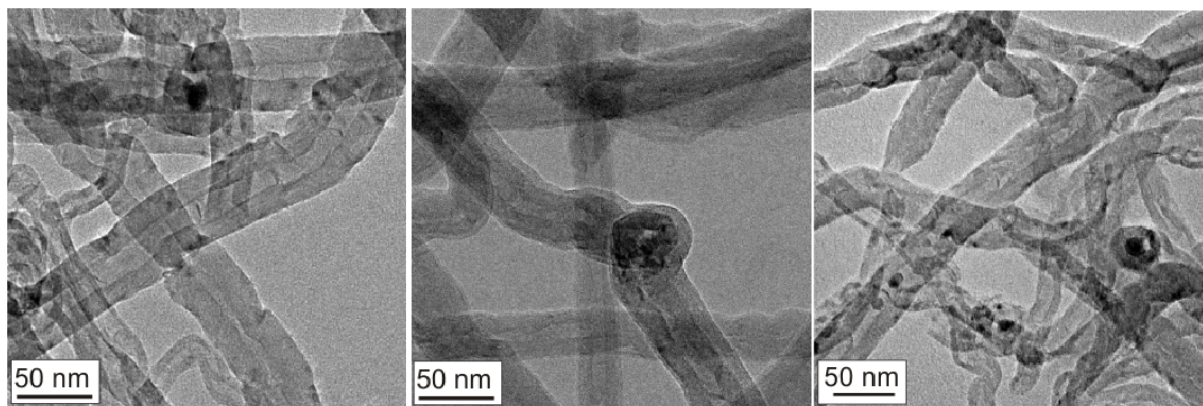
To gain further understanding about the initiation of localized corrosion analytical tools are needed, which are able to image corrosion pits and precursor sites with high spatial resolution and sensitivity. The lateral electrochemical contrast in alternating current scanning electrochemical microscopy (AC-SECM) was found to be highly dependent on the frequency of the applied alternating voltage. In order to be able to obtain data with optimum contrast and high resolution the AC-frequency is swept in a full spectrum at each point in space instead of performing spatially resolved measurements at one fixed perturbation frequency. In doing so, four dimensional datasets are acquired (4D AC-SECM). Here, we describe the instrument set-up and modus operandi along with first results of imaging corroding surfaces. Corrosion precursor sites and local defects in protecting organic coatings were successfully visualized as well as an actively corroding pit on 304 stainless steel. Since the lateral electrochemical contrast in these images varies with the perturbation frequency, the suggested approach marks an indispensable tool for obtaining optimum electrochemical contrast.

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>

T. Schilling, M. Bron, *Electrochim. Acta* **53** (2008) 5379-5385. Oxygen reduction at Fe-N-modified carbon nanotubes in acidic electrolyte.

Im Zuge der Entwicklung alternativer Sauerstoffreduktionskatalysatoren für PEM-Brennstoffzellen wurde seit geraumer Zeit Fe/N- oder Co/N-modifizierte Ruße untersucht. Deren Aktivität und Stabilität ist für praktische Anwendungen jedoch nicht ausreichend. Wir konnten zeigen, dass sich das Konzept der Me/N-modifizierten Ruße auch auf Kohlenstoff-Nanoröhren (CNTs) übertragen lässt. Diese erscheinen aufgrund ihrer chemischen und mechanischen Resistenz sowie ihrer hohen Leitfähigkeit geeignet als Katalysatormaterialien für PEM-Brennstoffzellen. Zur Einbringung der aktiven Zentren in die CNTs wurden diese mit einem Eisen-Porphyrin imprägniert und einer Hochtemperaturbehandlung unterzogen. Die hergestellten Fe/N-modifizierten Katalysatoren zeigten eine viel versprechende Aktivität bezüglich der elektrokatalytischen Sauerstoffreduktion.



In the development of alternative oxygen reduction catalysts for PEM fuel cells, Fe/N- or Co/N-modified carbon blacks have been in the focus of research since long time. The activity and stability of these materials, however, is not sufficient for practical long term applications. We were able to show that the concept of Me/N-modification of carbon black can also be established with carbon nanotubes (CNTs). CNTs are chemically and mechanically highly stable as well as highly conductive and thus seem to be promising materials for fuel cell applications. The modification of the CNTs has been carried out by impregnation with an iron porphyrine and subsequent heat treatment. The Fe/N-modified CNTs showed promising activity for the electrocatalytic oxygen reduction.

Dominik Marx

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

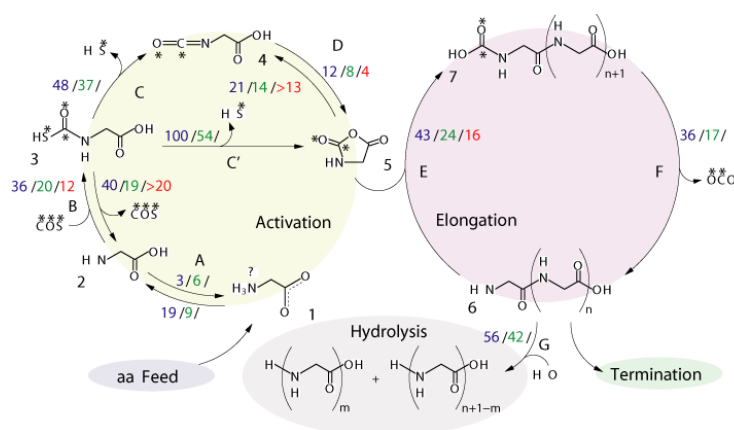
Tel.: ++49-(0)234-3228083; FAX: ++49-(0)234-3214045

email: Dominik.Marx@theochem.rub.de

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

E. Schreiner, N. N. Nair, and D. Marx, *J. Am. Chem. Soc. (Communication)* **130**, (2008) 2768-2770. Influence of Extreme Thermodynamic Conditions and Pyrite Surfaces on Peptide Synthesis in Aqueous Media

Anhand von freien Energien und von Reaktionsmechanismen wird die Synthese von Diglyzin rein rechnerisch untersucht. Die Aktivierung der Aminosäure mit COS hin zur Bildung des entsprechenden Leuchs Anhydrids ("NCA") folgt bevorzugt einem indirekten Pfad über ein Isocyanat Intermediat. Extreme Temperatur- und Druckbedingungen beschleunigen diese Peptidisierung stark relativ zu Wasser bei Normalbedingungen und fördern im Allgemeinen konzertierte gegenüber schrittweisen Mechanismen. Schließlich wird gezeigt, wie die Gegenwart einer Pyritoberfläche, $\text{FeS}_2(001)$, durch Verminderung von Fluktuationen und durch Hilfe bei der Vorbildung des zyklischen NCA-Fünfrings aufgrund einer Gerüstfunktion einige Reaktionsbarrieren weiter absenkt.



Free energy landscapes and reaction mechanisms underlying synthesis of diglycine in water were studied computationally. It is found that amino acid activation by COS leading to the formation of a cyclic alpha-aminoacid N-carboxyanhydride (NCA or

“Leuchs anhydride”) follows preferentially an indirect pathway that involves an isocyanate intermediate. Extreme temperature and pressure conditions accelerate peptidization greatly compared to the ambient bulk water environment and are shown to favor, in general, concerted versus stepwise mechanisms. Finally, a pyrite surface, $\text{FeS}_2(001)$, is found to lower reaction barriers further by decreasing fluctuations and by assisting the preformation of the cyclic five-membered NCA ring due to scaffolding.

Presseberichte:

Supercomputer rekonstruiert erste Lebensmoleküle, *Die Welt* (15.02.2008)

Reaktionen in virtuellem Wasser, *Neue Zürcher Zeitung* (26.03.2008)

Supercomputer entdeckt Bausteine des Lebens, *General-Anzeiger* (19.02.2008)

RUB Presseinformationen:

<http://www.pm.rub.de/pm2008/msg00043.htm>

<http://www.pm.rub.de/pm2008/msg00235.htm>

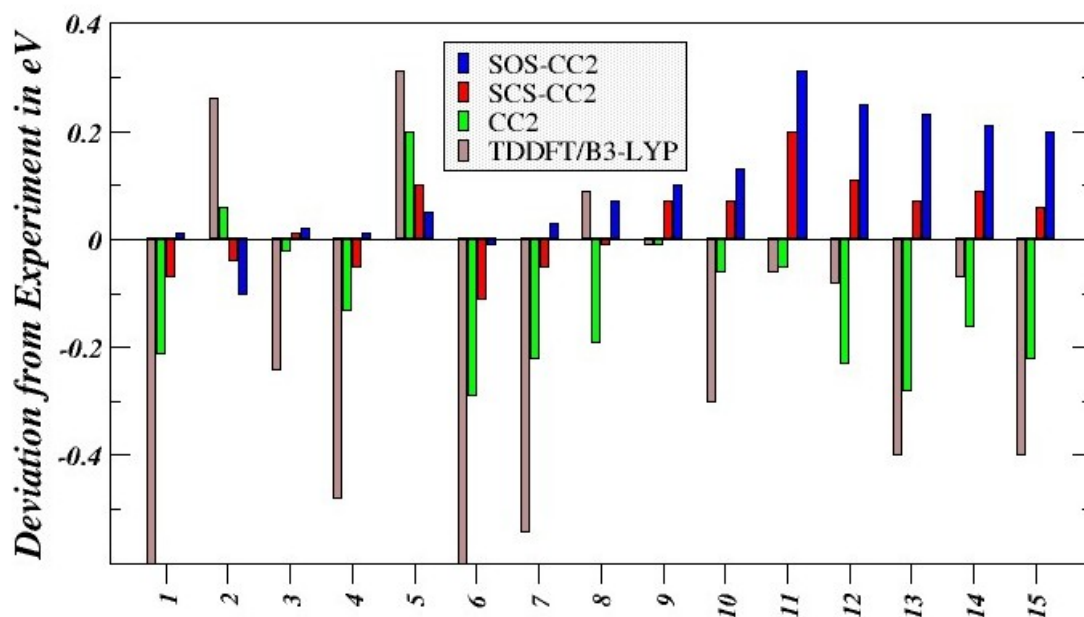
Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glanzlichtern:

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

A. Hellweg, S. Grün, C. Hättig, *PCCP* **10** (2008) 4119-4127. Benchmarking the performance of spin-component scaled CC2 in ground and electronically excited states.

Es wird eine Verallgemeinerung der spinkomponenten-skalierten SCS- und SOS-Varianten der 2. Ordnung Møller-Plesset-Störungstheorie (MP2) zum approximierten Coupled-Cluster Model CC2 (die als SCS-CC2 und SOS-CC2 bezeichnet werden) für Grund- und elektronisch angeregte Zustände berichtet. Diese Ergebnisse für Bindungsabstände, harmonische Schwingungsfrequenzen und adiabatische und 0-0-Anregungsenergien werden mit experimentellen Daten verglichen, um die Genauigkeit der Methode zu validieren.

Es zeigt sich, dass beide Varianten der Spinskalierung die Robustheit von CC2 gegen starke Korrelationseffekte verbessern und für diese Methode zu einer noch stärkeren Verbesserung als für MP2 führen. Die Spinskalierung erhöht systematisch die Genauigkeit von CC2 für $\pi \leftarrow \pi$ - und $n \leftarrow \pi$ -Übergänge, wenn die Gleichgewichtsgeometrien auf gleichem Niveau bestimmt werden.



A generalization of the spin-component scaled and scaled opposite-spin modifications of second-order Møller-Plesset perturbation theory to the approximate coupled-cluster singles-and-doubles model CC2 (termed SCS-CC2 and SOS-CC2) for ground and excited state is reported. Computational results for bond distances, harmonic frequencies, adiabatic and 0-0 excitation energies are compared with experimental results to benchmark their performance.

It is found that both variants of the spin-scaling increase the robustness of CC2 against strong correlation effects and lead for this method even to somewhat larger improvements than observed for second-order Møller-Plesset perturbation theory. The spin-component scaling also enhances systematically the accuracy of CC2 for 0-0 excitation energies for $\pi \leftarrow \pi$ and $n \leftarrow \pi$ transitions, if geometries are determined at the same level.

Volker Staemmler

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

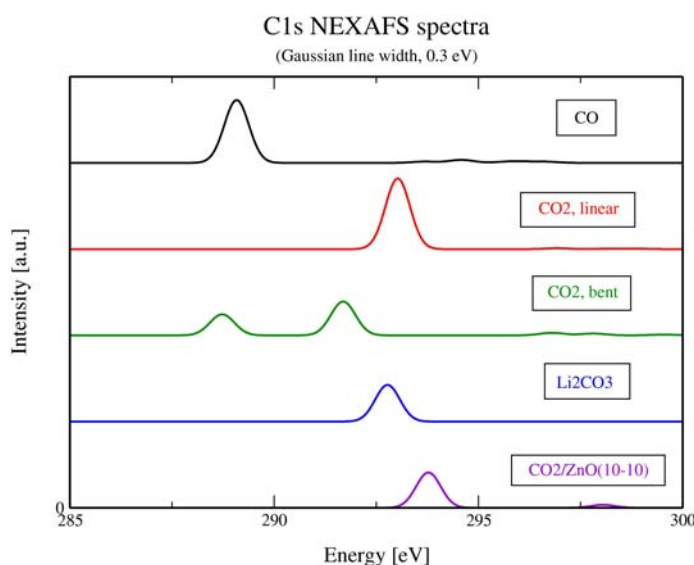
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

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

K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, R. Kováčik, B. Meyer, F. Traeger, D. Langenberg, Th. Strunskus, M. Kunat, Ch. Wöll, *Z. Phys. Chem.* **222** (2008) 891-915. CO₂ Adlayers on the Mixed Terminated ZnO(10-10) Surface Studied by He Atom Scattering, Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Electronic Structure Calculations

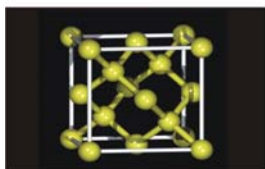
Die Adsorption von CO₂ an der gemischt-terminierten ZnO(10-10) Oberfläche ist mit einer Vielzahl experimenteller und theoretischer Untersuchungsmethoden charakterisiert worden: He-Atom Streuung, Röntgen-Photoelektronen-Spektroskopie, periodische Dichtefunktional-Theorie (DFT) und ab initio Cluster-Rechnungen. Alle diese Methoden stimmen darin überein, dass CO₂ bei niedrigen Bedeckungen als Carbonat-Spezies (CO₃²⁻) in einer dreizähligen Adsorptionseometrie an der ZnO(10-10) Oberfläche gebunden ist. Die berechneten XPS (Röntgen-Photoelektronen-Spektroskopie) und NEXAFS (Röntgen-Photoabsorptions-Spektroskopie) Spektren stimmen gut mit den experimentellen Daten überein und sind nur mit einer adsorbierten Carbonat-Spezies vereinbar. Die Abbildung zeigt, dass die berechneten C1s NEXAFS-Spektren deutliche Unterschiede zwischen CO, linearem und gewinkeltem CO₂ (alle in der Gasphase) und adsorbiertem CO₂ aufweisen, während letzteres einem typischen Carbonat, z.B. Li₂CO₃, sehr ähnlich ist.



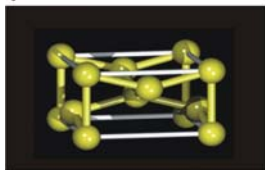
The adsorption of CO₂ on the mixed terminated ZnO(10-10) surface has been characterized by a variety of experimental and theoretical techniques: He-atom scattering, X-ray photoelectron spectroscopy, periodic density functional theory (DFT) and ab initio cluster calculations. All these methods agree in their conclusion that in the low-coverage phase CO₂ is adsorbed in the form of a carbonate species (CO₃²⁻) with a tridentate adsorption geometry. The calculated XPS (X-ray photoelectron spectra) and NEXAFS (near edge X-ray absorption fine structure) data are in good agreement with experiment and are only compatible with an adsorbed carbonate species. The Figure shows that the calculated C1s NEXAFS spectra exhibit considerable differences between CO, linear and bent CO₂ (all in the gas phase) and adsorbed CO₂, while the latter is very similar to a typical carbonate compound, e.g. Li₂CO₃.

J. Behler, R. Martoňák, D. Donadio, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 185501.
Metadynamics simulations of the high-pressure phases of silicon employing a high-dimensional neural network potential

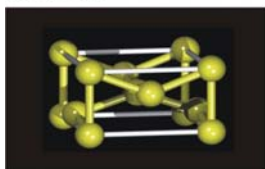
diamond



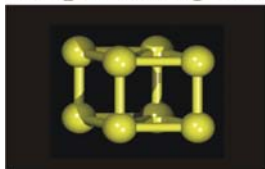
β-tin



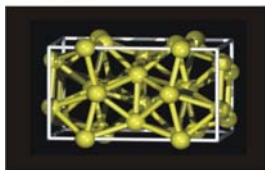
Imma



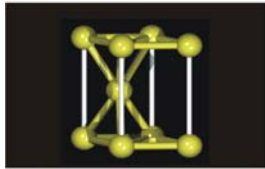
simple hexagonal



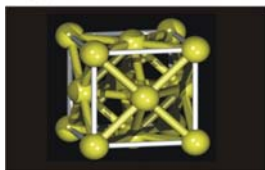
Cmca



hcp



fcc



11 GPa

13 GPa

15 GPa

38 GPa

42 GPa

79 GPa

Die Berechnung der Eigenschaften von Materialien erfordert die Kenntnis der Kristallstruktur. Die experimentelle Bestimmung von Kristallstrukturen unter extremen Bedingungen wie hohen Drücken und Temperaturen ist jedoch oft sehr aufwendig. Aus diesem Grund hat die theoretische Vorhersage von Kristallstrukturen in den letzten Jahren stetig an Bedeutung gewonnen. Oft sind diese Untersuchungen jedoch mit einem extrem hohen Rechenaufwand verbunden.

Durch Kombination der Metadynamik-Methode zur Simulation von druckinduzierten Phasenübergängen mit einem neuartigen hochdimensionalen Potential, das auf künstlichen neuronalen Netzen basiert, ist es nun möglich, systematisch Phasendiagramme von Festkörpern zu untersuchen. Die Methode hat etwa die Genauigkeit der Dichtefunktionalrechnungen, die zur Konstruktion des Potentials verwendet werden, ist jedoch viele Größenordnungen schneller, so dass ausgedehnte Studien möglich werden. Am Beispiel von Silizium konnte gezeigt werden, dass mit dieser Methode die vollständige Abfolge von Hochdruckphasen erhalten werden kann.

The knowledge of the atomic structure of a material is a prerequisite for the calculation of its properties. The experimental determination of crystal structures under extreme conditions like high pressures and temperatures is often an elaborate task. Thus in recent years crystal structure prediction has gained an important role in theory. Often, however, such theoretical studies are computationally very demanding.

By combining the metadynamics method for the simulation of pressure-induced phase transitions with a new high-dimensional neural network-based potential it is now possible to investigate phase diagrams of solids in a systematic way. The method is about as accurate as the density-functional theory calculations used in the construction of the potential, but at the same time it is several orders of magnitude faster enabling extended studies. Using silicon as an example system it could be shown that the full sequence of high-pressure phases can be obtained in a series of simulations.

Werner Kutzelnigg

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

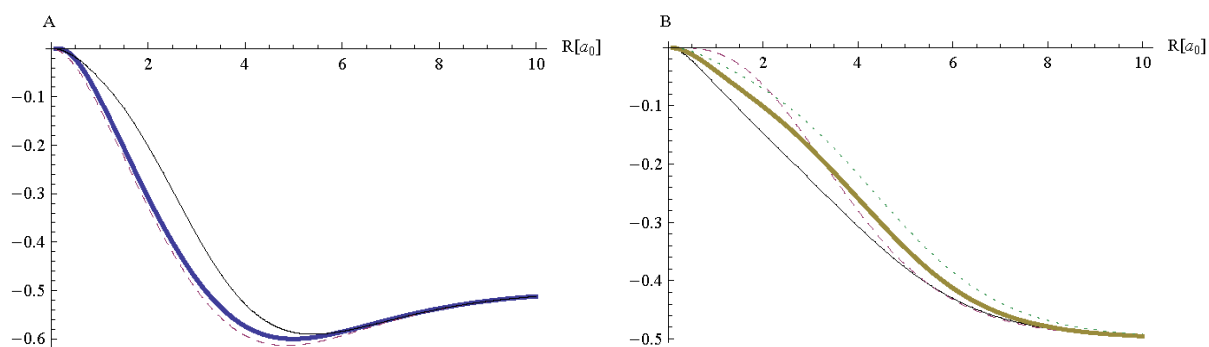
Tel.: ++49-(0)234-3226200; FAX: ++49-(0)234-3214109

e-mail: Werner.Kutzelnigg@rub.de

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

R. Jaquet, W. Kutzelnigg, *Chem. Phys.* **346**, (2008) 69. Non-adiabatic theory in terms of a single potential energy surface. The vibration-rotation levels of H_2^+ and D_2^+

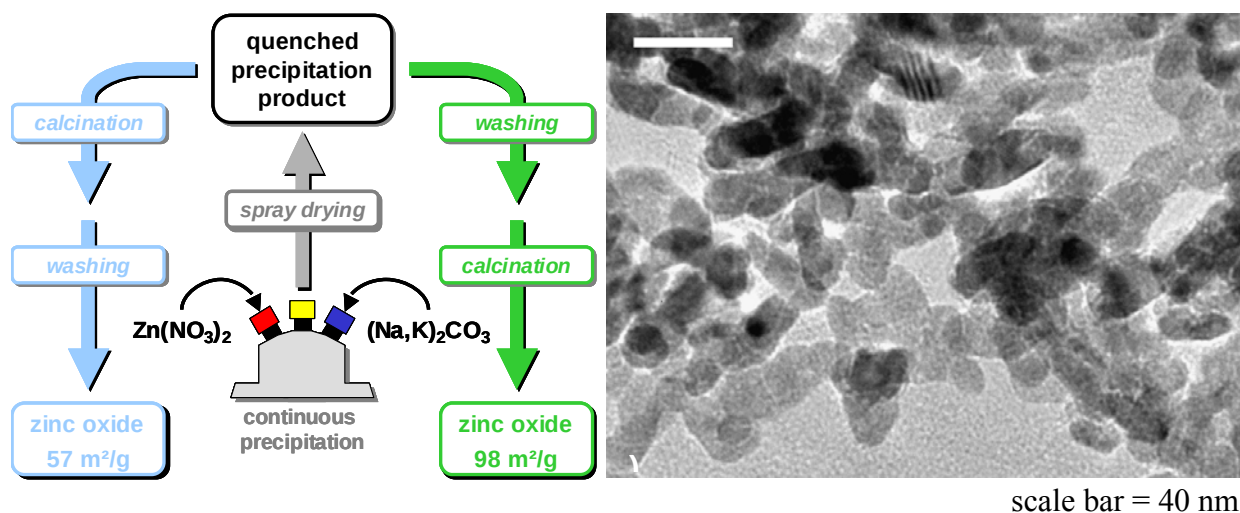
Die traditionelle Formulierung einer molekularen Wellenfunktion, die die Bewegung der Elektronen und der Kerne im Rahmen der Born-Hierarchie beschreibt, erfasst die Beteiligung der Elektronen an Schwingungs- oder Rotations-Bewegungen nur im Rahmen einer voll nicht-adiabatischen Behandlung, bei der das Konzept einer einzigen Potentialfläche für einen elektronischen Molekülzustand ganz aufgegeben wird. Es gibt ein alternatives Vorgehen, das auf einer exakten Separation in allen Dissoziationskanälen beruht, und das zu einem effektiven Hamilton-Operator für die Kernbewegung mit einer Geometrie-abhängigen effektiven Masse führt, die für Rotation und Schwingung verschieden ist. Jetzt wird dieses Verfahren numerisch an den Systemen H_2^+ und D_2^+ getestet, deren Rotations-Schwingungs-Spektren mit spektroskopischer Genauigkeit reproduziert werden, d.h. mit Fehlern in der Größenordnung von 0.01 cm^{-1} . Das ist wesentlich genauer, als es mit einer Geometrie-unabhängigen effektiven Masse möglich ist. Die Korrekturen $A(R)$ für die 'Schwingungsmasse' und $B(r)$ für die 'Rotationsmasse' sind dargestellt in jeweils drei Näherungen. $A = -0.5$ (oder $B=-0.5$) bedeutet 'Atom-Masse', $A = 0$ (oder $B=0$) bedeutet 'Kernmasse'.



The traditional formulation of a molecular wave function describing the motion of the electrons and the nuclei, in terms of the Born hierarchy, does not allow to account for the participation of the electrons in vibrational or rotational motions, except by recurring to a fully non-adiabatic treatment, abandoning completely the concept of a single potential energy surface for one electronic state of the molecule. An alternative approach has been presented recently, which is based on an exact separation in all possible dissociation limits, and which leads to a Hamiltonian for the nuclear motion with a geometry-dependent effective nuclear mass, that is different for vibration and rotation. This approach is now tested numerically. We account for the vibration rotation spectrum of H_2^+ and D_2^+ in their electronic ground states in terms of a single potential energy curve, with spectroscopic accuracy, i.e. with errors of the order of a few hundredths of a cm^{-1} . We bypass by far the accuracy that is achievable in terms of a geometry-independent effective mass. The corrections $A(R)$ for the vibrational mass and $B(r)$ for the rotational mass are plotted in three approximations (best: bold curve). $A = -0.5$ (or $B=-0.5$) means 'atomic mass', $A = 0$ (or $B=0$) means 'nuclear mass'.

S. Kaluza, M.K. Schröter, R. Naumann d'Alnoncourt, T. Reinecke, M. Muhler, *Adv. Funct. Mater.* **18** (2008) 3670-3677. High Surface Area ZnO Nanoparticles via a Novel Continuous Precipitation Route

Es wurden Zinkoxid-Nanopartikel mit hoher spezifischer Oberfläche durch eine neue kontinuierliche Fällungsmethode synthetisiert, die auf der Kopplung eines Mikromischers mit einem Labor-Sprühtrockner beruht. Das polykristalline Material wurde durch schnelle turbulente Fällung von wässrigen Zinknitrat-Lösungen mit Natrium- oder Kaliumcarbonat-Lösungen erhalten. Das Altern dieser Niederschläge wurde durch den schlagartigen Entzug des Wassers beim Versprühen im Sprühtrockner unterbunden. Je nach Fällungsmittel und der Reihenfolge der angewandten Grundoperationen (Kalzinieren, Waschen) konnten spezifische Oberflächen bis zu $98 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ erzielt werden. Nanoskaliges Zinkoxid wird als transparente Elektrode, Weißpigment, UV-Schutzmittel, in Autoreifen oder als Gassensor (H_2 , NO_x) eingesetzt.



High surface area ZnO nanoparticles are synthesized by applying a novel continuous precipitation method using a micromixer coupled directly to a bench-top spray dryer. The polycrystalline material is obtained by fast turbulent precipitation from aqueous zinc nitrate solutions with either sodium or potassium carbonate followed by immediate quenching of the aging due to the rapid water removal. Specific surface areas up to $98 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ are obtained, depending on the precipitant and the sequence of unit operations applied after precipitation.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

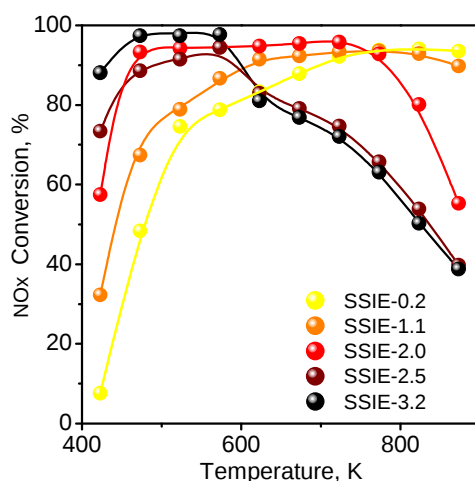
Tel.: +49-(0)234-3222088; FAX: +49-(0)234-3214115

email: Wolfgang.Gruenert@techem.rub.de

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

M. Schwidder, S. Heikens, A. De Toni, S. Geisler, M. Berndt, A. Brückner, W. Grünert, J. Catal. **259** (2008) 96-103. The role of NO₂ in the Selective Catalytic Reduction of Nitrogen Oxides over Fe-ZSM-5 Catalysts – Active Sites for the Conversion of NO and of NO/NO₂ mixtures

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 Dieselaabgasen 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.

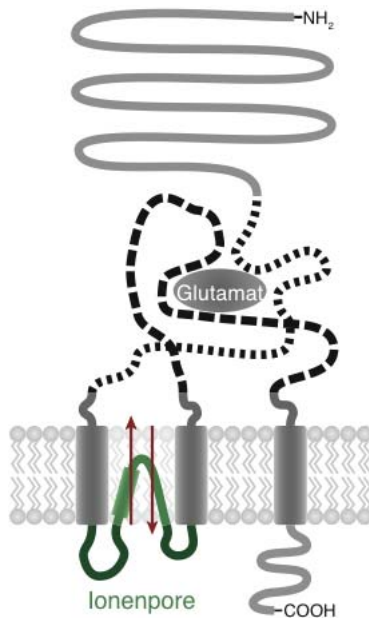


In NO_x abatement for Diesel exhaust, the selective catalytic reduction (SCR) of the nitrogen oxides by urea, is used to introduce the reductant ammonia, is near to commercial breakthrough. The exhaust NO is partially oxidized to NO₂ because NO/NO₂ mixtures are converted at a much higher rate than NO alone. Iron-modified zeolites are about to displace the traditional traditional vanadium-based catalysts in this application although the stability of zeolites has been considered insufficient in exhaust gas environment. We have now found that the SCR of NO/NO₂ mixtures (“fast SCR”) uses different active sites than the SCR of NO (“standard SCR”). The former proceeds on highly active isolated Fe oxo species, which survive harsh hydrothermal conditions. Standard SCR proceeds on a variety of sites, including oligomeric Fe oxo clusters, which aggregate and deactivate under real conditions. Despite the apparent similarity of fast and standard SCR, these are different reactions with different mechanisms. Admixture of NO₂ to NO opens a new reaction channel to the system, the nature of which will be studied in more detail in the future.

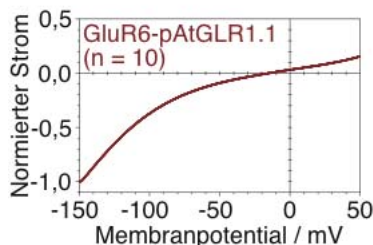
D. Tapken, M. Hollmann, *Journal of Molecular Biology* **383**(1) (2008) 36-48. *Arabidopsis thaliana* glutamate receptor ion channel function demonstrated by ion pore transplantation.



Arabidopsis thaliana



Struktur eines Glutamaterezeptors



Strom-Spannungs-Kennlinie der Ionenpore des pflanzlichen Glutamaterezeptors AtGLR1.1 nach Einbau in den Säuger-Kainatrezeptor GluR6

Glutamaterezeptoren sind glutamataktivierte Ionenkanäle, die eine entscheidende Rolle bei der Signalweiterleitung im Zentralen Nervensystem von Wirbeltieren spielen. Pflanzen besitzen zwar kein Nervensystem, aber dennoch eine große Zahl von Proteinen, die den Glutamaterezeptoren ähneln. Diese Proteine wurden mit der Regulation der Wurzelentwicklung, dem Ionentransport innerhalb der Pflanze und verschiedenen Signal- und Stoffwechselwegen in Verbindung gebracht. Auf molekularer Ebene ließen sich die pflanzlichen Glutamaterezeptoren aber bislang nicht charakterisieren. Daher war bisher nur vermutet, aber nicht bewiesen worden, dass sie ebenfalls funktionelle Ionenkanäle sind. Anhand der strukturellen Ähnlichkeit mit tierischen Glutamaterezeptoren konnte die Domäne identifiziert werden, die möglicherweise Ionen leiten kann. Diese Ionenporendomäne haben wir aus pflanzlichen Glutamaterezeptoren in Glutamaterezeptoren aus der Ratte transplantiert, um ihre Funktion experimentell untersuchen zu können. Dabei zeigte sich, daß einige pflanzliche Glutamaterezeptoren in der Tat funktionelle Ionenporen besitzen, die Kationen leiten können. Dies stellt den ersten direkten Hinweis dar, dass pflanzliche Glutamaterezeptoren tatsächlich als Ionenkanäle arbeiten.

Glutamate receptors are glutamate-activated ion channels that play a decisive role in signal transduction in the vertebrate central nervous system. Although lacking a nervous system, plants surprisingly have a number of proteins that resemble glutamate receptors. These proteins have been implicated in the regulation of root development, ion transport, and various metabolic and signaling pathways. However, molecular characterization of plant glutamate receptors has not been successful so far. Therefore, it has only been speculated but not yet proven that they are ion channels as well. The structural similarity with animal glutamate receptors allowed the identification of the domain that may conduct ions. We transplanted this ion pore domain from plant glutamate receptors to rat glutamate receptors. Analysis of the resulting chimaeric proteins revealed that some plant glutamate receptors indeed have functional ion pores that can conduct cations. This is the first direct indication that plant glutamate receptors are meant to serve as ion channels.

Guiscard Seeböhm

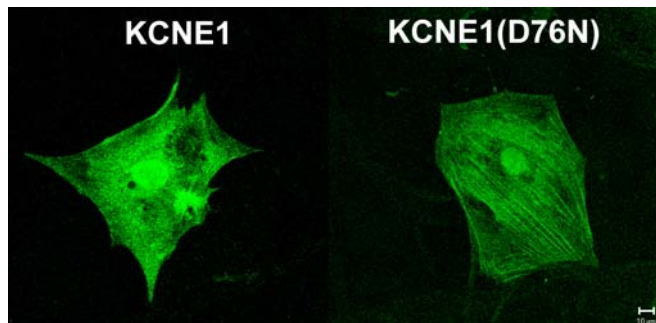
AG Kationenkanäle – Biochemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-324233; FAX: ++49-(0)234-3214034

email: guiscard.seeböhm@rub.de

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

Seeböhm G, Strutz-Seeböhm N, Ureche ON, Henrion U, Baltaev R, Mack AF, Korniyshuk G, Steinke K, Tapken K, Pfeufer A, Käb S, Bucci C, Attali B, Merot J, Tavaré JM, Hoppe UC, Sanguinetti MC and Lang F. Long QT syndrome-associated mutations in KCNQ1 and KCNE1 subunits disrupt normal endosomal recycling of IKs channels (2008). *Circ. Res.*, 103(12):1451-7.



Empfindliche Menschen können bei Stress Herzrhythmusstörungen bekommen, die zu Ohnmachtsanfällen und im schlimmsten Fall zum plötzlichen Herztod führen können. Wir haben nun auf molekularer Ebene untersucht, wie ein gestörtes Zusammenspiel des Stress-Hormons Cortisol mit mutierten Ionenkanälen den plötzlichen Herztod

auslösen können. Im Jahr 2007 konnten wir zeigen, dass der IKs-Kanal bei Gesunden durch das Stresshormon Cortisol stimuliert wird. Cortisol aktiviert in Herzzellen ein bestimmtes Enzym (SGK1). Dieses wiederum löst eine Signalkaskade aus, die mehr IKs-Kanäle aus Speichern in der Zelle in die Plasmamembran, also an die Zelloberfläche, transportiert, wo sie ihre Funktion entfalten können. Die Funktion der gesunden und Krankheitsassoziierten Ionenkanäle untersuchten wir elektrophysiologisch und mikroskopisch: Manche mutierte Kanäle, die bei Patienten mit erblichen Herzrhythmusstörungen vorkommen (KCNE1(D76N)), reagieren anders auf Cortisol als die Kanäle von Gesunden (KCNE1). Die mutierten Kanäle lokalisieren anders in Kardiomyozyten (siehe Darstellung) und gelangen nicht wie die gesunden in die intrazellulären Speicher. Deshalb kann das Enzym SGK1 den Transport dieser mutierten IKs-Kanäle in die Plasmamembran nicht mehr stimulieren, und es werden weniger Kanäle in die Plasmamembran eingebaut, so dass ihre Aktivität insgesamt abnimmt.

Physical and emotional stress is accompanied by release of stress hormones such as the glucocorticoid cortisol. This hormone upregulates the serum- and glucocorticoid-inducible kinase 1 (SGK1) which in turn stimulates I_{Ks} , a slow delayed rectifier potassium current that mediates cardiac action potential repolarization. Mutations in I_{Ks} channel alpha (KCNQ1, KvLQT1, Kv7.1) or beta (KCNE1, IsK, minK) subunits cause long QT syndrome (LQTS), an inherited cardiac arrhythmia associated with increased risk of sudden death. Together with the GTPases RAB5 and RAB11, SGK1 facilitates membrane recycling of KCNQ1 channels. Here, we show altered SGK1-dependent regulation of LQTS-associated mutant I_{Ks} channels. While some mutant KCNQ1 channels had reduced basal activity but were still activated by SGK1, currents by other mutant channels were paradoxically reduced by SGK1. The LQTS-associated KCNE1(D76N) mutant channels were similarly downregulated by SGK1 because of a disrupted RAB11-dependent recycling. Mutagenesis experiments indicate that stimulation of I_{Ks} channels by SGK1 depends on residues H73, N75, D76, and P77 in KCNE1. Identification of the channel recycling pathway and its modulation by stress-stimulated SGK1 provides novel mechanistic insight into potentially fatal cardiac arrhythmias triggered by physical or psychological stress.

Rolf Heumann

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

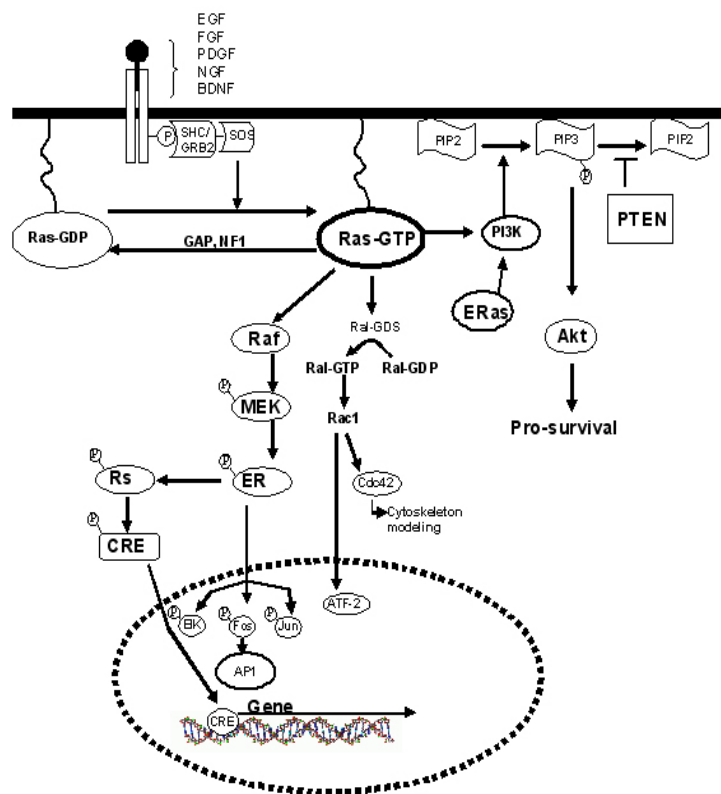
Tel.: ++49-(0)234-3224230; FAX: ++49-(0)234-3214105

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

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

K.Chakrabarty, R. Heumann *Biol. Chem.* **389** (2008) 791-798. Prospective of Ras signaling in stem cells.

Der Ras Signalweg spielt eine zentrale Rolle während der ontogenetischen Entwicklung und kontrolliert praktisch alle eukaryotischen Zellen. Innerhalb von mehr als 30 Jahren wurde im Bereich der Krebsforschung über Ras eine immense Zahl von Publikationen etabliert. Während Systembiologen bereits anfangen Rückkoppelungsmechanismen und Kreuz-Wechselwirkungen des Ras Signalwegs mit anderen Signalwegen in Raum und Zeit erfolgreich zu programmieren, gibt es relativ wenig Informationen darüber, wie Ras die Selbsterneuerungen

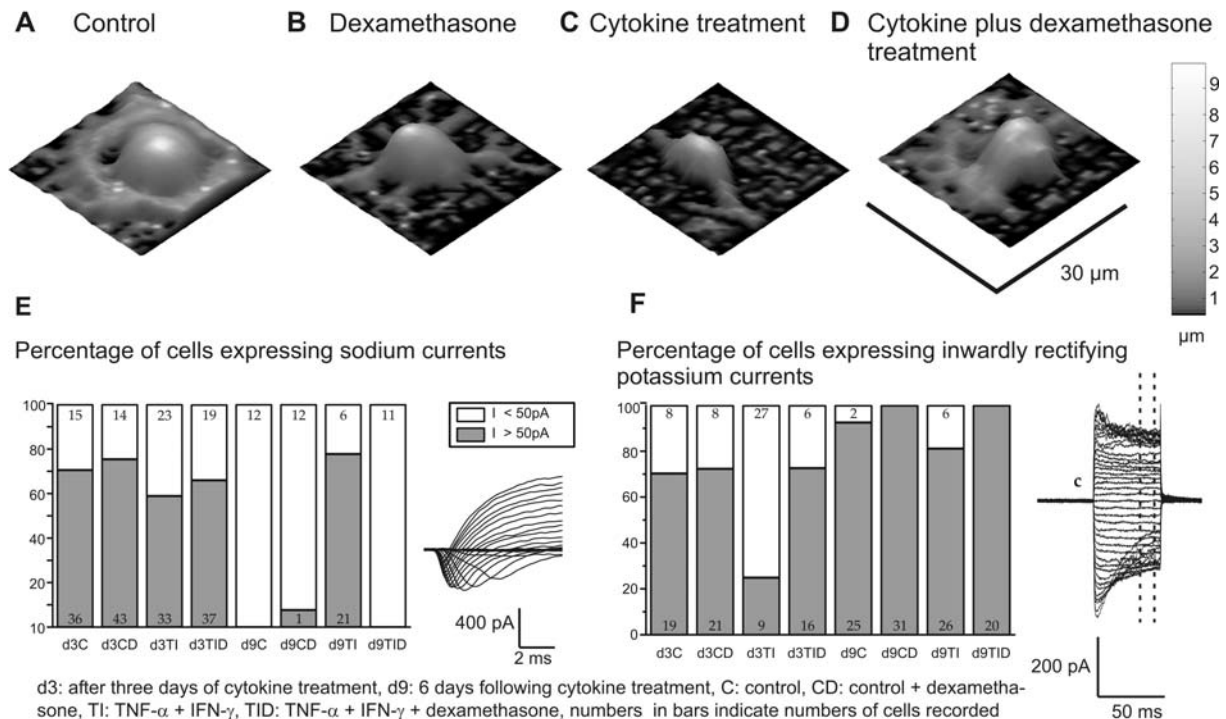


von Stammzellen reguliert. Spezifisch untersuchen wir wie Ras sowohl die Stammzellen, als auch die daraus differenzierenden frühen proliferierenden Zellen und das Überleben von Zellen steuert. Wir gehen davon aus, dass eine interdisziplinäre Zusammenführung des Wissens über Proteinstruktur und Entwicklungsbiologie erhebliche Fortschritte im Verständnis der Krebsstammzellbiologie, der Stammzelltherapie bei degenerativen Krankheiten, bei genetisch bedingten Krankheiten und bei der Differenzierung von Zelllinien im normalen Organismus bringen wird.

The Ras signaling pathway plays a predominant role during development and controls diverse biological process in all eukaryotic cells. With more than 30 years of investigative research on Ras, an immense volume of publications has been collected in the field of cancer research. While systems biology starts putting together feedback loops and crosstalks between Ras signaling pathways in space and time, rather limited information is available about how Ras intracellular signaling translates into the understanding of stem cell development. Here, we have put together current aspects of Ras regulating stem cell self-renewal, pluripotency, precursor cell proliferation and survival in cell culture systems and in the whole organism. We predict that merging structural and developmental knowledge in Ras research will synergize to help understanding stem cell biology in cancer, replacement therapy, genetic disease and normal lineage development.

S. A Mann, B. Versmold, R. Marx, S. Stahlhofen, I. D. Dietzel, R. Heumann, R. Berger, *J. Neuroinflammation* 5 (2008) 39. Corticosteroids reverse cytokine-induced block of survival and differentiation of oligodendrocyte progenitor cells from rats

Die spastische Lähmung ist eine häufige Komplikation bei sehr unreifen Frühgeborenen. Eine Mögliche Ursache der zugrunde liegenden Schädigung von Oligodendrozyten-Vorläuferzellen (OPCs) könnte die Freisetzung der Zytokine TNF- α und IFN- γ aus Satellitenzellen sein. Wir konnten mit Hilfe von SICM-Scans zeigen, dass eine Exposition von OPCs mit diesen Zytokinen die morphologische Differenzierung der OPCs hemmt (A-D). Patch-Clamp Ableitungen zeigten, dass die morphologisch unreifen Zellen auch die Na⁺-Ströme unreifer OPCs beibehalten (E, d9TI). Die Zytokin-Behandlung führt zu einer Herabregulation einwärts-gerichteter K⁺-Ströme (F, d3TI) direkt nach der Zytokin-Exposition, was eine Schlüsselrolle bei der Schädigung der OPCs spielen könnte. Alle Zytokin-Effekte konnten durch Dexamethason blockiert werden, so dass eine Steroidbehandlung OPCs schützen könnte.



Cerebral palsy is a frequent complication of preterm delivery. It could be caused by proinflammatory cytokine (IFN- γ and TNF- α) release from satellite cells damaging oligodendrocyte progenitors (OPCs). Treatment of OPCs with these cytokines blocks the differentiation of OPCs at the level of morphological maturation, as shown with SICM-images (A-D). Patch clamp recordings showed, that the undifferentiated OPCs (C) continue to express Na⁺ currents (E, d9TI). Furthermore, we obtained evidence that the cytokine treatment leads to a down-regulation of inwardly rectifying K⁺ currents directly after treatment (F, d3TI), which could play a key role in the damaging effect of the cytokines. All cytokine effects were counteracted by dexamethasone co-application, suggesting that steroid treatment may protect OPCs.

Raphael Stoll

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

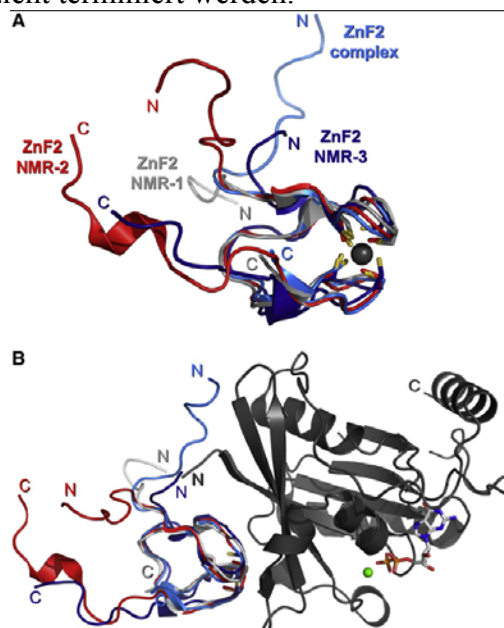
Tel.: ++49-(0)234-3225466; FAX: ++49-(0)234-3205466

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

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

N. Schrader, C. Koerner, K. Koessmeier, J.-A. Bangert, A. Wittinghofer, R. Stoll, I.R. Vetter, *Structure* **16** (2008), 1116-1125. The crystal structure of the Ran-Nup152ZnF2 complex: a general docking site at the nuclear pore complex.

Nucleoporin (Nup) 153 ist ein hochmobiles, multifunktionales und essentielles Kernporenprotein. Es enthält vier Zinkfinger motive, die für die Regulation der Transport-Rezeptor/Cargo-Interaktionen mittels Bindung an das kleine Guaninnukleotid-bindende Protein Ran äußerst wichtig sind. Diese Interaktion ist dabei unabhängig vom Phosphorylierungszustand des Nukleotides. Ran bindet mit höchster Affinität an das zweite Zinkfingermotiv des Nup153 (Nup153ZnF2). Es konnte sowohl die Struktur des Nup153ZnF2 in Lösung als auch die Kristallstruktur des Ran-Nup152ZnF2-Komplexes, die eine neuartige Ran-Ran-Interaktionspartner-Bindungsstelle aufzeigt, bestimmt werden. Diese Komplexstruktur schließt bei Bindung des Nup153ZnF2 an Ran die Bildung eines Ran-Importin-b-Komplexes aus. Diese Erkenntnis legt das Vorhandensein eines lokalen Nup153-vermittelten Ran-Reservoirs am nukleoplasmischen distalen Ring der Kernpore nahe, an dem der Nukleotidaustausch in einem ternären Nup153-Ran-RCC1-Komplex stattfindet, sodass Importkomplexe effizient terminiert werden.



Nucleoporin (Nup) 153 is a highly mobile, multifunctional, and essential nuclear pore protein. It contains four zinc finger motifs that are thought to be crucial for the regulation of transport-receptor/cargo interactions via their binding to the small guanine nucleotide binding protein, Ran. We found this interaction to be independent of the phosphorylation state of the nucleotide. Ran binds with the highest affinity to the second zinc finger motif of Nup153 (Nup153ZnF2). Here we present the crystal structure of this complex, revealing a new type of Ran-Ran interaction partner interface together with the solution structure of Nup153ZnF2. According to our complex structure, Nup153ZnF2 binding to Ran excludes the formation of a Ran-importin-b complex. This finding suggests a local Nup153-mediated Ran reservoir at the nucleoplasmic distal ring of the nuclear pore, where nucleotide exchange may take place in a ternary Nup153-Ran-RCC1 complex, so that import complexes are efficiently terminated.

Bernhard Hovemann

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

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

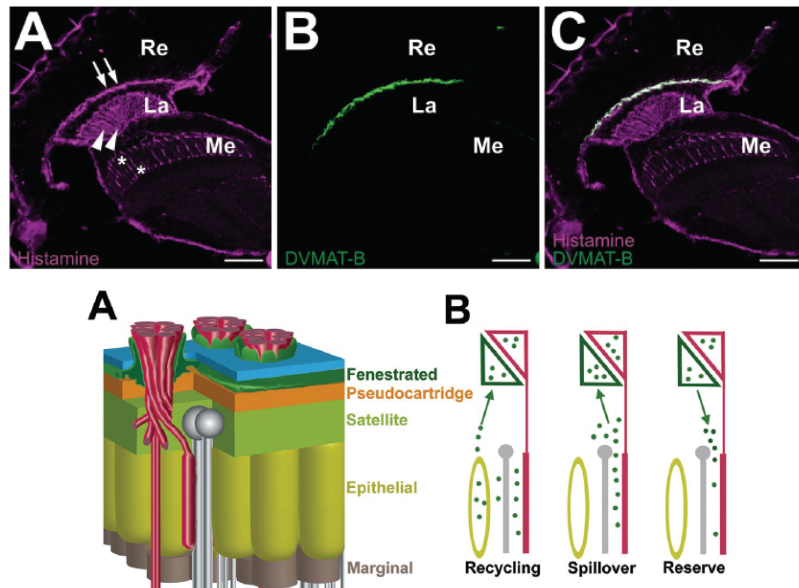
email: bernhard.hovemann@rub.de

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

R. Romero-Calderon, G. Uhlenbrock, J. Borycz, A.F. Simon, A. Grygoruk, S.K. Yee, A. Shyer, L.C. Ackerson, N.T. Maidment, I.A. Meinertzhagen, B.T. Hovemann, D.E. Krantz, (2008) A glial variant of the Vesicular Monoamine Transporter is required to store histamine in the *Drosophila* visual system *PLoS Genet* 4 1-13

Pressemitteilung: <http://www.pm.rub.de/pm2008/msg00369.htm>

Wir zeigen hier, dass eine neuartige *Drosophila* VMAT Spleißvariante, 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.

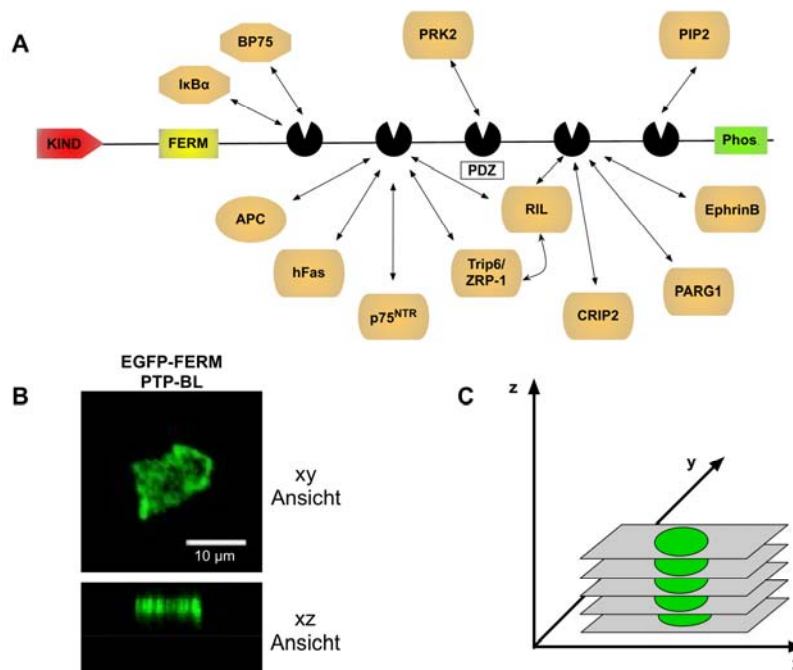


Figur: Immunzytochemische Markierung von DVMAT-B (grün) und Histamin (magenta) im 10µm Horizontalschnitt durch die optischen Loben von *Drosophila*. Modell zur Funktion von DVMAT-B im Histaminkreislauf.

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.

N. Stenzel, K.S. Erdmann *Bioforum* 5, (2008) 25-27 PDZ Domänen- Molekularer Baukasten der Natur

PDZ-Domänen sind kleine globuläre Protein/Protein-Interaktionsdomänen. Seit ihrer Entdeckung Anfang der neunziger Jahre hat sich gezeigt, dass dieses Modul zu einem der verbreitetsten Interaktionsmodule in mehrzelligen Organismen gehört. Am Beispiel der PDZ-Domänen kann in idealer Weise nachvollzogen werden, welche einfachen Prinzipien die belebte Natur verwendet, komplexe, dynamische Proteinstrukturen aufzubauen. Wir haben den durch das Multi-PDZ-Domänen Protein PTP-BL vermittelten Proteinkomplex charakterisiert. In Epithelzellen ist dieses Protein fast ausschließlich an der apikalen Seite lokalisiert. Wir konnten eine Beteiligung dieses Komplexes an der Regulation der Zytokinese (der letzte Schritt der Zellteilung) aber auch an der Signaltransduktion von EphrinB-Rezeptoren nachweisen.



A: Übersicht über den PDZ-Domänen vermittelten Proteinkomplex der Protein-Tyrosin-Phosphatase PTP-BL. **B:** Apikale Lokalisation der Protein-Tyrosin-Phosphatase PTP-BL (FERM Domäne) (grün) in MDCK-Epithelzellen (konfokale Fluoreszenzaufnahmen). **C:** Schema der konfokalen Aufnahmen (sogenannter Stacks) für die in B gezeigten Fluoreszenzbilder.

PDZ domains are small globular protein/protein interaction domains. Since their first description in the early nineties it has become clear that PDZ domains are the most common interaction module in metazoans. PDZ domains are a prime example how nature builds complex and dynamic macromolecular protein structures. We have characterized the protein complex mediated by the multi-PDZ domain PTP-BL. In epithelial cells this protein is localized in a polarized fashion at the apical membrane domain. Moreover, we could show a role for this protein complex in the regulation of cytokinesis (the last step of cell division) and also a participation in the signalling pathway of the EphrinB-receptor.

Katrin Sommer

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

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

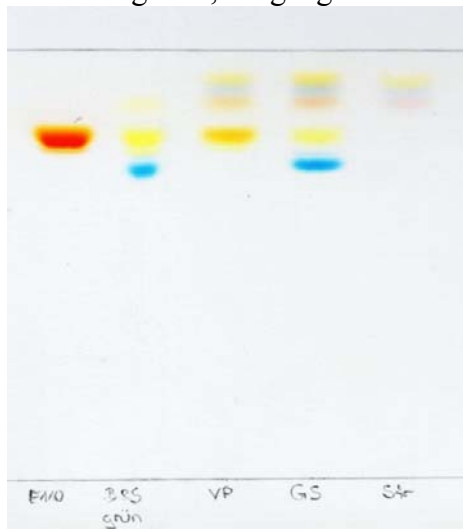
email: katrin.sommer@rub.de

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

H. Kleinhorst, K. Sommer: Schafwolle und Perlonstrümpfe – Isolierung und Identifizierung gelber und grüner Lebensmittelfarbstoffe. (Lamb's wool and nylons – Isolation and identification of yellow and green food colorants.) Unterricht Chemie, 19 (2008) 101, 24-27

Da es sich bei Lebensmitteln meist um Vielkomponentengemische handelt, ist es zur Analyse der Lebensmittelfarbstoffe meist nötig, diese zunächst zu isolieren. In der experimentellen Schulchemie sind dazu die Wollfaden- und die Polyamidmethode etabliert. Diesen Methoden liegt zu Grunde, dass die meisten synthetischen Lebensmittelfarbstoffe Sulfonsäuregruppen besitzen, die mit den basischen Aminogruppen des Polyamids bzw. des α -Keratins von Schafwollhaaren entsprechende Bindungen eingehen können. Als wesentlich kostengünstigere Alternative zum Einsatz von Polyamidpulver konnte eine Methode entwickelt werden, bei der Perlonstrumpfhosen zur Isolierung der Farbstoffe eingesetzt wird. Nach gelungener Isolation (z.B. aus Puddingpulver und Götterspeise) kann die Identifizierung der Farbstoffe mittels Papier- und/oder Dünnschichtchromatographie erfolgen.

Diese neue Methode zur Isolierung von Lebensmittelfarbstoffen findet durch Implementierung in Lehrerfortbildungen, wie beispielsweise die in Kooperation mit Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte und Prof. Dr. Gerald Dyker im März 2008 durchgeführte Veranstaltung „Farbe und Farbigkeit“, Eingang in die Schulpraxis.



Dünnschichtchromatogramm: E 110 (Gelborange S), Back- und Speisefarbe grün, Farbstoff aus Vanille-Puddingpulver, Götterspeise, Strumpfhose (Blindprobe)

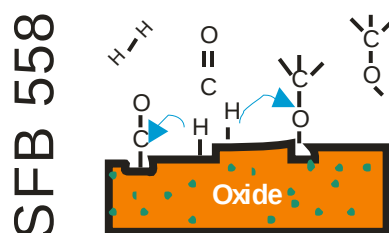
Due to the fact that foods in general are multi-component mixtures, it is usually necessary to isolate the food colorants before analysing them is possible. For this purpose the wool thread- and the polyamide method are established for chemical experiments in schools. These methods are based on the fact that most synthetical food colorants contain sulpho groups which bind to basic amino groups of polyamide or the α -creatine of lamb's wool. As a cost-saving alternative to polyamide a new method using nylons to isolate the food colorants was developed. After the isolation the food colorants can be identified by using paper chromatography and/or thin layer chromatography.

The implementation of the new developed method for isolating food colorants in programs of further teacher training, e.g. the course "colour and chromaticity" which was held in cooperation with Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte and Prof. Dr. Gerald Dyker in March 2008, will pave the way into teaching practice at school.

Sonderforschungsbereich 558: „Metall-Substrat-Wechselwirkungen in der heterogenen Katalyse“

Sprecher: Prof. Dr. Ch. Wöll (Physikalische Chemie I),
Stellvertreter: Prof. Dr. M. Muhler (Technische Chemie)
<http://www.sfb558.de>

Thema des im Bereich der heterogenen Katalyse angesiedelten SFB ist die Untersuchung der Metall-Träger-Wechselwirkung. Nachdem die industrielle Methanolsynthese aus Synthesegas ausgiebig und erfolgreich bearbeitet wurde, soll mit einer neuen Schwerpunktsetzung nun vor allem die selektive Oxidation kurzkettiger Alkohole im Zentrum der Arbeiten stehen. Neben konventionellen Metall (Au, Cu) / Träger (ZnO, TiO₂)-Kombinationen sollen auch unkonventionelle, neue Ansätze (MOFs als Trägermaterialien, Metallcluster in ionischen Flüssigkeiten) untersucht werden. Eine Aufklärung der Mechanismen der an diesen relativ komplexen und heterogenen Oberflächen ablaufenden chemischen Reaktionen soll einerseits durch detaillierte Experimente an Realkatalysatoren (nichtstationäre kinetische Messungen, Isotope, Spektroskopie) sowie durch Adsorptions- und Desorptionsexperimente an Modellsystemen (Einkristallobereflächen) erfolgen. Im letzteren Fall wird ein gründlicher Vergleich der Ergebnisse aus den spektroskopischen Techniken (IR, HREELS, Raman, UV/Vis) mit den Ergebnissen theoretischer Rechnungen durchgeführt. Neben statischen Berechnungen zur Struktur von chemischen Adsorbaten werden auch Reaktionspfade dynamisch simuliert. Von besonderer Bedeutung wird die Untersuchung von Dotiereffekten (z.B. durch Kupfer oder Wasserstoff) auf die chemische Reaktivität von Einkristallobereflächen und von Pulverpartikeln sein.



Subject of the collaborative research center located in the research area of heterogeneous catalysis is the investigation of metal-support-interactions. Since the industrial synthesis of methanol from synthesis gas has been extensively and successfully investigated, the new focus is set to work on the selective oxidation of short chain alcohols. Besides exploring conventional metal (Au, Cu) / support (ZnO, TiO₂) combinations it is now intended to follow also unconventional new approaches (MOFs as catalyst supports, metal clusters in ionic liquids). The elucidation of mechanisms for this chemical reaction proceeding at these relatively complex and heterogeneous surfaces will involve both detailed experiments with realistic catalysts (non stationary kinetic measurement, isotopic labeling, spectroscopy) and adsorption and desorption experiments using model systems (single crystal surfaces). A detailed comparison of results from spectroscopic techniques (IR, HREELS, Raman, UV/Vis) with results from theoretical calculations will be performed for the latter case. Besides static calculations concerning the structure of adsorbates, reaction pathways will be dynamically simulated. Special attention will be devoted to the investigation of the impact of doping effects (e.g. by copper or hydrogen) on the chemical reactivity of single crystals and powder particles.

Integriertes Graduiertenkolleg im Sonderforschungsbereich 558: „Physikalische und Chemische Prozesse an Oxidoberflächen: Vom Experiment zur Theorie“

Sprecher des SFB 558: Prof. Dr. Ch. Wöll (Physikalische Chemie I),

Stellvertreter: Prof. Dr. M. Muhler (Technische Chemie)

Koordinator: Dr. A.C. van Veen (Physikalische Chemie I / Technische Chemie)

<http://www.sfb558.de>

Das integrierte Graduiertenkolleg des SFB 558 hat ein fach- und disziplinübergreifendes Qualifizierungskonzept, welches in seiner wissenschaftlichen Akzentsetzung komplementär zur universitätsweit angelegten „Research school der Ruhr-Universität“ und zur fakultätsweit agierenden „Graduate school for chemistry and biochemistry“ angelegt ist. Zentral für die fachliche Ausbildung sind Fragestellungen zu chemischen Prozessen an oxidischen Substraten, die wegen ihrer Bedeutung für die Katalyse bereits seit längerem im Blickpunkt des wissenschaftlichen Interesses stehen. Neue Methoden der theoretischen Chemie ermöglichen im Zusammenspiel mit modernen experimentellen Techniken die genaue Beschreibung der Wechselwirkung kleiner Moleküle mit den Oberflächen einkristalliner Oxidsubstrate. Das Verständnis des Ablaufs der katalytischen Reaktion an realen und somit überaus komplexen Katalysatoren sowie die Entwicklung neuer Materialien profitiert stark von Erkenntnissen an idealen Modellen, so wie ungeklärte Fragestellungen bei Realsystemen neue Modellstudien stimulieren. Das Graduiertenkolleg wurde im Januar 2008 eingerichtet und hat bereits 30 Kollegiaten, die an zahlreichen interdisziplinären Veranstaltungen mit externen Gästen sowohl aus der Industrie als auch von anderen Forschungseinrichtungen, internen Seminaren und speziellen Kursangeboten zu experimentellen und theoretischen Techniken als auch weiterreichenden Qualifikationen teilnehmen. Auch in Zukunft soll die erfolgreich begonnene enge Verzahnung theoretischer Rechnungen und experimenteller Arbeiten an Oxidoberflächen zum Verständnis der dort stattfindenden chemischen Prozesse weiter gefestigt werden.

The integrated graduate school of the collaborative research center SFB 558 has a subject and disciple crossing qualification concept, being complementary designed to the university-wide working “research school of the Ruhr-Universität” and the faculty-wide acting “graduate school for chemistry and biochemistry”. Of central importance for the scientific education are questions concerning chemical processes at oxide substrates, which are historically in the focus of scientific interest due to their relevance in catalysis. In the interplay with modern experimental techniques new methods in theoretical chemistry allow a precise description of interactions between small molecules and the surface of single crystalline oxide substrates. The understanding of the course of catalytic reactions on real and therefore complex catalysts as well as the development of new materials benefits strongly from insights drawn with ideal models, as open questions concerning realistic systems stimulate new model studies. The graduate school was founded in January 2008 and counts already 30 members, who participate in numerous events with external guests, both from industrial and other research institutions, internal seminars and special courses on experimental and theoretical techniques as well as further spread qualifications. In view of the close future it is intended to strengthen the successfully started tight interlocking of theoretical calculations and experimental work on oxide surfaces to understand chemical processes occurring there.

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

Sprecher: Prof. Dr. Wolfram Sander (Organische Chemie 2),
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/for618/>

Der gewaltige Fortschritt der Chemie in den letzten zwei Jahrhunderten beruht auf dem Verständnis des Aufbaus von Molekülen aus Atomen und der Kunst der Synthese nahezu beliebig komplizierte Moleküle aus einfacheren Bausteinen. Die starken Wechselwirkungen zwischen Atomen, die zu den Molekülen führen, sind heute gut verstanden. Dies gilt nicht für die viel schwächeren Wechselwirkungen zwischen Molekülen, die zur Aggregation von Molekülen und zur Ausbildung sehr großer, komplexer Strukturen führen: zu Flüssigkeiten, Kristallen oder ganzen lebenden Zellen. Das Ziel der Forschergruppe 618, die 2006 von Forschern der Ruhr-Universität, der Universität Duisburg-Essen und der Universität Düsseldorf gegründet wurde, ist nun genau diese schwachen intermolekularen Wechselwirkungen zu verstehen. Mit ausgefeilten experimentellen und theoretischen Methoden sollen wichtige Fragen auf diesem Gebiet geklärt werden: Wie bilden sich Kristallkeime? Wie wachsen Molekülkristalle? Warum gibt es unterschiedliche Kristallformen für ein und dasselbe Molekül? Wie lagert sich Wasser an Moleküle an? Wie viele Wassermoleküle enthält das kleinste Tröpfchen Salzsäure? Wie entstehen Zwitterionen aus neutralen Aminosäuren?

Jetzt hat die Deutsche Forschungsgemeinschaft grünes Licht für eine zweite dreijährige Förderperiode gegeben. Mit Laserspektroskopie, ausgefeilten Techniken der Kristallisation, Messungen bei extrem tiefen Temperaturen nahe am absoluten Nullpunkt, neu entwickelten theoretischen Verfahren zur Simulation von Moleküldynamik und hochpräzisen Berechnungen soll nun ein umfassendes Bild intermolekularer Wechselwirkungen erhalten werden. Dahin ist es noch ein weiter Weg, aber die Mühen lohnen sich. Denn die uns umgebende belebte und unbelebte Welt wird von diesen Wechselwirkungen dominiert, ohne die es keine Molekülkristalle, Flüssigkeiten und auch kein Leben gäbe.

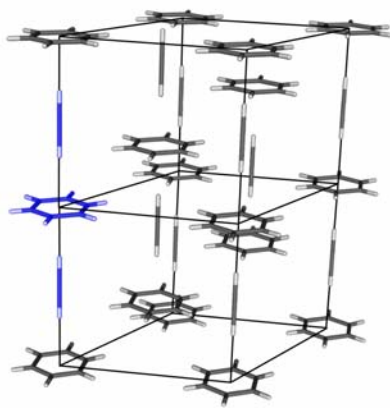


Abbildung 1. Ein Kristall aus Benzol und Acetylen, der mit Hilfe der Röntgenstrukturanalyse untersucht wurde. Warum wählt die Natur gerade diese Anordnung der Moleküle? Bislang gibt es keine Methode, mit der sich solche Strukturen voraussagen lassen. In der Forschergruppe wird untersucht, wie einzelne Moleküle aggregieren. Zunächst werden Aggregate von nur sehr wenigen Molekülen gebildet, die aber schon die grundlegenden Strukturen des Kristalls zeigen. Mit zunehmender Anzahl an Molekülen entsteht aus den mikroskopischen Aggregaten ein makroskopischer Kristall.

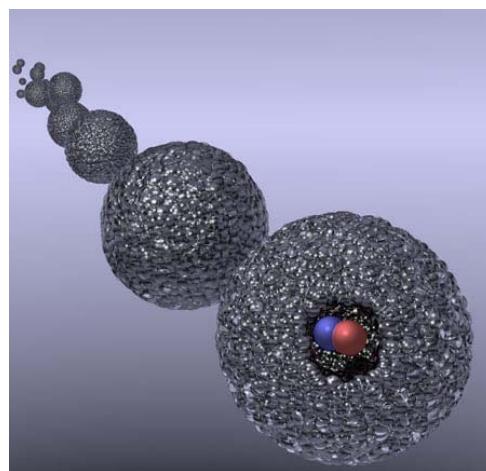


Abbildung 2. Da die Wechselwirkungen zwischen Molekülen sehr schwach und Molekülaggregate damit sehr zerbrechlich sind, werden in mehreren Arbeitsgruppen der Forschergruppe Messungen bei extrem tiefen Temperaturen durchgeführt. Die Abbildung zeigt ein Molekül in einem winzigen Heliumtröpfchen bei einer Temperatur von nur 0.37 K über dem absoluten Nullpunkt.

Forschergruppe 630 "Biologische Funktion von Organometallverbindungen"

Sprecher: Prof. Dr. 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 haben im Jahr 2008 über zehn gemeinsame Publikationen veröffentlicht, darunter Arbeiten in der *Angew. Chemie*, *Chem. Commun.* und dem *J. Med. Chemistry*. In Bochum sind an der FOR630 die Gruppen Sheldrick (Analytische Chemie), Schatzschneider und Metzler-Nolte (Anorg. Chemie I) beteiligt.



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. In 2008, more than ten joint papers were published from this Research Unit, inter alia in *Angew. Chem.*, *Chem. Commun.* and *J. Med. Chemistry*. Progress in this Research Unit will contribute to the development of medicinal bioorganometallic chemistry in Germany and beyond.

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	42
Anorganische Chemie 2	44
Organische Chemie 1	46
Organische Chemie 2	46
Physikalische Chemie 1	47
Physikalische Chemie 2	49
Analytische Chemie	50
Theoretische Chemie	53
Technische Chemie	56
Biochemie 1	58
Biochemie 2	59
Didaktik der Chemie	60
Dissertationen an der Fakultät für Chemie und Biochemie 2008	62

Anorganische Chemie 1

- M. Salmain, N. Metzler-Nolte “Bioorganometallic Chemistry of Ferrocene“ Chapter 13 in *Ferrocene* (Editor: Petr Stepnicka) Wiley-VCh, Weinheim (2008) 499 – 639
- R. Chelmoski, S. D. Köster, A. Kerstan, A. Prekelt, C. Grunwald, T. Winkler, N. Metzler-Nolte, A. Terfort, C. Wöll, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 14952 - 14953. Peptide-Based SAMs that Resist the Adsorption of Proteins
- S. D. Köster, J. Dittrich, G. Gasser, N. a Hüsken, I. C. Henao Castañeda, J. L. Jios, C. O. Della Védova, N. Metzler-Nolte, *Organometallics* **27** (2008) 6326 – 6332. Spectroscopic and Electrochemical Studies of Ferrocenyl Triazole Amino Acid and Peptide Bioconjugates Synthesized by Click Chemistry
- J. Lemke, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2008) 3359 – 3366. The Synthesis of Ruthenium and Rhodium Complexes with Functionalized N-Heterocyclic Carbenes and their use in Solid Phase Peptide Synthesis
- G. Gasser, N. Hüsken, S. D. Köster, N. Metzler-Nolte, *Chem. Commun.* (2008) 3675 – 3677. Synthesis of organometallic PNA oligomers by click chemistry
- S. I. Kirin, I. Ott, R. Gust, W. Mier, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, *Angew. Chem.* **120** (2008) 969 - 973; *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 955 - 959. Metalpeptide and Peptide Nucleic Acid (PNA) by Atomic Absorption Spectroscopy
- M. Neukamm, A. Pinto, N. Metzler-Nolte, *Chem. Commun.* (2008) 232 – 234. Synthesis and Cytotoxicity of a Cobaltcarbonyl-Alkyne Enkephalin Bioconjugate
- X. de Hatten, E. Bothe, E. Bill, K. Merz, I. Huc, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2008) 4530 – 4537. A Ferrocene-Peptide Conjugate as a Hydrogenase Model System
- N. v. Prondzinski, K. Merz, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 555. Hydrated Zinc p-aminobenzoate $[\text{Zn}(\text{p-H}_2\text{NC}_6\text{H}_4\text{COO})_2(\text{H}_2\text{O})]\text{H}_2\text{O}$ from a Layered Zinc Hydroxide
- K. Merz, M. Moreno, E. Löffler, L. Khodeir, A. Rittermeier, K. Fink, K. Kotsis, M. Muhler, M. Driess, *Chem. Commun.* (2008) 73. Lithium-promoted hydrogenation of carbon dioxide to formates by heterobimetallic hydridoaluminum aloxide clusters
- M. Rohe, K. Merz, *Chem. Commun.* (2008) 862. Active Peroxo Titanium Complexes: Syntheses, Characterization and their Potential in the Photo oxidation Process of 2-Propanol
- S. Boichut, C. Boyer, K. Burger, A. Haas, K. Merz, T. Pages, T. Wallmichrath, *J. Organic and Pharmaceutical Chemistry* **1(21)** (2008) 3. 2-Methyl-6,6-bis(trifluoromethyl)cyclohex-3-ene-1-carbaldehyde: Reactivity and application as a model for the preparation of 16,16,16,17,17,17-hexafluororetinal analogs
- R. Pietschnig, S. Spirk, G. N. Rechberger, K. Merz, *Inorganica Chimica Acta* **361(7)** (2008) 1958. Selenenylphosphonium ions as intermediates in the phosphane assisted methylation of elemental selenium.
- J. Niesel, A. Pinto, H. W. Peindy N'Dongo, K. Merz, I. Ott, R. Gust, U. Schatzschneider, *Chem. Commun.* (2008) 1798. Photoinduced CO release, cellular uptake and cytotoxicity of a tris(pyrazolyl)methane (tpm) manganese tricarbonyl complex.
- S. Yao, M. Brym, K. Merz, M. Driess, *Organometallics* **27(14)** (2008) 3601. Facile Access to a Stable Divalent Germanium Compound with a Terminal PH_2 Group and Related PR_2 Derivatives.

- N. Dona, K. Merz, M. Driess, *Organosilicon Chemistry VI: From Molecules to Materials* (2008) **271**. Novel dimeric pentacoordinate silicon complexes: unusual reactivity of electron-rich aminosilane intermediates.
- M. Rohe, K. Merz, *European Journal of Inorganic Chemistry* **21** (2008) 3264. Influence of metals and reduced oxygen species on the photooxidation of 2-propanol with a cesium peroxidotitanate complex.
- M. Rohe, K. Merz, M. Muhler, *Ger. Off.* (2008) DE 102008011337. Gold-haltiges TiO-Aggregat - ein Single Source Precursor als alternativer Zugang für Au/TiO₂-Komposite
- M. Rohe, E. Löffler, M. Muhler, A. Birkner, C. Wöll, K. Merz, *Dalton Trans.* **44** (2008) 6106. Gold-Containing TiO-Complex - a Crystalline Molecular Precursor as an Alternative Route to Au/TiO₂ Composites.
- M. Mastalerz, H. J. E. Rivera, W. Hueggenberg, K. Merz, I. Oppel, G. Dyker, *CrystEngComm* **10(9)** (2008) 1120. Pyridoxycalix[4]arene palladium(II) complexes as tectons for self-inclusion polymers..
- H. W. P. N'Dongo, I. Neundorff, K. Merz, U. Schatzschneider, *Journal of Inorganic Biochemistry* **102(12)** (2008) 2114. Synthesis, characterization, X-ray crystallography, and cytotoxicity of a cymantrene keto carboxylic acid for IR labelling of bioactive peptides on a solid support
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 619. Tetrakis(acetonitrile)-dibromo-nickel(II)-di-acetonitrile, [Ni(CH₃CN)₄Br₂]·2CH₃CN.
- T. Timofte, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 624. Indium(I) heptachlorogallate, InGa₂Cl₇.
- G. Meyer, R. Wiglusz, I. Pantenburg, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 825. Forgotten and resurrected: Tantalum(IV)iodide, a Molecular Solid Consisting of Dimers of Dimers, Ta₄I₁₆.
- A. Babai, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 938. The First Homoleptic Bis(trifluoromethanesulfonyl)amide Complex of Yttrium: [bmim][Y(Tf₂N)₄].
- B. Mallick, B. Balke, C. Felser, A.-V. Mudring, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 10068. (CrCl₃)₃@2[C₄mim][OMe] — Molecular Cluster-Type Chromium(III) Chloride Stabilized in a Salt Matrix.
- N. Herzmann, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 7954. Seven Coordinate Ruthenium Atoms Sequestered in Praseodymium Clusters in the Chloride {RuPr₃}Cl₃.
- S.-F. Tang, A. Babai, A.-V. Mudring, *Angew. Chem. Int. Ed.* **120** (2008) 7631. Low melting europium ionic liquids as luminescent soft materials.
- B. Mallick, B. Balke, C. Felser, A.-V. Mudring, *Angew. Chem. Int. Ed.* **120** (2008) 7635. Dysprosium room temperature ionic liquids exhibiting strong luminescence and response to magnetic fields.
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 1230. Tetrakis(acetonitrile)-dibromo-nickel(II), [Ni(CH₃CN)₄Br₂].
- F. Rieger, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 2989. Pb(18-crown-6)Cl₂ and Hg(18-crown-6)I₂: Molecular Dihalides Trapped in a Crown Ether.

- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Cryst. Res. Technol.* **43** (2008) 1187. Imidazolium Based Ionic Liquid Crystals: Structure, Photophysical and Thermal Behaviour of $[C_n\text{mim}]\text{Br} \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ($n = 12, 14$; $x=0, 1$).
- A. Ispas, M. Buschbeck, M. Uhlemann, A. Bund, S. Pitula, A.-V. Mudring, F. Endres, *ECS Transactions* **13** (2008) 113: Electrodeposition of Ferromagnetic Materials from Air and Water Stable Ionic Liquids.
- A.-V. Mudring, *ISEC Proceedings* **3(2)** (2008) 1113. Complexation Studies of f-Elements in ionic liquids.
- I. Neundorff, J. Hoyer, K. Splith, R. Rennert, H.W. Peindy N'Dongo, U. Schatzschneider, *Chem. Commun.* (2008) 5604-5606. Cymantrene conjugation modulates the intracellular distribution and induces high cytotoxicity of a cell-penetrating peptide
- H.W. Peindy N'Dongo, I. Neundorff, K. Merz, U. Schatzschneider, *J. Inorg. Biochem.* **102** (2008) 2114-2119. Synthesis, characterization, and cytotoxicity of cymantrene keto carboxylic acids for IR labelling of bioactive peptides on a solid support
- U. Schatzschneider, J. Niesel, I. Ott, R. Gust, H. Alborzinia, S. Wölfl, *ChemMedChem* **3** (2008) 1104-1109. Cellular uptake, cytotoxicity, and metabolic profiling of ruthenium(II) polypyridyl complexes $[\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{N-N})]\text{Cl}_2$ with $\text{N-N} = \text{bpy}$, phen , dpq , dppz , and dppn

Anorganische Chemie 2

- S. Amirjalayer, R. Schmid, *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 14980-14987. Conformational Isomerism in the Isorecticular Metal Organic Framework Family: A Force Field Investigation
- A. Baunemann, D. Bekermann, T. B. Thiede, H. Parala, M. Winter, C. Gemel, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2008) 3715-3722. Mixed amido/imido/guanidinato complexes of niobium: potential precursors for MOCVD of niobium nitride thin films
- D. Bekermann, D. Barreca, A. Devi, A. Gasparotto, R. A. Fischer, *ECS Transactions* **16** (2008) 235-239. MOCVD of Niobium Nitrides and Oxy-Nitrides using an All-Nitrogen-Coordinated Precursor: Thin-film Deposition and Mechanistic Study
- T. Cadenbach, T. Bollermann, C. Gemel, I. Fernandez, M. von Hopffgarten, G. Frenking, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 9150-9154. Twelve One-Electron Ligands Coordinating One Metal Center: Structure and Bonding of $[\text{Mo}(\text{ZnCH}_3)_9(\text{ZnCp}^*)_3]$
- T. Cadenbach, C. Gemel, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 9146-9149. Molecular Cut-Outs of Mo/Zn Hume-Rothery Phases: Synthesis and Structure of $[\{\text{Mo}(\text{CO})_4\}_4(\text{Zn})_6(\text{ZnCp}^*)_4]$
- T. Cadenbach, C. Gemel, T. Bollermann, I. Fernandez, G. Frenking, R. A. Fischer, *Chem. Eur. J.* **14**, (2008) 10789-10796. Organometallic Chemistry of Ga^+ : Switching On and Off the Electron Pair of Monovalent Gallium in the Coordination Sphere of Ruthenium
- T. Cadenbach, C. Gemel, D. Zacher, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 3438-3441. Methylgallium as a Terminal Ligand in $[(\text{Cp}^*\text{Ga})_4\text{Rh}(\text{GaCH}_3)]^+$
- M. Cokoja, B. R. Jagirdar, H. Parala, A. Birkner, R. A. Fischer, *European Journal of Inorganic Chemistry* **21** (2008) 3330-3339. Organometallic Access to Intermetallic CuE_2 ($\text{E} = \text{Al}, \text{Ga}$) and $\text{Cu}_{1-x}\text{Al}_x$ Phases
- T. Hikov, A. Rittermeier, M.-B. Luedemann, C. Herrmann, M. Muhler, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **18** (2008) 3325-3331. Preparation of ZnO colloids by pyrolysis of

[MeZnOⁱPr]₄ in the presence of hexadecylamine and probing the surface chemistry of the nanoparticles by CO/CO₂

- A. Kempter C. Gemel, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 7279-7285. Oxidative Addition of Group 13 and 14 Metal Halides and Alkyls to Ga(DDP) (DDP = Bulky Bisimidinate)
- B.-C. Kanga, D.-Y. Junga, R. A. Fischer, J.-H. Boo, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **69** (2008) 128-132. Selective MOCVD of titanium oxide and zirconium oxide thin films using single molecular precursors on Si(100) substrates
- A. Milanov, R. A. Fischer, A. Devi, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 11405-11416. Synthesis, Characterization and Thermal Properties of Homoleptic Rare-Earth Guanidates: Promising Precursors for MOCVD and ALD of Rare-Earth Oxide Thin Films
- M. Müller, O. Lebedev, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **18** (2008) 5274-5281. Gas-Phase Loading of [Zn₄O(bt_b)₂] (MOF-177) with Organometallic CVD-Precursors: Inclusion Compounds of the Type [LnM]a@MOF-177 and the Formation of Cu and Pd Nanoparticles inside MOF-177
- M. Müller, S. Hermes, K. Kähler, M. W. E. van den Berg, M. Muhler, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **20** (2008) 4576-4587. Loading of MOF-5 with Cu and ZnO Nanoparticles by Gas-Phase Infiltration with Organometallic Precursors: Properties of Cu/ZnO@MOF-5 as Catalyst for Methanol Synthesis
- G. Prabusankar, A. Kempter, C. Gemel, M.-K. Schröter, R. A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **47** (2008) 7234-7237. Reduction of Tin(II) by Gallium(I): [Sn₁₇{GaCl(DPP)}₄], a High Nuclearity Metalloid Tin Cluster Trapped by Electrophilic Organogallium(III) Ligands
- K. Rajalingam, T. Strunskus, A. Terfort, R. A. Fischer, C. Wöll, *Langmuir* **24** (2008) 7986-7994. Metallization of a Thiol-Terminated Organic Surface Using Chemical Vapor Deposition
- R. Schmid, M. Tafipolsky, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 12600-12601. An Accurate Force Field Model for the Strain Energy Analysis of the Covalent Organic Framework COF-102
- K. Schröck, F. Schröder, M. Heyden, R. A. Fischer, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** (2008) 4732-4739. Characterization of the water-MOF-5 interface by terahertz time-domain spectroscopy
- F. Schröder, D. Esken, M. Cokoja, M. W. E. van den Berg, O. I. Lebedev, G. Van Tendeloo, B. Walaszek, G. Buntkowsky, H.-H. Limbach, B. Chaudret, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 6119-6130. Ruthenium Nanoparticles inside Porous [Zn₄O(bdc)₃] by Hydrogenolysis of Adsorbed [Ru(cod)(cot)]: A Solid-State Reference System for Surfactant-Stabilized Ruthenium Colloids
- K. Szelagowska-Kunstman, P. Cyganik, M. Goryl, D. Zacher, Z. Puterova, R. A. Fischer, M. Szymonski, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 14446-14447. Surface Structure of Metal-Organic Framework Revealed by Atomic Force Microscopy
- T. Thiede, H. Parala, K. Reuter, G. Passing, S. Kirchmeyer, J. Hinz, M. Lemberger, A. J. Bauer, R. A. Fischer, *ECS Transactions* **16** (2008) 229-234. Evaluation of MOCVD Grown Niobium Nitride Films as Gate Electrode for Advanced CMOS Technology
- S. Turner, O. I. Lebedev, F. Schröder, Daniel Esken, R. A. Fischer, G. Van Tendeloo, *Chem. Mater.* **20** (2008) 5622-5627. Direct Imaging of Loaded Metal-Organic Framework Materials (Metal@MOF-5)

Organische Chemie 1

- S. Chemnitz, U. Tangen, P.F. Wagler, T. Maeke, J.S. McCaskill, *Chemical Engineering Journal* **135S**, (2008) 276-9. Electronically programmable membranes for improved biomolecule handling in micro-compartments on-chip
- J.S. McCaskill in: "Protocells: Bridging nonliving and living matter", ed. by S. Rasmussen et al., MIT Press Cambridge, Mass., *London, England* (2008) pp. 253-295. Evolutionary microfluidic complementation toward artificial cells
- S. Rasmussen, M.A. Bedau, J.S. McCaskill, N. Packard in "Protocells: Bridging nonliving and living matter", ed. by S. Rasmussen et al., MIT Press Cambridge, Mass., *London, England* (2008) pp. 71-101. A roadmap to protocells
- S. D. Kiewitz, T. Kakizawa, Y. Kiso, C. Cabrele, *J. Peptide Sci.* **14** (2008) 1209-1215. Switching from the unfolded to the folded state of the helix-loop-helix domain of the Id proteins based on the O-acyl isopeptide method
- S. D. Kiewitz, M. Kruppa, A. Riechers, B. Koenig, C. Cabrele, *J. Mol. Recognit.* **21** (2008) 79-88. Recognition of the Helix-Loop-Helix domain of the Id proteins by an artificial luminescent metal complex receptor.

Organische Chemie 2

- P. Neuhaus, D. Grote, W. Sander, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 2993 – 3000. Matrix Isolation and Spectroscopic Characterization of m-Xylylene
- H. Beckers, H. Willner, D. Grote and W. Sander, *J. Chem. Phys.* **128** (2008) 084501/1 - 084501/11. EPR and IR Spectra of the FSO₃ Radical Revisited – Strong Vibronic Interactions in the 2A₂ Electronic Ground State.
- W. Sander, D. Grote, S. Kossmann, F. Neese, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 4396 – 4403. 2,3,5,6-Tetrafluorophenylnitren-4-yl: EPR Spectroscopic Characterization of a Quartet Ground State Nitreno Radical
- H. Quast, W. Nüdling, G. Klemm, A. Kirschfeld, P. Neuhaus, W. Sander, D. A. Hrovat, W. T. Borden, *J. Org. Chem.* (2008) 4956 - 4961. Diastereomeric N-Phenyltriaza-trimethylenemethane Triplet Diradicals and a Perimidine-Derived Non-Kekulé Molecule by Photolysis of 5-Imino-4,5-dihydro-1H-tetrazoles
- S. V. Chapyshev, D. Grote, C. Finke, W. Sander, *J. Org. Chem.* **73** (2008), 7045 - 7051. Matrix Isolation and EPR Spectroscopy of Septet 3,5-Difluoropyridyl-2,4,6-trinitrene
- N. Crabtree, K. J. Hostetler, T. E. Munsch, P. Neuhaus, P. M. Lahti, W. Sander, J. S. Poole, *J. Org. Chem.* **73** (2008) 3441 – 3451. A Comparative Study of the Photochemistry of the Azidopyridine-1-Oxides
- J. Torres-Alacan, W. Sander, *J. Org. Chem.* **73** (2008) 7118 - 7123. The Reaction of Diphenyldiazomethane with Singlet Oxygen Studied by Time Resolved IR Spectroscopy
- H. Beckers, H. Willner, D. Grote, W. Sander, J. Geier, *J. Chem. Phys.* **128** (2008) 224301/1 – 224301/7. Electron paramagnetic resonance spectrum of the FCO₂ radical isolated in noble gas matrices
- R. Crespo-Otero, E. Sánchez-García, R. Suardíaz, L. A. Montero, W. Sander, *Chem. Phys.* **353** (2008) 193 - 201. Ab Initio Study of the Interactions between Simple Radicals and Water

- T. Mayer-Gall, A. Birkner, G. Dyker, *J. Organomet.Chem.* **693** (2008), 1-3. Pyridyl-substituted Porphyrins on Nanoparticles
- G. Dyker, W. Stirner, G. Henkel, P. R. Schreiner, *Helv. Chim Acta* **91** (2008), 904-913. Deracemization of a Macrocyclic 1,1'-Biisoquinoline
- G. Dyker, M. Hagel, G. Henkel, *Eur. J. Org. Chem.* 2008, 3095-3101. Naphthyl-Substituted Carbocations: From Peri-Interaction to Cyclization
- D. Kadzimirsz, D. Kramer, L. Sripanom, K. Merz, I. M. Oppel, N. Doltsinis, G. Dyker, *J. Org. Chem.* **73** (2008), 4644-4649. A Domino Annulation Reaction under Willgerodt-Kindler Conditions

Physikalische Chemie 1

- X.-L. Yin, M. Calatayud, H. Qiu, Y. Wang, A. Birkner, C. Minot, Ch. Wöll, *ChemPhysChem* **9** (2008) 2 253-256. Diffusion versus Desorption: Complex Behavior of H Atoms on an Oxide Surface
- S.V. Merzlikin, N. N. Tolkachev, Th. Strunskus, G. Witte, Th. Glogowski, Ch. Wöll, W. Grünert, *Surf. Sci.* **602** (2008) 755–767. Resolving the depth coordinate in photoelectron spectroscopy – Comparison of excitation energy variation vs. angular-resolved XPS for the analysis of a self-assembled monolayer model system
- G. Witte, Ch. Wöll, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **205** (2008) 497-510, Molecular beam deposition and characterization of thin organic films on metals for applications in organic electronics
- P.S. Bagus, D. Käfer, G. Witte, Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 126101, Work Function Changes Induced by Charged Adsorbates: Origin of the Polarity Asymmetry
- H. Qiu, H. Idriss, Y. Wang, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 26, 9828-9834. Carbon-Carbon Bond Formation on Model Titanium Oxide Surfaces: Identification of Surface Reaction Intermediates by HREELS.
- Ch. Rohmann, Y. Wang, M. Muhler, J. B. Metson, H. Idriss, Ch. Wöll, *Chem. Phys. Lett.* **460** (2008) 10-12, Direct Monitoring of Photo-induced Reactions on Well-defined Metal Oxide Surfaces Using Vibrational Spectroscopy
- C. Bock, D.V. Pham, U. Kunze, D. Käfer, G. Witte, Ch. Wöll, *Physica E* **40** (2008) 2107-2109. Influence of contact metals on the performance and morphology of pentacene bottom-contact field-effect transistors
- O. Shekhah, J. Veciana, C. Ocal, N. Roques, V. Mugnaini, C. Munuera, Ch. Wöll, *Langmuir*, **24** (2008) 13 6640-6648, Grafting of monocarboxylic substituted polychlorotriphenylmethyl radicals onto a COOH-functionalized self-assembled monolayer through copper (II) metal ions.
- M. Kind, Ch. Wöll, *ChiuZ*, **2**, (2008) 20080042 128-141. Dünnstschichten – Maßgeschneiderte Organische Oberflächen
- N. A. F. Al-Rawashdeh, W. Azzam, Ch. Wöll, *Z. Phys. Chem.* **42** (2008) 2 965-978, Fabrication of an Amino-Terminated Organic Surface by Chemical Conversion of a Nitro-Terminated Self-Assembled Monolayer
- L. Hallmann, A. Bashir, T. Strunskus, R. Adelung, V. Staemmler, Ch. Wöll, F. Tuczek, *Langmuir*, **24** (2008) 5726-5733, Self-Assembled Monolayers of Benzylmercaptan and p-Cyanobenzylmercaptan on Au(111) Surfaces: Structural and Spectroscopic Characterization

- R. Chelmoski, A. Prekelt, Ch. Grunwald, Ch. Wöll, *J. Phys. Chem. A*, **111** (2008) 12295-12303, A case study on biological activity in a surface-bound multicomponent system: The biotin-streptavidin-peroxidase system
- A. Bashir, D. Käfer, J. Müller, Ch. Wöll, A. Terfort, G. Witte, *Angew. Chem. Int. Ed.* **47** (2008) 5250-5252, Selenium as a key element for highly ordered aromatic self-assembled monolayers. *Angew. Chem.* **120** (2008) 5328-5331, Selen als Schlüsselkomponente für hochgeordnete aromatische selbstorganisierte Monoschichten
- K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, R. Kováčik, B. Meyer, F. Traeger, D. Langenberg, Th. Strunskus, M. Kunat, Ch. Wöll, *Z. Phys. Chem.*, **222** (2008) 891-915, CO₂ Adlayers on the Mixed Terminated ZnO(10-10) Surface Studied by He Atom Scattering, Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Electronic Structure Calculations
- H. Noei, H. Qiu, Y. Wang, E. Löffler, Ch. Wöll, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **10** (2008) 7092-7097. The identification of hydroxyl groups on ZnO nanoparticles by infrared spectroscopy
- C. Munuera, O. Shekhah, H. Wang, Ch. Wöll, C. Ocal, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** (2008) 7257-7261 The controlled growth of oriented metal organic frameworks on functionalized surfaces as followed by Scanning Force Microscopy
- O. Khyzhun, T. Strunskus, Ch. Wöll, H. Gies, V. Staemmler *J. Chem. Phys.*, **129** (2008) 8, 084711, Comparison of the O K α x-ray emission bands in micro- and mesoporous silica materials and in α -quartz
- K. Rajalingam, T. Strunskus, A. Terfort, R. Fischer, Ch. Wöll, *Langmuir* **24**, (2008) 15 7986-7994, Metallization of a thiol-terminated organic surface using chemical vapor deposition
- R. Chelmoski, S.D. Köster, A. Kerstan, A. Prekelt, Ch. Grunwald, T. Winkler, N. Metzler-Nolte, A. Terfort, Ch. Wöll, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 45 14952-14953, Peptide-based SAMs that resists the Adsorption of Proteins
- H. Qiu, B. Meyer, Y. Wang, Ch. Wöll, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 236401, Ionization energies of shallow donor states in ZnO created by reversible formation and depletion of H interstitials
- M. Rohe, E. Löffler, M. Muhler, A. Birkner, Ch. Wöll, K. Merz, *Dalton Trans.* **44**, (2008), 6106-6109, A gold-containing TiO complex: a crystalline molecular precursor as an alternative route to Au/TiO₂ composites
- A. Weber-Bargioni, W. Auwärter, F. Klappenberger, J. Reichert, S. Lefrançois, Th. Strunskus, Ch. Wöll, A. Schiffrin, Y. Pennec, J. V. Barth *ChemPhysChem* **9** (2008) 1 89-94 Visualizing the Frontier Orbitals of a Conformationally Adapted Metalloporphyrin
- F. Klappenberger, M. E. CaÇas-Ventura, S. Clair, S. Pons, U. Schlickum, Z.-R. Qu, Th. Strunskus, A. Comisso, Ch. Wöll, H. Brune, K. Kern, A. De Vita, M. Ruben, J. V. Barth *ChemPhysChem* **9** (2008) 2522-2530, Does the Surface Matter? Hydrogen-Bonded Chain Formation of an Oxalic Amide Derivative in a Two- and Three-Dimensional Environment
- Christof Wöll, *Angew. Chem Int. Ed.*, **47** (2008) 8, 1364-1366, Spectroscopic Characterization and Deliberate Modification of a Single Molecule by Tunneling of Electrons. *Angew. Chem.* **120**, (2008) 8 1384-1386, Spektroskopische Charakterisierung und kontrollierte Veränderung eines Einzelmoleküls durch das Tunneln von Elektronen,
- Ch. Wöll, R.A. Fischer, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **47** (2008) 8164-8168, Functionalized Coordination Space in Metal-Organic Frameworks. *Angew. Chem.*, **120** (2008) 8285-8289, Funktionalisierter Koordinationsraum in metall-organischen Gerüsten

- M. Vogelsang, B. Stieglitz, C. Herrmann, A. Pautsch, K. Aktories, *FEBS Lett.* **582** (2008) 1032-1036. Crystal structure of the Clostridium limosum C3 exoenzyme
- T. Hikov, A. Rittermeier, Maik-Borris Luedemann, C. Herrmann, M. Muhler, R. Fischer, *J. Mater. Chem.* **28** (2008) 3325-3331. Preparation of ZnO colloids by pyrolysis of [MeZnO/Pr]₄ in the presence of hexadecylamine and probing the surface chemistry of the nanoparticles by CO/CO₂ adsorption studies followed by FTIR
- D. Filchtinski, C. Bee, T. Savopol, M. Engelhard, C. F. W. Becker, C. Herrmann, *Bioconjugate Chemistry* **19** (2008) 1938-1944. Probing Ras Effector Interactions on Nanoparticle Supported Lipid Bilayers
- B. Stieglitz, C. Bee, D. Schwarz, Ö. Yildiz, A. Moshnikova, A. Khokhlatchev, C. Herrmann, *EMBO J.* **27** (2008) 1995-2005. Novel type of Ras effector interaction established between tumor suppressor NORE1A and Ras switch II

Physikalische Chemie 2

- A. Gutberlet, G.W. Schwaab, M. Havenith, *Chem. Phys.* **343** (2008) 158-167. High resolution IR spectroscopy of the carbonyl stretch of (DCOOD)₂
- E. Bründermann, M. Havenith, *Annual Reports Prog. Chem., Section C: Phys. Chem.* **104** (2008) 235-255. SNIM-Scanning near-field infrared microscopy
- S. Ebbinghaus, S.J. Kim, M. Heyden, X. Yu, M. Gruebele, D.M. Leitner, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 2374-2375. Protein sequence- and pH-dependent hydration probed by Terahertz spectroscopy
- M. Heyden, E. Bründermann, U. Heugen, G. Niehues, D.M. Leitner, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (17) (2008) 5773-5779. Long range influence of carbohydrates on the solvation dynamics of water – Answers from THz absorption measurements and molecular modeling simulations
- G. Wollny, E. Bründermann, Z. Arsov, L. Quaroni, M. Havenith, *Optics Express* **16** (2008) 7453-7459. Nanoscale depth resolution in scanning near-field infrared microscopy
- K. Schröck, F. Schröder, M. Heyden, R.A. Fischer, M. Havenith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10** (2008) 4732-4739. Characterization of the water-MOF-5 interface by terahertz time-domain spectroscopy
- D.M. Leitner, M. Gruebele, M. Havenith, *HFSP Journal* **2(6)** (2008) 314-323. Solvation dynamics of biomolecules: modeling and terahertz experiments
- S.J. Kim, B. Born, M. Havenith, M. Gruebele, *Angewandte Chemie Intl. Edition* **47** (34) (2008) 6486-6489. Real-time detection of protein-water dynamics upon protein folding by Terahertz absorption. *Angewandte Chemie* **120** (34) (2008) 6586-6589. Echtzeit-Nachweis von Änderungen im Protein-Wassernetzwerk während der Proteinfaltung mit Hilfe von Terahertz-Absorptionsspektroskopie
- A. Metzelthin, Ö. Birer, E. Sánchez-García, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **129** (2008) 114307-7. High resolution IR-spectroscopy of acetylene-furan in ultracold helium nanodroplets
- A. Gutberlet, Ö. Birer, T. Poerschke, M. Havenith, *J. Chem. Phys.* **129** (2008) 174311-6. High resolution infrared spectroscopy of the asymmetric C-H stretch of 1,2,4,5-Tetracyanobenzene (TCNB) and (TCNB)₂ in superfluid Helium nanodroplets

- H. Weingärtner, *Angew. Chemie Int. Ed.* **47** (2008) 654-670. Understanding ionic liquids at the molecular level: Facts, problems and controversies.
- M.-M. Huang, H. Weingärtner, *ChemPhysChem* **9** (2008) 2172-2173. Protic ionic liquids with unusually high dielectric permittivities.
- P. Sasisanker, H. Weingärtner, *ChemPhysChem* **9** (2008) 2802-2808. Hydration dynamics of water near an amphiphilic model peptide at low hydration levels: A dielectric relaxation study.
- S. Balakrishnan, N. Javid, H. Weingärtner, R. Winter *ChemPhysChem* **9** (2008) 2794-2801. Small-angle X-ray scattering and near-infrared vibrational spectroscopy of water confined in Aerosol-OT reverse micelles.

Analytische Chemie

- A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 121 - 124. Dinuclear Manganese(II) Complexes with Bridging Selenidodiarsenate Anions $\text{As}_2\text{Se}_4^{4-}$, $\text{As}_2\text{Se}_5^{4-}$ and $\text{As}_2\text{Se}_6^{2-}$.
- A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 225 - 227. Manganese(II) Coordination Polymers $[\{\text{Mn}(\text{tren})\}(\text{As}_2\text{Se}_4)]$ and $[\{\text{Mn}(\text{tren})\}(\text{As}_4\text{Se}_7)]$ with Infinite Selenidoarsenate(III) Chains $\infty[\text{AsSe}_2^-]$ and $\infty[\text{As}_4\text{Se}_7^{2-}]$.
- P. Dorkov, I. N. Pantcheva, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, R. Petrova, M. Mitewa, *J. Inorg. Biochem.* **102** (2008) 26 - 32. Synthesis, structure and antimicrobial activity of manganese(II) and cobalt(II) complexes of the polyether ionophore antibiotic Sodium Monensin A.
- J. Will, W. S. Sheldrick, D. Wolters, *J. Biol. Inorg. Chem.* **13** (2008) 421 - 434. Characterisation of cisplatin coordination sites in cellular E. coli DNA binding proteins by combined biphasic liquid chromatography and ESI tandem mass spectrometry.
- I. Ott, M. A. Scharwitz, H. Scheffler, W. S. Sheldrick, *R. Gust J. Pharm. Biomed. Anal.* **47** (2008) 938 - 942. Atomic absorption spectroscopic quantification of the iridium content in tumor cells exposed to an iridium metallodrug.
- O. I. Ornatsky, X. Lou, M. Nitz, S. Schäfer, W. S. Sheldrick, V. I. Baranov, D. R. Bandura, S. D. Tanner, *Anal. Chem.* **80** (2008) 2539 - 2547. Measurements of antigens and intracellular DNA by detection of elemental tags and metallointercalators using inductively coupled plasma mass spectrometry.
- T. Kolev, B. B. Koleva, M. Spiteller, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *Dyes and Pigments* **79** (2008) 7 - 13. Crystal structure and optical properties of 1-methyl-4-[2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]pyridinium dihydrogenphosphate. New aspects on crystallographic disorder and its effect on polarized solid-state IR-spectroscopy.
- T. Kolev, B. B. Koleva, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *J. Mol. Struct.* **879** (2008) 30 - 39. Benzamidium D-glucuronate: spectroscopic and structural elucidation.
- I. N. Pantcheva, M. I. Mitewa, W. S. Sheldrick, I. M. Oppel, R. Zhorova, *Current Drug Discovery Technology* **5** (2008) 154 - 161. First divalent metal complexes of the polyether ionophore Monensin A: X-ray structures of $[\text{Co}(\text{Mon})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ and $[\text{Mn}(\text{Mon})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ and their properties.
- A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 820 - 822. Synthesis and structure of the novel pentaselenidohexaarsenate(I,II) cluster anion $[\text{As}_6\text{Se}_5]^{2-}$.

- A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 1005 - 1010. Synthesis and structures of dimanganese(II) complexes with spirotricyclic $[\text{Mn}(\mu\text{-Ge}_2\text{Se}_7)\text{Mn}]$ and $[\text{Mn}(\mu\text{-Sn}_2\text{Se}_6)\text{Mn}]$ cores.
- M. A. Scharwitz, I. Ott, R. Gust, A. Kromm, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **102** (2008) 1623 - 1630. Synthesis, cellular uptake and structure-activity relationships for potent cytotoxic trichloridoiridium(III) polypyridyl complexes.
- B. B. Koleva, T. Kolev, R. Seidel, H. Mayer-Figge, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, *J. Phys. Chem. A* **112** (2008) 2899 - 2905. On the origin of the colour in the solid-state. Crystal structure, optical and magnetic properties of 4-cyanopyridinium hydrogensquarate monohydrate.
- M. A. Scharwitz, I. Ott, Y. Geldmacher, R. Gust, W. S. Sheldrick, *J. Organomet. Chem.* **693** (2008) 2299 - 2309. Cytotoxic half-sandwich rhodium(III) complexes: polypyridyl ligand influence on their DNA binding properties and cellular uptake.
- B. B. Koleva, T. Kolev, H. Mayer-Figge, R. W. Seidel, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, *Struct. Chem.* **19** (2008) 147 - 154. Are there preferable conformations of the tryptammonium cation in the solid state? Crystal structure and solid-state linear polarized IR-spectroscopic study of tryptammonium hydrogentartrate.
- S. Basak, S. Sen, S. Mitra, C. Marschner, W. S. Sheldrick, *Struct. Chem.* **19** (2008) 115 - 121. Square planar complexes of Cu(II) and Ni(II) with N_2O donor set of two Schiff base ligands: synthesis and structural aspects.
- M. Harlos, I. Ott, R. Gust, H. Alborzinia, S. Wölfl, W. S. Sheldrick, *J. Med. Chem.* **51** (2008) 3924 - 3933. Synthesis, biological activity and structure-activity relationships for potent cytotoxic rhodium(III) polypyridyl complexes.
- A. Kromm, Y. Geldmacher, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 2191 - 2198. Polyamine and -imine manganese(II) complexes with tetra-, penta- and hexaselenide ligands: coligand and solvent influence on the polyselenide nuclearity and coordination mode.
- A. Kromm, W. S. Sheldrick *Z. Anorg. Allg. Chem.* **634** (2008) 2948 - 2953. (Terpyridine)manganese(II) coordination polymers with thio- and selenidoarsenate(III) ligands: coligand influence on the chalcogenidoarsenate(III) species and coordination mode.
- I. Ott, Y. Xu, J. Liu, M. Kokoschka, M. Harlos, W. S. Sheldrick, X. Qian, *Bioorg. Med. Chem.* **16** (2008) 7107 - 7116. Sulfur-substituted naphthalimides as photoactivatable anticancer agents: DNA interaction, fluorescence imaging and phototoxic effects in cultured tumor cells.
- T. Kolev, B. B. Koleva, T. Spassov, E. Cherneva, M. Spiteller, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *J. Mol. Struct.* **875** (2008) 372 - 381. Synthesis, spectroscopic, thermal and structural elucidation of 5-amino-2-methoxypyridine ester amide of squaric acid ethyl ester: a new material with an infinite pseudo-layered structure and manifested NLO application.
- J. Will, D. A. Wolters, W. S. Sheldrick, *ChemMedChem.* **3** (2008) 1696 - 1707. Characterisation of cisplatin binding sites in human serum proteins using hyphenated multidimensional liquid chromatography and ESI tandem mass spectrometry.
- T. Lohmüller, U. Müller, S. Breisch, W. Nisch, R. Rudolf, W. Schuhmann, S. Neugebauer, M. Kaczor, S. Linke, S. Lechner, J. Spatz, M. Stelzle, *J. Micromech.*

- Microeng.* **18** (2008) 115011. Nano-porous electrode systems by colloidal lithography for sensitive electrochemical detection: fabrication technology and properties
- D. Ruhlig, H. Gugel, A. Schulte, W. Theisen, W. Schuhmann, *The Analyst* **133** (2008) 1700-1706. Visualization of local electrochemical activity and local nickel ion release on laser-welded NiTi/steel joints using combined alternating-current mode and stripping-mode SECM
 - L. Stoica, S. Neugebauer, W. Schuhmann in: "Advances in Biochemical Engineering /Biotechnology" Vol. **109** "Biosensing for the 21st Century", Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2008), pp. 455-492. Scanning electrochemical microscopy (SECM) as a tool in biosensor research
 - K. Karnicka, K. Miecznikowski, B. Kowalewska, M. Skunik, M. Opallo, J. Rogalski, W. Schuhmann, P. J. Kulesza, *Anal. Chem.* **80** (2008) 7643-7648. ABTS-modified multi-walled carbon nanotubes as effective mediating system for bioelectrocatalytic reduction of oxygen
 - K. Eckhard, W. Schuhmann, *The Analyst* **133** (2008) 1486-1497. Alternating current techniques in scanning electrochemical microscopy (AC-SECM).
 - O. Demkiv, O. Smutok, S. Paryzhak, G. Gayda, Y. Sultanov, D. Guschin, H. Shkil, W. Schuhmann, M. Gonchar, *Talanta* **76** (2008) 837-846. Reagentless amperometric formaldehyde-selective biosensors based on the recombinant yeast formaldehyde dehydrogenase
 - S. Neugebauer, L. Stoica, D. Guschin, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **163** (2008) 33-40. Redox-amplified biosensors based on selective modification of nanopore electrode structures with enzymes entrapped within electrodeposition paints
 - M. Zhou, M. Bron, W. Schuhmann, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **8** (2008) 3465-3472. Controlled synthesis of gold nanostructures by a thermal approach.
 - E. Mohamed Hussien, T. Erichsen, W. Schuhmann, M. Maciejewska, *Anal. Bioanal. Chem.* **391** (2008) 1773-1782. SECM visualization of spatial variability of enzyme-polymer spots. 3. Enzymatic feedback mode
 - X. Chen, N. Li, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, M. Bron, *Microchim. Acta* **161** (2008) 95-100. Directional pyrolytic growth of microscale carbon fibers on electrochemically pretreated polyacrylonitrile-based carbon microfibers
 - A. Badura, D. Guschin, B. Esper, T. Kothe, S. Neugebauer, W. Schuhmann, M. Rögner, *Electroanalysis* **20** (2008) 1043-1047. Photo-induced electron transfer between photo-system 2 via crosslinked redox hydrogels
 - D. Strohbach, F. Turcu, W. Schuhmann, S. Müller, *Electroanalysis* **20** (2008) 935-940. Electrochemically induced modulation of the catalytic activity of a reversible redox-sensitive riboswitch
 - K. Eckhard, T. Erichsen, M. Stratmann, W. Schuhmann, *Chem. Eur. J.* **14** (2008) 3968-3976. Frequency-dependent alternating-current scanning electrochemical microscopy (4D AC-SECM) for local visualisation of corrosion sites
 - M. Ates, J. Castillo, A. S. Sarac, W. Schuhmann, *Microchim. Acta* **160** (2008) 247-251. Carbon fiber microelectrodes electrocoated with polycarbazole and poly(carbazole-co-p-tolylsulfonyl pyrrole) films for the detection of dopamine in presence of ascorbic acid.

- Ihnatowicz, P. Pesaresi, K. Lohrig, D. Wolters, B. Muller, D. Leister. *Planta* **227** (2008) 717-22. Impaired photosystem I oxidation induces STN7-dependent phosphorylation of the light-harvesting complex I protein Lhca4 in *Arabidopsis thaliana*.
- Poetsch, and D. Wolters, Bacterial membrane proteomics. *Proteomics* **8** (2008) 4100-22.
- M. Gertz, F. Fischer, D. Wolters, C. Steegborn. *Proc Natl Acad Sci U S A* **105** (2008) 5705-9. Activation of the lifespan regulator p66Shc through reversible disulfide bond formation.
- Poetsch, D. Wolters, J. Kalinowski, in: A. Burkovski, (Ed.), *Corynebacteria: Genomics and Molecular Biology*, (2008) 55-78. Caister Academic Press, Norfolk UK, Proteomics of *Corynebacterium glutamicum* and other *Corynebacteria*
- Poetsch, D. Wolters, in: J. von Hagen (Ed.), *Proteomics Sample Preparation*, (2008) 358-370 Wiley-VCH, Weinheim. Sample Preparation for MUDPIT with Bacterial Protein Samples
- M. Bron, *J. Electroanal. Chem.* **624** (2008) 64–68. Oxygen reduction at carbon black supported gold catalysts
- M. Bron, D. Teschner, U. Wild, B. Steinhauer, A. Knop-Gericke, C. Volckmar, A. Wootsch, R. Schlögl, P. Claus, *Appl. Catal. A* **341** (2008) 127-132. Oxygen induced activation of silica supported silver in acrolein hydrogenation.
- T. Schilling, M. Bron, *Electrochim. Acta* **53** (2008) 5379-5385. Oxygen reduction at Fe-N-modified carbon nanotubes in acidic electrolyte

Theoretische Chemie

- R. Glaves, M. Baer, E. Schreiner, R. Stoll, D. Marx, *Chem.Phys.Chem.*, **9** (2008) 2759-2765. Conformational Dynamics of Minimal Elastin-Like Polypeptides: The Role of Proline Revealed by Molecular Dynamics and Nuclear Magnetic Resonance
- A. Chaumont, M. Baer, G. Mathias, D. Marx, *Chem.Phys.Chem.*, **9** (2008) 2751-2758. Potential Proton-Release Channels in Bacteriorhodopsin
- M. Baer, G. Mathias, I.F.W. Kuo, D.J. Tobias, C.J. Mundy, D. Marx, *Chem.Phys.Chem.*, **9** (2008) 2703-2707. Spectral Signatures of the Pentagonal Water Cluster in Bacteriorhodopsin
- E.C. Beret, J.M. Martinez, R.R. Pappalardo, S. Sanchez-Marcos, N.L. Doltsinis, D. Marx, *J. Chem. Theory Comput.*, **4** (2008) 2108-2121. Explaining Asymmetric Solvation of Pt (II) versus Pd (II) in Aqueous Solution Revealed by Ab Initio Molecular Dynamics Simulations
- A. Witt, S.D. Ivanov, H. Forbert, D. Marx, *J. Phys. Chem. A*, **112** (2008) 12510-12517. Microsolvation of Protonated Methane: Structures and Energetics of $\text{CH}_5^+(\text{H}_2)_n$
- N.N. Nair, E. Schreiner, D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.*, **130** 14148-14160. Peptide Synthesis in Aqueous Environments: The Role of Extreme Conditions on Amino Acid Activation
- N.N. Nair, E. Schreiner, R. Pollet, V. Staemmler, D. Marx, *J. Chem. Theory, Comput.*, **4** (2008) 1174-1188. Magnetostructural Dynamics with the Extended Broken Symmetry Formalism: Antiferromagnetic [2Fe-2S] Complexes

- M. Böckmann, N.L. Doltsinis, D. Marx, *Phys. Rev. E*, **78** (2008) 036101-1 – 036101-4. Azobenzene photoswitches in bulk materials
- M. Konopka, R. Turansky, J. Reichert, H. Fuchs, D. Marx, I. Stich, *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 115503-1 – 115503-4. Mechanochemistry and Thermochemistry are Different: Stress-Induced Strengthening of Chemical Bonds
- E. Schreiner, N.N. Nair, D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.*, **130** (2008) 2768-2770. Influence of Extreme Thermodynamics Conditions and Pyrite Surfaces on Peptide Synthesis in Aqueous Media
- E.C. Beret, R.R. Pappalardo, N.L. Doltsinis, D. Marx, E. Sanchez Marcos, *Chem.Phys.Chem.*, **9** (2008) 2370-2400. Aqueous Pt (II) and Pd (II): Anionic Hydration Revealed by Car-Parrinello Simulations
- N.N. Nair, E. Schreiner, D. Marx, *inSide' Innovatives Supercomputing in Deutschland*, **6** (2008) 30-35. Prebiotic Peptide Synthesis on Blue Gene Platforms at „Iron-SulfurWorld“ Conditions
- H. Fuchs, D. Marx, U. Simon, *Phys.Chem.Chem.Phys.*, **10** (2008) 1841-1843. Analysis, manipulation, and simulation on the nanoscale
- H. Fuchs, D. Marx, U. Simon, *Bunsen-Magazin*, **2** (2008) 44-45. Analyse, Manipulation und Simulation auf der Nanoskala
- M. Shiga, A. Nakayama, *Chem. Phys. Lett.*, **451** (2008) 175-181. Ab initio path integral ring polymer molecular dynamics: Vibrational spectra of molecules
- K. Kotsis, D. Stodt, V. Staemmler, R. Kovacik, B. Meyer, F. Traeger, D. Langenberg, Th. Strunskus, M. Kunat, Ch. Wöll, *Z. Phys. Chem.*, **222** (2008) 891-915. CO₂ Adlayers on the Mixed Terminated ZnO (10 – 10) Surface Studied by He Atom Scattering, Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Electronic Structure Calculations
- M. Burchard, W.V. Maresch, N.L. Doltsinis, T. Fockenberg, W.A. Adeagbo, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **72** (2008) A119 Suppl S1. A complete thermodynamic formalism for high-pressure aqueous silicate solutions in the model system CaO-SiO₂-H₂O
- N. Nieber, N.L. Doltsinis, *Chem.Phys.*, **347** (2008) 405-412. Elucidating ultrafast nonradiative decay of photoexcited uracil in aqueous solution by ab initio molecular dynamics
- C. Burish, P.R.L. Markwick, N.L. Doltsinis, J. Schlitter, *J. Chem. Theory. Comput.*, **4** (2008) 164-172. The ‘dynamic distance’ reaction coordinate for competing bonds: applications in classical and ab initio simulations
- W.A. Adeagbo, N.L. Doltsinis, K. Klevakina, J. Renner, *Chem.Phys.Chem.*, **9** (2008) 994-1002. Transport processes at alpha-quartz-water interfaces: Insights from first-principles molecular dynamics simulations
- D. Kadzimirsz, D. Kramer, L. Sripanom, I.M. Oppel, P. Rodziewicz, N.L. Doltsinis, G. Dyker, *J. Org. Chem.*, **73** (2008) 4644-4649. A Domino Annulation Reaction under Willgerodt-Kindler Conditions
- N.L. Doltsinis, P.R.L. Markwick, H. Nieber, H. Langer, *Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics* (edited by J. Leszczynski), (2008) 265-299. Ultrafast Radiationless Decay in Nucleic Acids: Insights From Nonadiabatic Ab Initio Molecular Dynamics in Radiation Induced Molecular Phenomena in Nucleic Acid

- D. Mandal, V. Bertolasi, J. Ribas-Arino, G. Aromi, D. Ray, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 3465-3467. Self-Assembly of an Azido-Bridged [Ni₆ (II)] Cluster Featuring Four Fused Defective Cubanes
- P.B. Hall, P.M. Kowalewski, H.C. Harris, A. Awal, S.K. Leggett, M. Kilic, S.F. Andersoon, A. Gates, *Astronomical Journal*, **136** (2008) 76-82. A Nearby Old Halo White Dwarf Candidate from the Sloan Digital Sky Survey
- M. Kilic, P.M. Kowalski, F. Mullally, W.T. Reach, T. von Hippel, *Astrophysical Journal* **678** (2008) 1298-1303. The First Mid-Infrared Spectra of Cool White Dwarfs
- C. Carbogno, J. Behler, A. Gross, K. Reuter, *Phys. Rev. Lett.*, **101** (2008) 096104. Fingerprints for spin-selection rules in the interaction dynamics of O₂ at Al (111)
- J. Behler, R. Martonak, D. Donadio, M. Parrinello *phys. stat. sol. (b)*, **245** (2008) 2618. Pressure-induced phase transitions in silicon studied by neural network-based metadynamics simulations
- J. Behler, R. Martonak, D. Donadio, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.*, **100** (2008) 185501. Metadynamics simulations of the high-pressure phases of silicon employing a high-dimensional neural network potential
- J. Behler, K. Reuter, M. Scheffler, *Phys. Rev. B*, **77** (2008) 115421. Nonadiabatic effects in the dissociation of oxygen molecules at the Al (111) surface
- L. Hallmann, A. Bashir, T. Strunskus, R. Adelung, V. Staemmler, Ch. Wöll, F. Tuczek, Surfaces : Structural and Spectroscopic Characterization *Langmuir*, **24** (2008) 5726. Self-Assembled Monolayers of Benzylmercaptan and p-Cyanobenzylmercaptan on Au(111)
- V. Staemmler, P. Reinhardt, F. Allouti, M.E. Alikhani, *Chem.Phys.*, **349** (2008) 83. A Theoretical Study of the Electronic Structure of the Co₂O₂ Molecule
- O.Yu. Khyzhun, T. Strunskus, Ch. Wöll, H. Gies, V. Staemmler, *J.Chem.Phys.*, **129** (2008) 084711. Comparison of the O K α X-ray Emission Bands in Micro- and Mesoporous Silica Materials and in α -Quartz.
- I. Hegemann, A. Schwaebe, K. Fink, *J. Comput.Chem.*, **29** (2008) 2302. Adsorption of Single Cu Atoms at Differently Stabilized Polar ZnO Surfaces: An Ab Initio Study
- A. Hellweg, S. Grün, C. Hättig, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2008, **10**:4119-4127. Benchmarking the performance of spin-component scaled CC2 in ground and electronically excited states.
- T. Fleig, S. Knecht, C. Hättig, *J. Phys. Chem. A* 2008, **111**:5482-5491. Quantum-chemical investigation of the structures and electronic spectra of the nucleic acid basis at the coupled cluster CC2 level
- D. P. Tew, W. Klopper, C. Hättig, *Chem. Phys. Lett.* 2008, **452**:326-332. Diagonal orbital-invariant explicitly-correlated coupled-cluster method.
- R. Jaquet, W. Kutzelnigg, *Chem. Phys.* **346**, (2008) 69. Non-adiabatic theory in terms of a single potential energy surface. The vibration-rotation levels of H₂⁺ and D₂⁺
- W. Kutzelnigg, W.Liu, *Chem. Phys.* **349**, (2008) 133. Direct perturbation theory of relativistic corrections in a kinetically balanced Gaussian basis
- W. Kutzelnigg, *PCCP* **32**, (2008) 3460. The principle-quantum-number (and the radial-quantum-number) expansion of the correlation energy of two-electron atoms

- W. Kutzelnigg, *Int. J. Quantum Chem.* **108**, (2008) 2280. Relativistic corrections to the partial wave expansion of two-electron atoms.

Technische Chemie

- X. Xia, R. Naumann d' Alnoncourt, M. Muhler, *J. Therm. Anal. Cal.* **91** (2008) 167-172. Entropy of adsorption of carbon monoxide on energetically heterogeneous surfaces
- K. Merz, M. Moreno, E. Löffler, L. Khodeir, A. Rittermeier, K. Fink, K. Kotsis, M. Muhler, M. Driess, *Chem. Commun.* (2008) 73-75. Lithium-promoted hydrogenation of carbon dioxide to formats by heterobimetallic hydrido zinc alkoxide clusters
- R. Naumann d' Alnoncourt, B. Graf, X. Xia, M. Muhler, *J. Therm. Anal. Cal.* **91** (2008) 173-179. The Back-Titration of Chemisorbed Atomic Oxygen on Copper by Carbon Monoxide Investigated by Microcalorimetry and transient Kinetics
- J. Assmann, V. Narkhede, N.A. Breuer, M. Muhler, A.P. Seitsonen, M. Knapp, D. Crihan A. Farkas, G. Mellau, H. Over, *J. Phys.: Condens. Matter* **20** (2008) 184017. Heterogeneous Oxidation Catalysis on Ruthenium: Bridging the Pressure and Materials gaps and Beyond
- K.O. Hinrichsen, K. Kochloefl, M. Muhler, *Handbook of Heterogeneous Catalysis*, Wiley (2008) chapter 13.1. Water Gas Shift and COS Removal
- K. Kochloefl, M. Muhler, *Handbook of Heterogeneous Catalysis*, Wiley (2008) chapter 14.7.3. Dehydrogenation of Ethylbenzene
- X. Chen, N. Li, W. Xia, M. Muhler, W. Schuhmann, M. Bron, *Microchimica Acta* **161** (2008) 95-100. Directional pyrolytic growth of microscale carbon fibers on electro-chemically pretreated polyacrylonitrile-based carbon microfibers
- M. Polyakov, M. W.E. van den Berg, T. Hanft, M. Poisot, W. Bensch, M. Muhler, W. Grünert, *J Catal.* **256** (2008) 126-136. Hydrocarbon reactions on MoS₂ revisited, I: Activation of MoS₂ and interaction with hydrogen studied by transient kinetic experiments
- S. Olejnik, C. Baltes, M. Muhler, F. Schüth, *J. Comb. Chem.* **10** (2008) 387-390. Parallelized N₂O Frontal Chromatography for the Fast Determination of Copper Surface Areas
- Ch. Rohmann, Y. Wang, M. Muhler, J. Metson, H. Idriss, Ch. Wöll, *Chem. Phys. Lett.* **460** (2008) 10-12. Direct monitoring of photo-induced reactions on well-defined metal oxide surfaces using vibrational spectroscopy
- T. Hikov, A. Rittermeier, M.-B. Lüdemann, Ch. Herrmann, M. Muhler, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **18** (2008) 3325-3331. Preparation of ZnO colloids by pyrolysis of [MeZnOiPr]₄ in the presence of hexadecylamine and probing the surface chemistry of the nanoparticles by CO/CO₂ adsorption studies followed by FTIR
- B. M. Reddy, P. Bharali, P. Saikia, S. E. Park, M. van den Berg, M. Muhler, W. Grünert, *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 11729-11737. Structural Characterization and Catalytic Activity of Nanosized CexM_{1-x}O₂ (M = Zr and Hf) Mixed Oxides
- X. Xia, J. Strunk, W. Busser, R. Naumann d' Alnoncourt, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **112** (2008) 10938-10942. Probing the Surface Heterogeneity of Polycrystalline Zinc Oxide by Static Adsorption Microcalorimetry. 1. The Influence of the Thermal Pretreatment on the Adsorption of Carbon Dioxide

- X. Xia, J. Strunk, R. Naumann d'Alnoncourt, W. Busser, L. Khodeir, M. Muhler, J. *Phys. Chem. C* **112** (2008) 10931-10937. Probing the Surface Heterogeneity of Polycrystalline Zinc Oxide by Static Adsorption Microcalorimetry. 2. The Adsorption of Carbon Monoxide
- M. Rohe, E. Löffler, M. Muhler, A. Birkner, C. Wöll, K. Merz, *Dalton Trans.* (2008) 6106-6109. A gold-containing TiO complex: a crystalline molecular precursor as an alternative route to Au/TiO₂ composites
- M. Polyakov, S. Indris, S. Schwamborn, A. Mazheika, M. Poisot, L. Kienle, W. Bensch, M. Muhler, W. Grünert, *J. Catal.* **260** (2008) 236-244. Mechanochemical activation of MoS₂-Surface properties and catalytic activities in hydrogenation and isomerization of alkenes and in H₂/D₂ exchange
- H. Noei, Q.Y. Wang, E. Löffler, C. Wöll, M. Muhler, *Phys. Chem. Phys.* **10** (2008) 7092-7097. The identification of hydroxyl groups on ZnO nanoparticles by infrared spectroscopy
- S. Kaluza, M.K. Schröter, R. Naumann d'Alnoncourt, T. Reinecke, M. Muhler, *Adv. Funct. Mater.* **18** (2008) 3670-3677. High Surface Area ZnO Nanoparticles via a Novel Continuous Precipitation Route
- M. Müller, S. Hermes, K. Kähler, M. van den Berg, M. Muhler, R. A. Fischer, *Chem. Mater.* **20** (2008) 4576-4587. Loading of MOF-5 with Cu and ZnO Nanoparticles by Gas-Phase Infiltration with Organometallic Precursors: Properties of Cu/ZnO @MOF-5 as Catalyst for Methanol Synthesis
- S. Kundu, Y. Wang, W. Xia, M. Muhler, *J. Phys. Chem.* **112** (2008) 16869-16878. Thermal Stability and Reducibility of Oxygen-Containing Functional Groups on Multiwalled Carbon Nanotube Surfaces: A Quantitative High-Resolution XPS and TPD/TPR Study
- S. V. Merzlikin, N. N. Tolkachev, T. Strunskus, G. Witte, T. Glogowski, C. Wöll, W. Grünert, *Surface Science* **602** (2008) 755-767. Resolving the Depth Coordinate in Photoelectron Spectroscopy – Comparison of Excitation Energy variation vs. Angular-resolved XPS for the Analysis of a Self-assembled Monolayer System
- M. Schwidder, M. Santhosh Kumar, U. Bentrup, J. Perez-Ramirez, A. Brückner, W. Grünert, *Microporous Mesopor. Mater.* **111** (2008) 124-133. The role of Bronsted acidity in the SCR of NO over Fe-MFI catalysts
- M. Polyakov, M. Poisot, W. Bensch, M. Muhler, W. Grünert, *J. Catal.* **256** (2008) 137-144. Hydrocarbon reactions on MoS₂ revisited. II. Catalytic properties in alkene hydrogenation, cis-trans isomerization and H₂/D₂ exchange
- Z. S. Hou, N. Theyssen, A. Brinkmann, K. V. Klementiev, W. Grünert, M. Bühl, W. Schmidt, B. Spliethoff, B. Tesche, C. Weidenthaler, W. Leitner, *J. Catal.* **258** (2008) 315-323. Supported palladium nanoparticles on hybrid mesoporous silica: Structure/ activity-relationship in the aerobic alcohol oxidation using supercritical carbon dioxide
- M. Schwidder, S. Heikens, A. De Toni, S. Geisler, M. Berndt, A. Brückner, W. Grünert, *J. Catal.* **259** (2008) 96-103. The role of NO₂ in the Selective Catalytic Reduction of Nitrogen Oxides over Fe-ZSM-5 Catalysts – Active Sites for the Conversion of NO and of NO/NO₂ mixtures
- S. V. Merzlikin, N. N. Tolkachev, T. Strunskus, G. Witte, T. Glogowski, C. Wöll, W. Grünert, *Surface Science* **602** (2008) 3634-3635. Reply to a Comment of J. Zemek to „Resolving the Depth Coordinate in Photoelectron Spectroscopy – Comparison of Excitation Energy variation vs. Angular-resolved XPS for the Analysis of a Self-

- assembled Monolayer System” (S. V. Merzlikin, N. N. Tolkachev, T. Strunskus, G. Witte, T. Glogowski, C. Wöll, W. Grünert, *Surface Science* **602** (2008) 755-767)
- Lizandara-Pueyo, C. van den Berg, M. W. E., De Toni, A., Goes, T., Polarz, S., *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 16601-16610. Nucleation and Growth of ZnO in Organic Solvents - an in Situ Study
 - Müller, M., Hermes, S., Kähler, K., van den Berg, M. W. E., Muhler, M., Fischer, R. A., *Chem. Mater.* **20** (2008) 4576-4587. Loading of MOF-5 with Cu and ZnO nanoparticles by gas-phase infiltration with organometallic precursors: properties of Cu/ZnO@MOF-5 as catalyst for methanol synthesis
 - F. Schröder, D. Esken, M. W. E. van den Berg, O. I. Lebedev, G. van Tendeloo, B. Walaszek, G. Buntkowsky, H. H. Limbach, B. Chaudret, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **130** (2008) 6119-6130. Ruthenium nanoparticles inside porous [Zn₄O(bdC)(3)] by hydrogenolysis of adsorbed [Ru(cod)(cot)]: A solid-state reference system for surfactant-stabilized ruthenium colloids”

Biochemie 1

- C. Sager, D. Tapken, S. Kott, M. Hollmann, *Neuroscience* **158**(1) (2009) 45-54, [Epub ahead of print, 18.1.2008]. Special issue "Protein Trafficking, Targeting and Interactions at the Glutamate Synapse". Functional modulation of AMPA receptors by TARPs.
- S. Kott, C. Sager, D. Tapken, M. Werner, M. Hollmann, *Neuroscience* **158**(1) (2009) 78-88, [Epub ahead of print, 18.1.2008]. Special issue "Protein Trafficking, Targeting and Interactions at the Glutamate Synapse". Comparative analysis of the pharmacology of GluR1 in complex with TARPs γ 2, γ 3, γ 4, and γ 8.
- T. Hülksen, C. Marek, S. Schreiber, Iris Schmidt, M. Hollmann, *Zootaxa* **1770** (2008) 1-40. The Naticidae (Mollusca: Gastropoda) of Giglio Island (Tuscany, Italy): Shell characters, live animals, and a molecular analysis of egg masses.
- S.M. Schmid, M. Hollmann, *Deutsche Zeitschrift für Klinische Forschung* **7/8** (2008) 57-61. Molekulare Scharniere bei Glutamatrezeptoren: Schalter für den Ionenkanal und therapeutische Targets.
- M. Hollmann, In: *Philippine marine mollusks. Vol. I* (Gastropoda - Part I). G. Poppe, (ed.). ConchBooks, Hackenheim, (2008) pp. 482-501 (of 759 pp). Naticidae.
- S.M. Schmid, M. Hollmann, *Molecular Neurobiology* **37**(2-3) (2008) 126-141. To gate or not to gate: Are the delta subunits in the glutamate receptor family functional ion channels?
- D. Tapken, M. Hollmann, *Journal of Molecular Biology* **383**(1) (2008) 36-48. Arabidopsis thaliana glutamate receptor ion channel function demonstrated by ion pore transplantation.
- N.A. Cavara, M. Hollmann, *Molecular Neurobiology* **38**(1) (2008) 16-26. Shuffling the deck anew: How NR3 tweaks NMDA receptor function.
- L. Zhang, J. Schessl, M. Werner, C. Bonnemann, G. Xiong, J. Mojsilovic-Petrovic, W. Zhou, A. Cohen, P. Seeburg, H. Misawa, A. Jayaram, K. Personius, M. Hollmann, R. Sprengel, R. Kalb, *Journal of Neuroscience* **28**(40) (2008) 9953-9968. Role of GluR1 in activity-dependent motor system development.
- C. Villmann, J. Hoffmann, M. Werner, T. Nilsson, M. Hollmann, *Journal of Neurochemistry* **107**(2) (2008) 453-465. Different structural requirements for functional

ion pore transplantation suggest different gating mechanisms of NMDA and kainate receptors.

- A. Mor, S. Levy, M. Hollmann, Y. Grossman, *Diving and Hyperbaric Medicine* **38(4)** (2008) 134-136. Differential effect of high pressure on NMDA receptor currents in *Xenopus laevis* oocytes.
- S. Eilebrecht, FX Pellay, P. Odenwälder, G. Brysbaert, B.J. Benecke, A. Benecke, *BMC Research Notes* **1** (2008) 100. EBER2 RNA-induced transcriptome changes identify cellular processes likely targeted during Epstein Barr Virus infection.
- Lange W, Geibendorfer J, Schenzer A, Grotzinger J, Seeböhm G, Friedrich T, Schwake M. *Mol Pharmacol.*, **75(2)** (2008) 272-80. Refinement of the binding site and mode of action of the anticonvulsant retigabine on KCNQ K⁺ channels.
- Seeböhm G, Strutz-Seeböhm N, Ureche ON, Henrion U, Baltaev R, Mack AF, Korniyuchuk G, Steinke K, Tapken K, Pfeufer A, Kääh S, Bucci C, Attali B, Merot J, Tavaré JM, Hoppe UC, *Sanguinetti MC and Lang F. Circ. Res.*, **103(12)** (2008) 1451-7. Long QT syndrome-associated mutations in KCNQ1 and KCNE1 subunits disrupt normal endosomal recycling of IKs channels.
- Morokuma J, Blackiston D, Adams DS, Seeböhm G, Trimmer B and Levin M. *PNAS*, **105(43)** (2008) 16608-13. Modulation of potassium channel function confers a hyperproliferative invasive phenotype on embryonic stem cells.
- Weber YG, Storch A, Wuttke TV, Brockmann K, Kempfle J, Maljevic S, Margari L, Kamm C, Schneider SA, Huber SM, Pekrun A, Roebeling R, Seeböhm G, Koka S, Lang C, Kraft E, Blazevic D, Salvo-Vargas A, Fauler M, Mottaghy FM, Münchau A, Edwards MJ, Presicci A, Margari F, Gasser T, Lang F, Bhatia KP, Lehmann-Horn F, Lerche H. *Journal of Clinical Investigation* **118(6)** (2008) 2157-68. GLUT1 mutations are a cause of paroxysmal exertion-induced dyskinesias and a cation leak of this glucose transporter is linked to hemolytic anemia.
- Ureche ON, Baltaev R, Ureche L, Strutz-Seeböhm N, Lang F and Seeböhm G. *Cell Physiol Biochem.* **21(5-6)** (2008) 347-56. Novel Insights into the structural Basis of pH-Sensitivity in Inward Rectifier Channels Kir2.3.
- Fedorenko O, Strutz-Seeböhm N, Henrion U, Ureche ON, Lang F, Seeböhm G*, Lang UE*. *Psychopharmacology* **199(1)** (2008) 47-54. A Schizophrenia-linked Mutation in PIP5K2A fails to activate neuronal M-channels
- Wuttke TV, Penzien J, Fauler M, Seeböhm G, Lehmann-Horn F, Lerche H, Jurkat-Rott K. *J Physiol.* **586(2)** (2008) 545-55. Neutralization of a negative charge in the S1-S2 region of the Kv7.2 (KCNQ2) hannel affects voltage-dependent activation in neonatal epilepsy.
- Maljevic S*, Wuttke T*, Seeböhm G*, *Lerche H. Cell Science* **4** (2008) 53-73 – review article. Role of the KCNQ gene family in ion channel disorders.
- Lam RS and Seeböhm G. In *Ion Channel Biophysics and Disease* (2008) – Book chapter. Alterations in the endosomal recycling of channel proteins contribute to disease states.

Biochemie 2

- K.Chakrabarty, R. Heumann *Biol. Chem.* **389** (2008) 791-798. Prospective of Ras signaling in stem cells

- K. Ganesan, A. Kovtun, S. Neumann, R. Heumann, M. Epple *J. Mater. Chem.* **18** (2008) 3655–3661. Calcium phosphate nanoparticles: colloiddally stabilized and made fluorescent by a phosphate-functionalized porphyrin
- S. Mann, B. Versmold, R. Marx, S. Stahlhofen, ID. Dietzel, R. Heumann and R. Berger *Journal of Neuroinflammation* **5** (2008) 39. Corticosteroids reverse cytokine-induced block of survival and differentiation of oligodendrocyte progenitor cells from rats
- R. Romero-Calderon, G. Uhlenbrock, J. Borycz, A.F. Simon, A. Grygoruk, S.K. Yee, A. Shyer, L.C. Ackerson, N.T. Maidment, I.A. Meinertzhagen, B.T. Hovemann, D.E. Krantz, (2008) A glial variant of the Vesicular Monoamine Transporter is required to store histamine in the *Drosophila* visual system *PLoS Genet* **4** 1-13
- S. Aust, C. Heseding, F. Brüsselbach, S. Pütz, B.T. Hovemann (2009) How does Tan maturation and reaction kinetic affect histamine recycling from carcinine? *J.Neurogenet* **23** Suppl. 1
- A. Ziegler, J. Riester, M. Heisenberg, B.T. Hovemann (2009) Pathways of β -alanine supply and their significance for vision in *Drosophila* *J.Neurogenet* **23** Suppl. 1
- R. Romero-Calderon, G. Uhlenbrock, J. Borycz, A.F. Simon, A. Grygoruk, S.K. Yee, A. Shyer, L.C. Ackerson, N.T. Maidment, I.A. Meinertzhagen, B.T. Hovemann, D.E. Krantz, (2009) A glial variant of the Vesicular Monoamine Transporter is required to store histamine in the *Drosophila* visual system *J.Neurogenet* **23** Suppl. 1
- R. Stoll, A.-K. Bosserhoff, *Current Protein and Peptide Science* **9** (2008), 221-226. Different biological functions of extracellular SH3 domain-containing proteins.
- N. Schrader, C. Koerner, K. Koessmeier, J.-A. Bangert, A. Wittinghofer, R. Stoll, I.R. Vetter, *Structure* **16** (2008), 1116-1125. The crystal structure of the Ran-Nup152ZnF2 complex: a general docking site at the nuclear pore complex.
- H. Rehmann, M. Bruening, C. Berghaus, M. Schwarten, K. Koehler, H. Stocker, R. Stoll, F. Zwartkruis, A. Wittinghofer, *FEBS Letters* **582** (2008), 3005-3010. Biochemical characterisation of TCTP questions its function as a guanine nucleotide exchange factor for Rheb.
- R. Graves, M. Baer, E. Schreiner, R. Stoll, D. Marx, *ChemPhysChem* **9** (2008), 2759-2765. Conformational dynamics of minimal elastin-like polypeptides: The role of proline revealed by molecular dynamics and nuclear magnetic resonance.
- N. Stenzel, K.S. Erdmann *Bioforum*, **5**, (2008) 25-27 PDZ Domänen- Molekularer Baukasten der Natur
- H.J. Welters, A. Oknianska, K.S. Erdmann, G. Ryffel, N. Morgan *J. Endocrinol.*, **197** (2008) 543-552 The protein tyrosine phosphatase, PTP-BL, modulates pancreatic beta-cell proliferation by interaction with the Wnt signalling pathway.

Didaktik der Chemie

- K. Sommer, S. Metzger, *Schülerübungen im Chemieunterricht der Realschule in Bayern – Zwischen Lehrplan, Schulalltag und Bildungsstandards*. In: Experimentelle Aufgabenstellungen im Chemieunterricht. Akademiebericht, Dillingen 2008, S.47-58
- L. Gehle, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **103** (2008) 31-35. Citronensäure in Lebensmitteln.
- K. Sommer, P. Pfeifer, H. Schmidkunz, *Unterricht Chemie* **105** (2008) 4-7. Lebensmittelfarbstoffe und Chemieunterricht - Möglichkeiten zur Anwendung chemischer Fachmethoden.

- V. Tettenborn, K. Thimm, H. Kleinhorst, J. Lorke, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **105** (2008) 13-15. Grün oder blau und gelb.
- S. Hanisch, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **105** (2008) 22-23. Dekorationsperlen aus „Silber“ und „Gold“.
- H. Kleinhorst, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **105** (2008) 24-27. Schafwolle und Perlonstrümpfe – Isolierung und Identifizierung gelber und grüner Lebensmittelfarbstoffe.
- J. Lorke, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **105** (2008) 32-36. Die Farbe Blau – Die Isolierung und Identifizierung blauer Farbstoffe in Lebensmitteln.
- D. Unkauf, P. Pfeifer, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **105** (2008) 42-48. Farbstoffe in Limonade und Wackelpudding. Die Festphasenextraktion als Isolierungsmethode im Chemieunterricht.
- R. Wieczorek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **106/107** (2008) 88-93. Abgestufte Lernhilfen und deren Einsatz bei eigenverantwortlichen Schülerexperimenten.
- K. Sommer, K. Kotissek, A. Strake, P. Pfeifer, *Unterricht Chemie* **108** (2008) 43-47. Christstollen und Weihnachtsbraten - Die Maillard-Reaktion als Schlüssel zum Erfolg.
- Russek, S. Hanisch, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **108** (2008) 19-23. Glühwein - ein Stoffgemisch.
- S. Metzger, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **108** (2008) 16-18. Eiszapfen am Tannenbaum - Experimente mit Lametta.

Promotionen der Fakultät für Chemie und Biochemie

01.01.2008-31.12.2008

Sergiy Merzlikin

Depth Profiling by X-Ray Photoelectron Spectroscopy

Prof. Dr. W. Grünert

11.01.2008

Nan Li

The Synthesis of Carbon Nanocomposites as Fuel Cell Catalyst Support and the Characterization of Fuel Cell Catalysts by Spatially Resolved Scanning Mass Spectroscopy

Prof. Dr. M. Muhler

11.01.2008

Sasisanker Padmanabhan

Dielectric Relaxation Spectroscopy of Proteins in Solution: Insight into Protein-Water Interactions, Protein Folding Phenomena and Self-Association of Proteins

Prof. Dr. H. Weingärtner

18.01.2008

Merja Neukamm

Synthese und biologische Aktivität von Cobaltcarbonyl-Alkin-Peptid-Biokonjugaten

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

18.01.2008

Wibke Bayer

Evaluierung adenoviraler und herpesviraler Vektoren zur anti-retroviralen Vakzinierung im Friend-Virus-Modell

Prof. Dr. O. Wildner

01.02.2008

Götz Wollny

Infrarot-Nahfeldmikroskopie von Phospholipiden

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

08.02.2008

Markus Ortlieb

Spektroskopie von $(\text{HCl})_x (\text{H}_2\text{O})_y$ -Clustern in superflüssigen Heliumtröpfchen

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

08.02.2008

Christian Mark Hülsbusch

Peptidcavitanden

Prof. Dr. M. Feigel

11.02.2008

Simon Peter Engels

Makrocyclisierung und Knotenbildung von Aminocholansäurepseudopeptiden

Prof. Dr. M. Feigel

13.02.2008

Daniel Rische

MOCVD of Tungsten- and Molybdenum Nitrides

Prof. Dr. R. Fischer

15.02.2008

Insa Berger

Strukturelle und biochemische Charakterisierung von Kerntransportrezeptoren

Prof. Dr. A. Wittinghofer

28.02.2008

Daniel Chairat Thomas Kahakeaw

Studies Enabling a Faster Directed Evolution Evolving Stereoconvergent Epoxide Hydrolases

Prof. Dr. M. Reetz

29.02.2008

Elmar Langenfeld

Analytik von homologen P450-Proteinen in humaner Leber mittels Tripel-Quadrupol-Massenspektrometrie

Prof. Dr. H. E. Meyer

29.02.2008

Jennifer Strunk

On the Role of the Various Active Sites on ZnO-based Catalysts for the Heterogeneously Catalyzed Methanol Synthesis

Prof. Dr. M. Muhler

14.03.2008

Delia Deaconescu

Biochemical Characterization of the GTPase-activating protein

Prof. Dr. A. Wittinghofer

31.03.2008

Ursula Maria Theocharidis

Regulation und Funktion von Tenascin-C-Isoformen während der Entwicklung des zentralen Nervensystems und in neuronalen Stammzellen

Prof. Dr. A. Faissner

11.04.2008

Sven Hennig

Strukturelle und biochemische Analyse von PAS-Domänen Interaktionen in den Uhrenproteinen *Drosophila* PERIOD und Maus PERIOD2

P.D. Dr. Eva Wolf

18.04.2008

Michael Alexander Scharwitz

Design, Zellaufnahme und DNA-Wechselwirkung von zytotoxischen Ir^{III} und Rh^{III} Organometallkomplexen

Prof. Dr. W.S. Sheldrick

25.04.2008

Helena Breitkreuz

Biochemische und Biophysikalische Charakterisierung von CRYPTOCHROMEN als circadiane Photorezeptoren, integrale Uhrenproteine und Magnetrezeptoren

PD Dr. Eva Wolf

25.04.2008

Kirsten Föcker

Einfluss der Seitenketten beim Aufbau von Koordinationsverbindungen mit C₃-symmetrischen Liganden

PD Dr. Iris Oppel

21.05.2008

Dominik Schäfer

Elektrochemische Rastermikroskopie bei variablen Temperaturen

Prof. Dr. W. Schuhmann

24.06.2008

Konstanze Schröck

Terahertz-Spektroskopie - Charakterisierung von polykristallinen Biomolekülen, metallorganischen Netzwerken und staubigen Plasmen

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

25.06.2008

Katharina Lohrig

Phosphorylierungsanalytik plastidärer Proteine aus *A. thaliana*

Dr. Dirk Wolters

01.07.2008

Horst Peter Höbenreich

Enantioselective Esterase Activities Identification of new and Evolution of conventional Functionalities

Prof. Dr. M. T. Reetz

02.07.2008

Asif Bashir

Growth and Structural Characterization of Self-Assembled Monolayers (SAMs) on Gold made from Functionalized Thiols and Selenols

Prof. Dr. Chr. Wöll

03.07.2008

Xingxing Chen

Electrochemical Synthesis and Characterization of Catalytically Active Carbon-Supported Electrocatalysts

Prof. Dr. W. Schuhmann

04.07.2008

Antonina Joanna Mazur

Expression of constructs of WT- α -cardiac actin and its mutants in different cell lines and primary rat cardiac myocytes

Prof. Dr. H.G. Mannherz

04.07.2008

Sabine Ursula Kott

Charakterisierung der funktionellen Modulation von AMPA-Rezeptoren durch TARPs

Prof. Dr. M. Hollmann

08.07.2008

Emad Mohamed Hussien Amine

Visualization of local biocatalytic activity using scanning electrochemical microscopy

Prof. Dr. W. Schuhmann

11.07.2008

Anna Kromm

Strukturelle Vielfalt von Mangan(II)-Komplexen mit Polyselenid-Liganden und Selenido-metallat-Liganden der Gruppe 14 und 15

Prof. Dr. W.S. Sheldrick

17.07.2008

Joanna Will

Massenspektrometrische Ermittlung der Proteintargets von zytotoxischen Metallkomplexen in Blutserum und *E. coli*-Zellen
Prof. Dr. W.S. Sheldrick
23.07.2008

Adrian Syguda

Strukturelle und biophysikalische Charakterisierung der Oligomerisierung des humanen Guanylat-bindenden Proteins 1
Prof. Dr. Chr. Herrmann
05.08.2008

Thomas Hülsken

Phylogenetic relationship and species identification within the Naticidae Guilding, 1934 (Gastropoda: Caenogastropoda)
Prof. Dr. M. Hollmann
11.08.2008

Shaun Richard Presow

An Experimental Study of Five-Coordinate Iron Complexes Containing Non-Innocent Aminobenzenethiol Based Ligands
Prof. Dr. K. Wieghardt
15.08.2008

Daniel Christian Tapken

Molekulare und funktionelle Charakterisierung pflanzlicher Glutamatrezeptoren
Prof. Dr. M. Hollmann
28.08.2008

Kirsten Lill

Electrochemical Investigations on the Corrosion Properties of New Classes of Light Weight Steels
Prof. Dr. M. Stratmann
02.09.2008

Gordon Redlich

Proteom- und Phosphoproteom-Analyse humaner Primärhepatozyten und Lebermikrosomen unter pharmakologischen Aspekten
Prof. Dr. K. Marcus
05.09.2008

Carsten Schmidt

Untersuchungen an *Xenopus laevis*-Glutamatrezeptoren
Prof. Dr. M. Hollmann
08.09.2008

Flavio Luiz Benedito

An Experimental and Theoretical Study of Transition Metal Complexes Containing Redox Noninnocent *ortho*-Dithiolate Ligands
Prof. Dr. K. Wieghardt
29.09.2008

Nabarun Roy

A Combined Experimental and Theoretical Study of Transition Metal Complexes Containing Redox Noninnocent Aminobenzenethiol Based Ligands

Prof. Dr. K. Wieghardt

29.09.2008

Jean Sébastien Samson

Near-Field Microscopy: Characterization of a-C:H:N Particles and Doped Silicon with Near-Field Microscopy

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

27.10.2008

Harun Tüysüz

Novel Mesostructured Metal Oxides

Prof. Dr. F. Schüth

01.12.2008

Agne Koturenkiene

Molecular basis for apoptotic Ras signalling through Nore1-MST1 multi-protein complex formation

Prof. Dr. Chr. Herrmann

08.12.2008

Sebastian Eilebrecht

Identifizierung einer neuen Funktion der 7SK RNA als Regulator der Genexpression

Prof. Dr. B-J. Benecke

08.12.2008

Hans-Ulrich Wüstefeld

Übergangsmetallkomplexe mit basischen N-Donor-Liganden in Katalyse und medizinischer Chemie

Prof. Dr. F. Schüth

08.12.2008

Jan Zimmermann

Sequenzadressiertes Self-Assembly eines DNA-Dodekaeders aus einem Satz von 20 Tris-oligonucleotiden mit C3h-symmetrischen Linkerelementen

Prof. Dr. G. von Kiedrowski

09.12.2008

Anja Metzelthin

High Resolution IR-Spectroscopy of Acetylene-Furan and NO in Ultracold Helium Nanodroplets

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

11.12.2008

Robert Reinhard Wiczorek

Das Citrusflavonoid und Antioxidationsmittel Naringin - Experimentelle Erschließung und didaktisch methodische Umsetzung für Schule und Hochschule unter besonderer Berücksichtigung gestufter Lernhilfe

Prof. Dr. K. Sommer

11.12.2008

Joel Torres Alacan

Time-Resolved Spectroscopy on Metal Complexes and Organic Reactive Intermediates

Prof. Dr. W. Sander

12.12.2008

Christine David

Identifizierung und Charakterisierung von Komponenten der peroxisomalen Importmaschinerie aus Hefe und Mensch

Prof. Dr. R. Erdmann

12.12.2008

Britta Julia Kleine

Biochemische und Molekulare Charakterisierung der Lipase und des SdrI *Staphylococcus saprophyticus*

Prof. Dr. S.G. Gatermann

15.12.2008

Rolf Chelmowski

Proteinchemie an Oberflächen - von der spezifischen Interaktion zur Proteinresistenz

Prof. Dr. Chr. Wöll

18.12.2008

Felicitas Schröder

Synthesis and Microstructural Characterization of Metals@MOF-5

Prof. Dr. R. Fischer

19.12.2008

Daniel Käfer

Characterization and Optimization of Growth and Electronic Structure of Organic Thin Films for Applications in Organic Electronics

Prof. Dr. Chr. Wöll

19.12.2008

Ketheeswari Rajalingam

Reactions at an organic surface

Prof. Dr. Chr. Wöll

19.12.2008