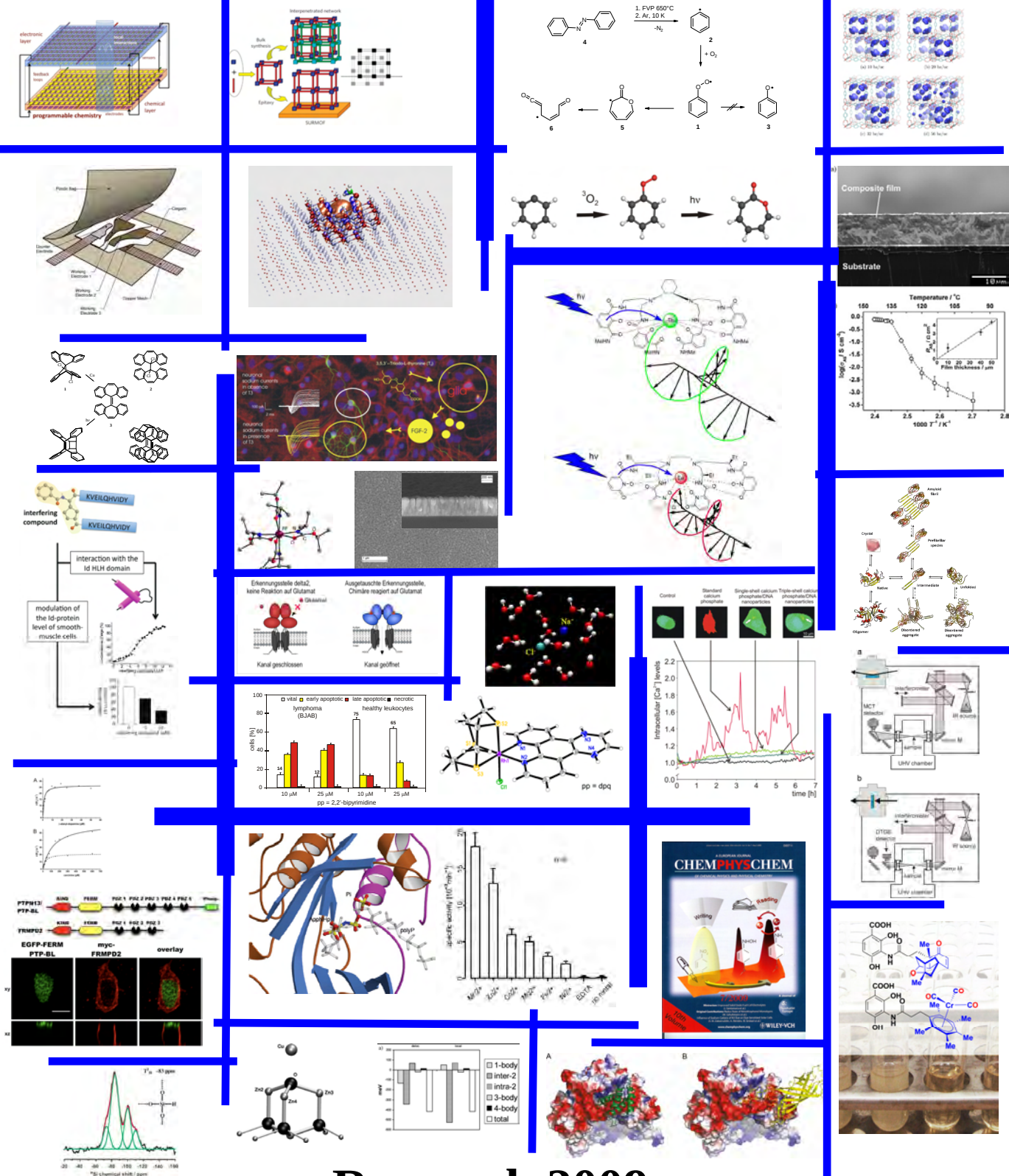


Ruhr-Universität Bochum

Fakultät für Chemie und Biochemie

Forschung 2009



Research 2009

Faculty of Chemistry

Ruhr-Universität Bochum

Wie schon seit einigen Jahren soll auch dieser Jahresbericht wieder einen kurzen Eindruck über die Vielfältigkeit der Forschung in der Fakultät für Chemie und Biochemie der Ruhr-Universität Bochum vermitteln. Wenn Sie zu den einzelnen Themen weitere Informationen wünschen, können Sie unter den angegebenen Adressen der Homepages der Arbeitsgruppen oder über die Homepage der Fakultät (www.ruhr-uni-bochum.de/chemie) vertiefte Einblicke erhalten. Sicher sind die Leiter der Arbeitsgruppen auch jederzeit bereit, telefonisch oder während eines Besuches über ihre Forschungsergebnisse mit Ihnen zu diskutieren.

Bochum, im August 2010

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

(Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann)

Beispiele aus der Forschung

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 1

Prof. Dr. Nils Metzler-Nolte	4
Prof. Dr. Anja Mudring (Festkörperchemie und Materialien)	5
Dr. Ulrich Schatzschneider	6
Dr. Michael Seitz	7

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2

Prof. Dr. Roland Fischer (Organometallics & Materials)	8
JP Dr. Anjana Devi (Chemie anorganischer Materialien)	9
Dr. Rochus Schmid	10

Lehrstuhl für Organische Chemie 1

Prof. Dr. John MacCaskill	11
Prof. Dr. Chiara Cabrele	12

Lehrstuhl für Organische Chemie 2

Prof. Dr. Wolfram Sander	13
Prof. Dr. Gerald Dyker (Metallorganische Synthesechemie)	14

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 1

Prof. Dr. Christian Herrmann (Protein-Interaktionen)	15
--	----

Lehrstuhl für Physikalische Chemie 2

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

Lehrstuhl für Analytische Chemie

Prof. Dr. William Sheldrick	18
Prof. Dr. Wolfgang Schuhmann (Elektroanalytik & Sensorik)	19
Dr. Nicolas Plumere	20
Dr. Fabio La Mantia	21
Dr. Alexander Bondarenko	22

Lehrstuhl für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Dominik Marx	23
Prof. Dr. Christof Hättig	24
Prof. Dr. Volker Staemmler (Quantenchemie)	25

Lehrstuhl für Technische Chemie

Prof. Dr. Martin Muhler	26
Prof. Dr. Wolfgang Grünert (Struktur/Reaktivität heterogener Katalysatoren)	27
Dr. Yuemin Wang	28

Lehrstuhl für Biochemie 1

Prof. Dr. Michael Hollmann (Rezeptorbiochemie)	29
Prof. Dr. Guiscard Seeböhm	30

Lehrstuhl für Biochemie 2

Prof. Dr. Rolf Heumann (Molekulare Neurobiochemie)	31
Prof. Dr. Irmgard Dietzel-Meyer (Elektrochemie neuraler 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	37
-----------------------------------	----

Integriertes Graduiertenkolleg im Sonderforschungsbereich 558	38
---	----

Forscherguppe 630	39
-------------------------	----

Research Department Interfacial Systems Chemistry (RD-IFSC)	40
---	----

Zentrum für Elektrochemie (CES)	41
---------------------------------------	----

Marie Curie Initial Training, ENHANCE	42
---	----

Veröffentlichungen

Anorganische Chemie 1	43
Anorganische Chemie 2	46
Organische Chemie 1	48
Organische Chemie 2	49
Physikalische Chemie 1	49
Physikalische Chemie 2	50
Analytische Chemie	51
Theoretische Chemie	55
Technische Chemie	57
Biochemie 1.....	60
Biochemie 2.....	61
Didaktik der Chemie	62
Promotionen 2009.....	63

Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

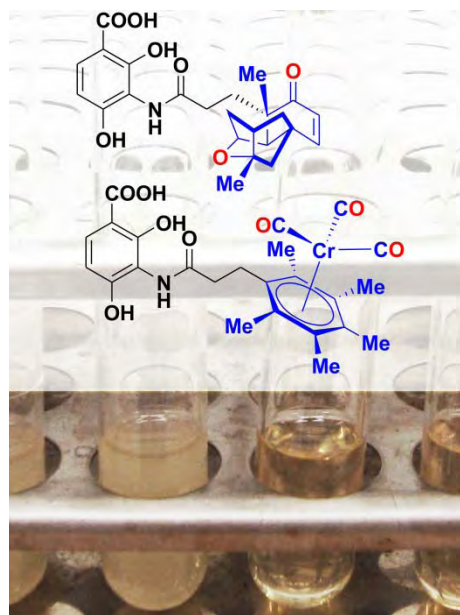
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

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

M. Patra, G. Gasser, A. Pinto, K. Merz, I. Ott, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *ChemMedChem* **4** (2009) 1930 – 938. Synthesis and Biological Evaluation of Chromium Bioorganometallics Based on the Antibiotic Platensimycin Lead Structure



Vor kurzem wurde Platensimycin (obere Struktur, links) als ein Antibiotikum mit einem neuartigen Wirkmechanismus identifiziert. In der Folge wurden einige rein *organische* Derivate von Platensimycin synthetisiert. In dieser Arbeit beschreiben wir die Synthese und biologische Aktivität der ersten metallorganischen Derivate von Platensimycin. Zwei Derivate mit der $(\eta^6\text{-Pentamethyl-benzol})\text{Cr}(\text{CO})_3$ (links, untere Struktur) und einer $(\eta^6\text{-Benzol})\text{Cr}(\text{CO})_3$ Gruppe, die an die aromatische Einheit von Platensimycin gebunden sind, wurden in einer mehrstufigen Synthese dargestellt und untersucht. Die Verbindungen sind inaktiv gegen Gram-negative *E. coli*, jedoch zeigt das Pentamethyl-benzol-derivat vielversprechende Aktivität gegen die Gram-positiven *B. subtilis* Bakterien. Gegen Säugerzelllinien zeigen beiden Verbindungen keine starke Cytotoxizität. Die Zellaufnahme und intrazelluläre Verteilung der

Verbindung in *B. subtilis* wurde mittel Atomabsorptionsspektroskopie untersucht und mit $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$ verglichen, um erste Einblicke in den möglichen Wirkmechanismus zu erhalten. Die Verbindungen, die mittlerweile zum Patent angemeldet wurden, zeigen den Weg zu innovativen, metallhaltigen Antibiotika durch rationales *Drug Design* auf.

The recent discovery of the natural product platensimycin (upper structure on the left) as a new antibiotic lead structure has triggered the synthesis of numerous *organic* derivatives of platensimycin. In this work, we describe the synthesis and biological evaluation of the first *organometallic* antibiotics inspired by the platensimycin lead structure. Two bioorganometallic compounds containing $(\eta^6\text{-pentamethyl-benzene})\text{Cr}(\text{CO})_3$ and $(\eta^6\text{-benzene})\text{Cr}(\text{CO})_3$, linked by an amide bond to the aromatic part of platensimycin were synthesized and fully characterized spectroscopically. Their antibiotic activities were tested against *B. subtilis* (Gram positive) and *E. coli* (Gram negative) bacterial strains. Both compounds were found to be inactive against *E. coli* but the pentamethyl derivative in particular inhibits promising activity against *B. subtilis* growth. The compounds showed no marked cytotoxicity against mammalian cell lines. Furthermore, the cellular uptake and the intracellular distribution of the new compounds and $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3$ in *B. subtilis* were studied using atomic absorption spectroscopy to get a first insight to the possible cellular targets. The results described herein have led to a patent application and show the way to innovative metal-based antibiotics by rational design.

Anja Mudring

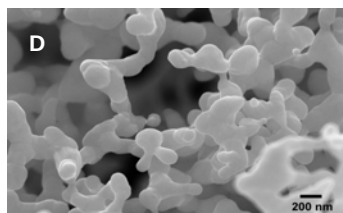
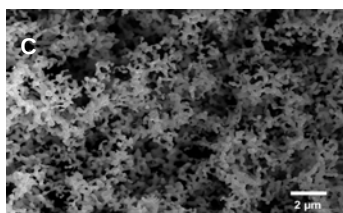
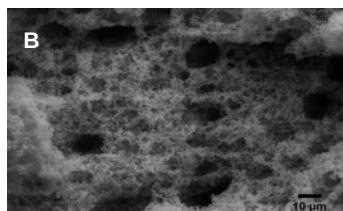
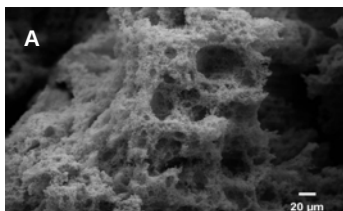
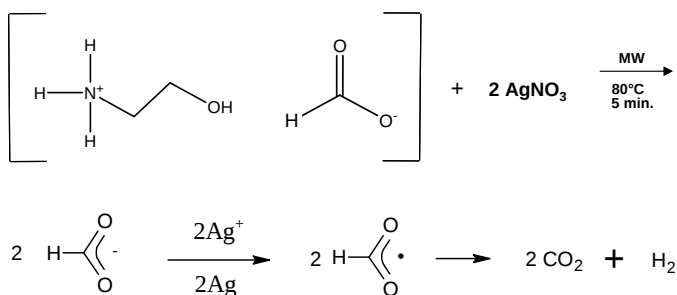
Lehrstuhl für Anorganische Chemie I – Festkörperchemie und Materialien;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: anja.mudring@rub.de; <http://www.anjamudring.de>

K. Richter, T. Bäcker, A.-V. Mudring, *Chem. Commun.* (2009) 301. Facile, environmentally friendly fabrication of porous silver monoliths using the ionic liquid N-(2-hydroxyethyl)ammonium formate.



Ionische Flüssigkeiten haben in den letzten Jahren große Aufmerksamkeit als “grüne Lösungsmittel” erhalten. Viele von ihnen haben nicht nur einen geringen Dampfdruck und Flammpunkt, was Risiken wie Lösungsmittelbrände minimiert, sondern sie können in der Tat eine geringe Toxizität aufweisen. Wir haben nun eine Aufgaben-spezifische Ionische Flüssigkeit entwickelt, die für die Umwelt als unbedenklich einzustufen ist. Sie kann zur Synthese eines makroporösen Silbernetzwerkes unter milden Reaktionsbedingungen in einer Pseudo-2-Komponenten-Reaktion eingesetzt werden: Erhitzen eines geeigneten Silber-Vorläufersalzes wie Silbernitrat in der Ionischen Flüssigkeit N-(2-Hydroxyethyl)-ammoniumformiat in der Mikrowelle für 5 Minuten bei 80°C führt in großer Ausbeute zum gewünschten Produkt. Der makroporöse Silberschwamm kann durch einfaches Waschen gesäubert werden. Im Gegensatz zu klassischen Hochtemperatursynthesen entfällt der Schritt der Kalzination.

Ionic liquids have received considerable attention as “green solvents” in the past few years. We have now developed a task-specific ionic liquid which allows for the synthesis of a macroporous silver framework under mild conditions using quick microwave synthesis. Herein, the ionic liquid, N-(2-hydroxyethyl)ammonium formate, is not only the reaction medium but acts also as the template and reducing agent. No additional substances are necessary. The synthesis requires only a reaction temperature as low as 80°C and leads to pure products. In order to obtain a neat mesoporous network only washing with ethanol is required but no high temperature calcination step.

Ulrich Schatzschneider

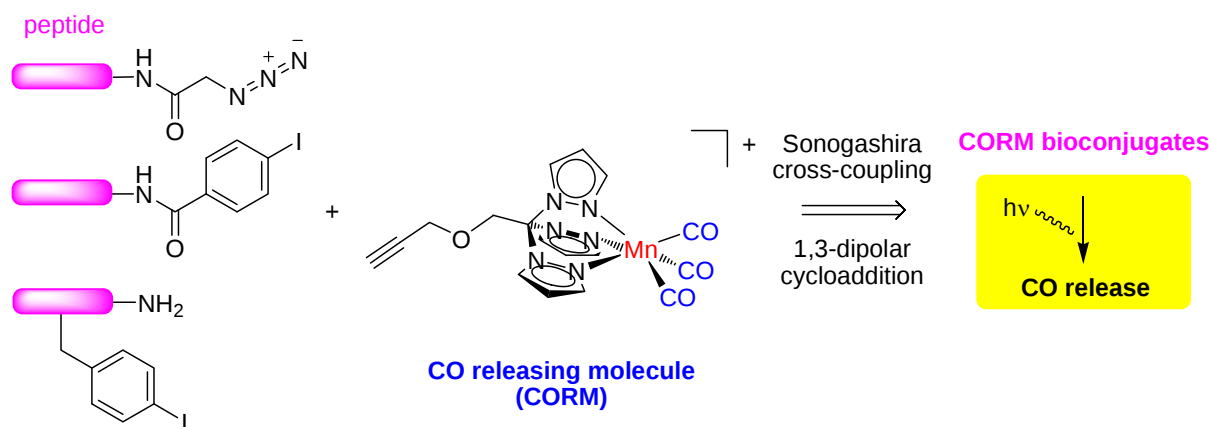
Anorganische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: ulrich.schatzschneider@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ac1/uli>

H. Pfeiffer, A. Rojas, J. Niesel, U. Schatzschneider, *Dalton Trans.* (2009) 4292-4298, als "Hot Article" ausgewählt. Sonogashira and "Click" reactions in the *N*-terminal and side chain functionalization of peptides with $[\text{Mn}(\text{CO})_3(\text{tpm})]^+$ -based CO releasing molecules (tpm = tris(pyrazolyl)methane)

Kohlenstoffmonoxid (CO) ist ein wichtiger niedermolekularer Botenstoff im menschlichen Körper. Für medizinische Anwendungen ist Kohlenstoffmonoxid selbst jedoch nicht geeignet, da es bei Überdosierung hochgradig toxisch und als Gas nur schwer zu handhaben ist. Seit einigen Jahren interessiert man sich daher für "feste Speicherformen" für Kohlenstoffmonoxid. Besonders geeignet als *CO releasing molecules* (CORMs) sind dabei Metallcarbonylkomplexe. Insbesondere durch die licht-induzierte Freisetzung von CO aus solchen Verbindungen lässt sich eine präzise zeitliche und räumliche Kontrolle seiner Wirkung erreichen. Wir haben Mangantricarbonyl-Komplexe mit funktionalisierten Tris(pyrazolyl)-methan(tpm)-Liganden als aussichtsreiche Leitstrukturen für photoaktivierbare CORMs identifiziert und an Carrier-Peptide angeknüpft um eine selektive Aufnahme in Tumorzellen zu erreichen. Da die tpm-Einheit unter den Bedingungen der Festphasen-Peptidsynthese (SPPS, *solid phase peptide synthesis*) nicht stabil ist wurde eine *post-labeling*-Strategie mit bioorthogonalen Reaktionen wie der Palladium-katalysierten Sonogashira-Kupplung und der Kupfer-katalysierten Azid-Alkin-Cycloaddition (CuAAC) verwendet um das CORM an die Peptide anzuknüpfen.



Carbon monoxide (CO) is an important small-molecule messenger in the human body. However, it is highly toxic when overdosed and difficult to handle as a gas. Thus, there is steadily growing interest in "solid storage forms" for carbon monoxide. Particularly suitable as CO releasing molecules (CORMs) are metal-carbonyl complexes. The light-induced liberation of CO from such otherwise dark-stable complexes will allow for a precise spatial and temporal control of its biological activity. We have identified manganese-tricarbonyl complexes with functionalized tris(pyrazolyl)methane (tpm) ligands as promising lead structures for photoactivatable CORMs and attached them to carrier peptides for selective uptake in tumor cells. Since the tpm moiety is not stable under the conditions of solid-phase peptide synthesis (SPPS), we used a post-labeling strategy based on bioorthogonal reactivity like the palladium-catalysed Sonogashira cross-coupling and copper-catalysed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) to couple the CORM to the peptide.

Michael Seitz

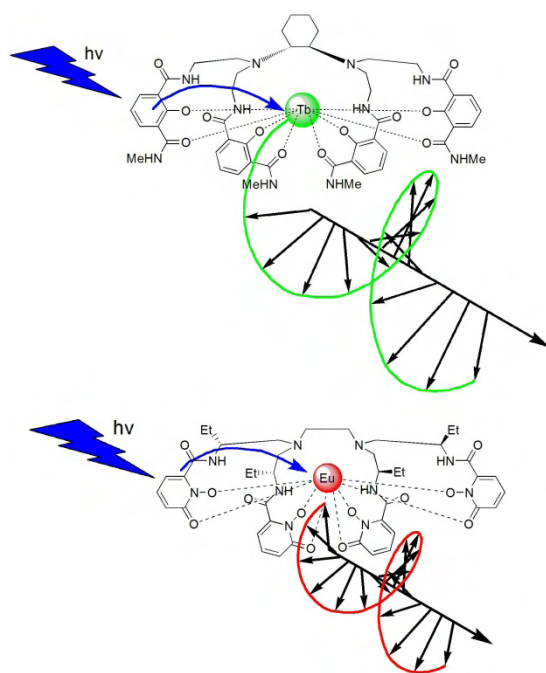
Anorganische Chemie I, Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224180; FAX: ++49-(0)234-3214378

email: michael.seitz@rub.de

<http://www.lanthanoid.org>

M. Seitz, K. Do, A. J. Ingram, E. G. Moore, G. Muller, K. N. Raymond, *Inorg. Chem.* **48** (2009), 8469-8479. Circularly Polarized Luminescence in Enantiopure Europium and Terbium Complexes with Modular, All-Oxygen Donor Ligands.



Circular-polarisierte Lumineszenz (CPL) ist das Emissionsanalogon zu Circular-Dichroismus (CD). Während CD-Spektroskopie breite Verwendung zur Untersuchung konformativer und konfigurationseller Veränderungen in biologischen Systemen gefunden hat, ist CPL in dieser Hinsicht bisher nur wenig entwickelt. CPL birgt jedoch enormes Potential aufgrund der Kombination der im allgemeinen sehr großen Empfindlichkeit von Lumineszenzmessungen mit der hohen Spezifität des CPL-Signals in Abhängigkeit von der jeweiligen Umgebung. Lanthanoiden-Lumineszenz mit ihren vorteilhaften Eigenschaften (große Stokes-Verschiebungen, lange Abklingzeiten, schmale Emissionsbanden) ist ein idealer Kandidat für die Verwirklichung von chiralen CPL-Sonden. Wir haben in diesem Zusammenhang mehrere neue, enantiomerenreine

Terbium- und Europiumkomplexe entwickelt, die ausgezeichnete Stabilität, moderate bis sehr hohe Quantenausbeuten ($\Phi_{\text{Eu}} = 0.05\text{-}0.08$ und $\Phi_{\text{Tb}} = 0.30\text{-}0.57$) und große CPL-Signale (Lumineszenz-Dissymmetriefaktoren $|g_{\text{lum}}|_{\text{max}} = 0.08\text{-}0.40$) in wässriger Lösung bei physiologischem pH-Werten zeigen. Diese Eigenschaften machen unsere neuen Lanthanoid-Komplexe vielversprechende Kandidaten für die Entwicklung praktisch-anwendbarer CPL-Sonden für biologisch-relevante Umgebungen.

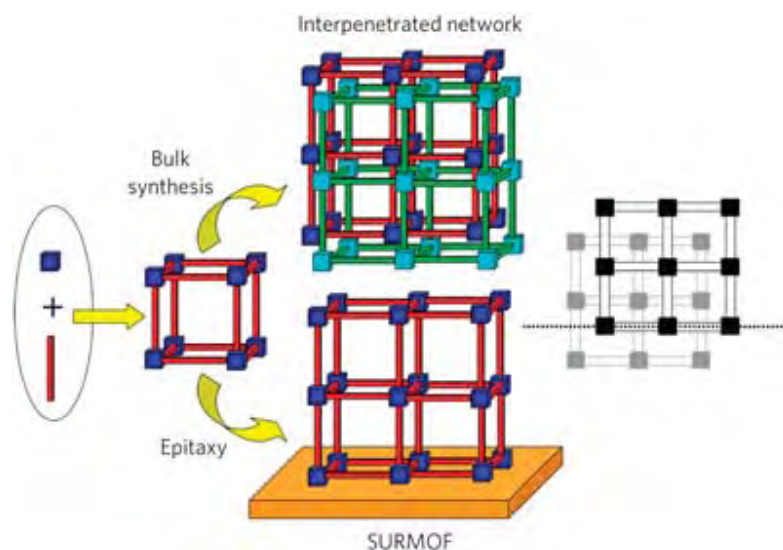
Circularly Polarized Luminescence (CPL) is the emission analogue of Circular Dichroism (CD). While CD spectroscopy has been widely used to investigate the configurational as well as conformational changes in biological systems, CPL also has great, albeit currently underdeveloped potential, due to the general sensitivity of luminescence measurements combined with the high specificity of the signal for the chiral environment. Lanthanoid luminescence with its advantageous characteristics (large Stokes shift, long lifetimes, narrow emission bands) is an ideal candidate for the realization of chiral CPL probes. We have developed new enantiomerically pure terbium and europium complexes, which exhibit excellent stability, moderate to very high luminescence efficiency (quantum yields $\Phi_{\text{Eu}} = 0.05\text{-}0.08$ and $\Phi_{\text{Tb}} = 0.30\text{-}0.57$) and high CPL signals (luminescence dissymmetry factors $|g_{\text{lum}}|_{\text{max}} = 0.08\text{-}0.40$) in aqueous solution at physiological pH. These properties make our new lanthanoid complexes promising candidates for the development of practical CPL probes in biologically relevant environments.

Roland A. Fischer

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

O. Shekhah, H. Wang, M. Paradinas, C. Ocal, B. Schüpbach, A. Terfort, D. Zacher, R. A. Fischer and C. Wöll. *Nature Materials* **8** (2009) 481-484. Controlling interpenetration in metal–organic frameworks by liquid-phase epitaxy“

Metall-organische Gerüste (MOFs) sind hoch poröse Materialien, die typischerweise aus zwei Bauelementen bestehen: anorganische Knoten werden durch oligotope organische Liganden vernetzt. Die so entstehenden Gerüststrukturen weisen enorme Hohlräume auf, die für die Speicherung von Gasen oder anderen funktionellen Molekülen, z.B. Pharmazeutika interessant sind. Die offenen Strukturen bergen aber ein grundsätzlichen Problem, nämlich die Bildung so genannter interpenetrierter Strukturen, indem ein topologisch identische Netzwerke ineinander gestellt vorliegen und der freie Raum somit drastisch reduziert werden kann. In unserer Arbeit zeigen wir, dass die Bildung eines solchen zweiten Netzwerkes durch das Verfahren der Flüssigphasenepitaxie bei der MOF Synthese unterdrückt werden kann. Durch stufenweisen Aufbau der Gerüststruktur aus den Einzel-komponenten auf einer als Templat wirkenden Oberfläche entstehen nicht interpenetrierte MOF Varianten, die mit üblichen solvothermalen Synthesen nicht zugänglich sind.



Metal–organic frameworks (MOFs) are highly porous materials generally consisting of two building elements: inorganic coupling units and organic linkers. These frameworks offer an enormous porosity, which can be used to store large amounts of gases and, as demonstrated in more recent applications makes these compounds suitable for drug release. The huge sizes of the pores inside MOFs, however, also give rise to a fundamental complication, namely the formation of sublattices occupying the same space. This interpenetration greatly reduces the pore size and thus the available space within the MOF structure. We demonstrate here that the formation of the second, interpenetrated framework can be suppressed by using liquid-phase epitaxy on an organic template. This success demonstrates the potential of the step-by-step method to synthesize new classes of MOFs not accessible by conventional solvothermal methods.

Anjana Devi

AG Chemie Anorganischer Materialien; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

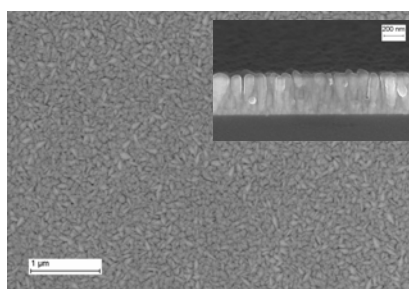
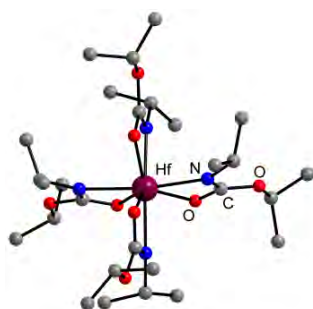
Tel.: ++49-(0)234-3224150; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: anjana.devi@rub.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/aci2>

R. Pothiraja, A. Milanov, D. Barreca, A. Gasparotto, H. W. Becker, M. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *Chem. Commun.* **15** (2009) 1978-80. Hafnium carbamates and ureates: new class of precursors for low-temperature growth of HfO₂ thin films

Neue Hafnium(IV) Carbamat- und Ureat-Komplexe (tetrakis--*N,O*-dialkylcarbamato hafnium(IV) [Hf(ⁱPrNC(O)OⁱPr)₄] (**1**) und tetrakis-*N,N,N'*-trialkylureato hafnium(IV) [Hf(ⁱPrNC(O)N(Me)Et)₄] (**2**)) wurden durch einfache und direkte Insertionsreaktionen in hohen Ausbeuten synthetisiert. Die erhaltenen Verbindungen, die sich durch eine vollständige Sättigung der Hf(IV)-Koordinationsphäre auszeichnen, weisen sowohl im festen Zustand wie auch in Lösung eine monomere Struktur auf. Kristalline HfO₂-Schichten wurden durch MOCVD von Verbindung **1** bei 250°C erhalten, wobei dies die niedrigste Abscheidungs-temperatur war, die je zu kristallinem Hafnium(IV)oxid durch CVD geführt hat. Bei 500°C zeigten die synthetisierten Schichten ein säulenartiges Kristallwachstum und eine (020)-Orientierung, während eine Dominanz der (200)-Reflexe bei 700°C beobachtet wurde. Bemerkenswert ist, dass die Proben von stöchiometrischer Zusammensetzung und frei von Verunreinigungen sind und sich somit faszinierende Perspektiven für technologische Anwendungen im großen Maßstab ergeben.



Molecular structure of [Hf(ⁱPrNC(O)OⁱPr)₄] (left) and SEM image of an HfO₂ film grown from **1** at 500 °C (right)

Novel hafnium(IV) carbamate and ureate complexes (tetrakis--*N,O*-dialkylcarbamato hafnium(IV) [Hf(ⁱPrNC(O)OⁱPr)₄] (**1**) and tetrakis-*N,N,N'*-trialkylureato hafnium(IV) [Hf(ⁱPrNC(O)N(Me)Et)₄] (**2**)) have been synthesized through simple and straightforward insertion reaction in high yields. The resulting compounds featured by a complete saturation of the Hf(IV) coordination sphere are monomeric both in the solid state and in solution. Crystalline HfO₂ thin films were obtained by MOCVD from compound **1** at 250 °C, the lowest deposition temperature ever adopted to obtain crystalline hafnium(IV) oxide through CVD. At 500 °C, the synthesized layers exhibited a columnar grain growth and a (020) texturing, while the predominance of the (200) reflection was observed at 700 °C. Remarkably, the samples are stoichiometric and contaminant-free, thus opening intriguing perspectives for large-scale technological applications.

Rochus Schmid

Lehrstuhl für Anorganische Chemie 2; AG Computational Materials Chemistry;

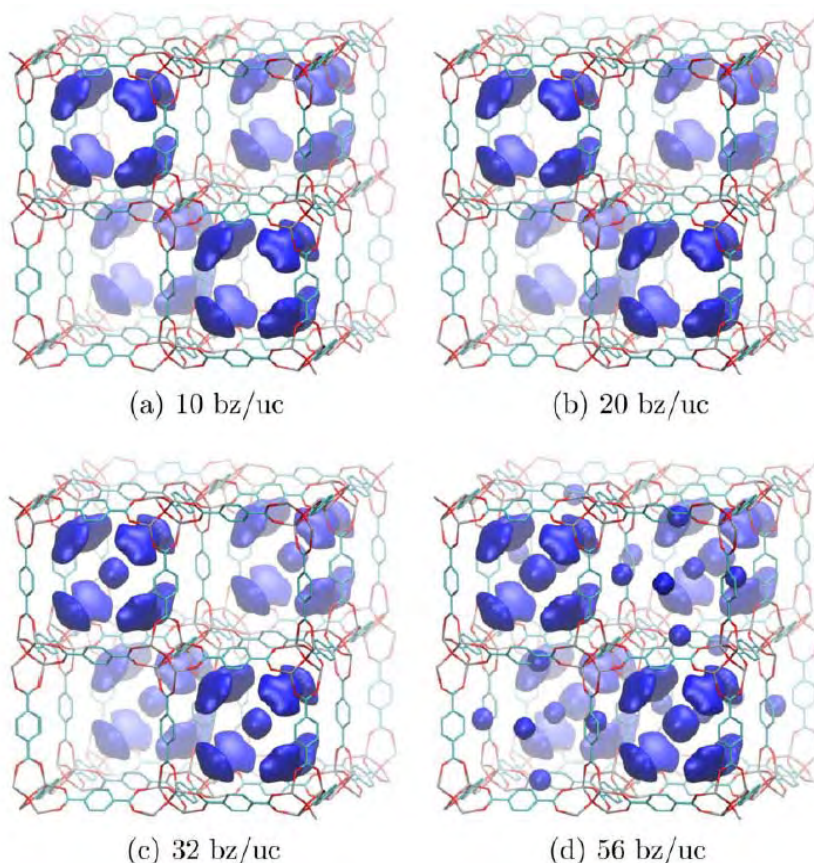
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224166; FAX: ++49-(0)234-3214174

email: Rochus.Schmid@ruhr-uni-bochum.de

<http://www.rochusschmid.de>

S. Amirjalayer, R. Schmid, *Micropor. Mesopor. Mater.* **125** (2009) 90-96. Mechanism of benzene diffusion in MOF-5: A molecular dynamics investigation



Metallorganische Netzwerke oder MOFs sind eine äußerst viel versprechende neue Substanzklasse poröser Materialien mit einer enormen inneren Oberfläche. In einer Vorgängerarbeit [*Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007), 463-466] konnten wir zeigen, dass sich die - für technische Anwendungen äußerst wichtige - Gast-Molekülmobilität im System Benzol in MOF-5 sehr gut mit einem von uns entwickelten Kraftfeldmodell berechnen lässt. Darauf aufbauend haben wir nun den molekularen Mechanismus der Diffusion in diesem System genauer untersucht. Anhand der

relativen freien Energie der Gastmoleküle in MOF-5 (in der Abbildung sind die Minima bis zu $\Delta G=5$ KJ/mol in Abhängigkeit von der Beladung gezeigt) lässt sich der Diffusionsweg genau verstehen. Durch die Metrik des Systems ergibt sich eine lokale Umgebung der Benzolmoleküle ähnlich der in flüssigem Benzol, was das Bild eines „festen Lösungsmittels“ dieser porösen Materialien stützt und die sehr hohen Diffusionskonstanten erklärt.

Metal-organic frameworks or MOFs are a very promising new class of porous materials with an enormous inner surface. In prior work [*Angew. Chem. Int. Ed.* **46** (2007), 463-466] we have shown that the technically most relevant guest molecule mobility can be accurately calculated with a force field model developed by us. Based on these results we have now investigated the molecular mechanism of diffusion in this system in great detail. With the relative free energy of the guest molecules in MOF-5 (in the figure minima up to $\Delta G=5$ KJ/mol are shown depending on the load) the diffusion path can be revealed. Because of the metric of the system, the local environment of the benzene molecules resembles that in liquid benzene, confirming the view that MOFs can be regarded as „solid solvents“ and explaining the high diffusion constants.

John McCaskill

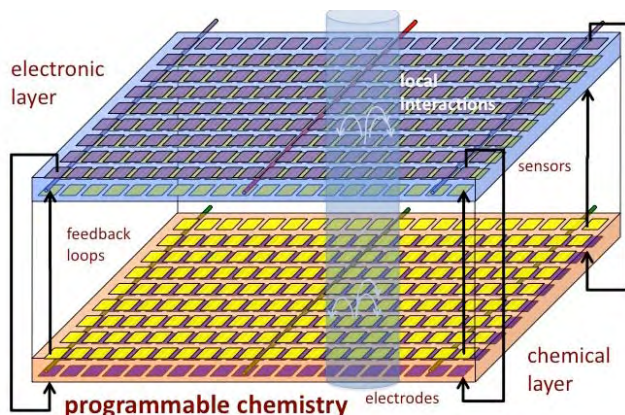
Microsystems Chemistry and Bio-IT (BioMIP); Ruhr-Universität Bochum; D-44780

Tel: ++49-(0)234-3227702; FAX: ++49-(0)234-3214047

email: John.McCaskill@ruhr-uni-bochum.de; <http://www.biomip.ruhr-uni-bochum.de/>

ECCell - Electronic Chemical Cell

an EU Collaborative Project (STREP) 2008-2011 (FP7-IST-FET-222422)



Ein Konsortium von 6 Partnern untersucht im EU-Projekt ECCell einen neuen Ansatz für adaptive „eingebettete“ Informationstechnologien der Zukunft auf molekularem Niveau durch die Realisierung erster elektronisch programmierbarer chemischer Zellen. Hier wird die Grundlage gelegt für eine kompartimentierte mikro- und nano-skalierbare molekulare Informationsverarbeitung mit einem Paradigmenwechsel hin zu digital programmierbaren chemischen Systemen.

Unter der Leitung von J.S. McCaskill entwickelt die Forschergruppe BioMIP programmierbare mikrochemische Architekturen zur Kopplung von Elektronik mit chemischen Reaktionen unter Verwendung von Sensor-Aktuator-Rückkopplungsschleifen mit hoher Bandbreite sowie Fluoreszenz-Spektroskopie und Mikroelektroden-Arrays. Weiterhin untersucht werden die *elektrokinetische* als auch die elektrochemische Regulierung chemischer Prozesse, einschließlich *elektrophoretischer* Konzentration und Trennung mittels Wanderwellen sowie neuartige, lokal geregelte pH Sprünge. Diese werden im Projekt von I. Willner (Hebrew Univ.) entwickelt. Abb.1 zeigt die elementare Architektur der elektronisch erweiterten Domäne der Chemie. Während Zellchemie autonom regelbar ist (mittels Optimierung proteinbasierter Signal-Netzwerke), benötigt eine erfolgreich evolvierte „ECCell“ einen optimierten lokalen elektronischen Kontroll-Schaltkreis, der lokale Fluoreszenz-Sensor-Daten auf ein spezielles Muster zur Elektrodenaktivierung überträgt und einen selbstreplizierenden chemischen Zellzyklus in Gang setzt. Die dazu erforderliche Replikationschemie wird unter der Leitung von G. von Kiedrowski entwickelt.

In ECCell, a consortium of 6 partners are investigating a novel basis for future adaptive embedded information technology at the molecular level by constructing the first electronically programmable chemical cells. This will lay the foundation for immersed micro- and nanoscale molecular information processing with a paradigm shift to digitally programmable chemical systems. The BioMIP research group led by McCaskill is developing programmable microchemistry architectures that integrate electronics with chemical reactions via high bandwidth sensory-actuator feedback loops involving fluorescence spectroscopy and micro-electrode arrays. Both *electrokinetic* and electrochemical regulation of chemical processes are being explored, including traveling wave *electrophoretic* concentration and separation and a novel locally tunable pH control mechanism developed in the project by I. Willner (Hebrew University). The figure shows the basic architecture of this electronically extended chemical domain. Whereas cellular chemistry is regulated autonomously, by optimized protein-based signaling networks, a successfully evolved ECCell will involve an optimized local electronic control circuit mapping local fluorescence sensor data to electrode activation patterns to implement a self-replicating chemical cell cycle. Replication chemistry for this project, involving redox-sensitive backbone linkages, is being developed under the leadership of G. von Kiedrowski.

Chiara Cabrele

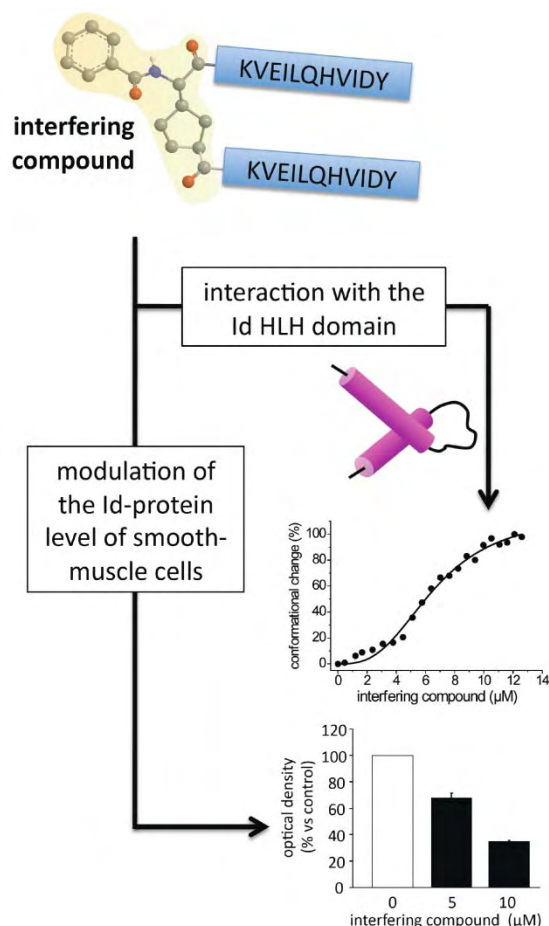
Organische Chemie I; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: chiara.cabrele@rub.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc1/cabrele>

S. Pellegrino, N. Ferri, N. Colombo, E. Cremona, A. Corsini, R. Fanelli, M. L. Gelmi, C. Cabrele, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **19** (2009) 6298-6302. Synthetic peptides containing a conserved sequence motif of the Id protein family modulate vascular smooth muscle cell phenotype.



Gefäßkrankheiten sind durch einen hoch proliferativen Phänotyp der glatten Muskelzellen (SMC) charakterisiert. Weiterhin ist α -Actin, ein Marker für SMC Differenzierung, herunterreguliert. Die Mechanismen, die der Entwicklung eines solchen Phänotyps unterliegen, schließen eine veränderte Aktivierung der DNA Transkription durch die HLH Proteine ein. Insbesondere inhibieren die Id HLH Proteine die E HLH Proteine, die die Expression von α -Actin positiv modulieren. Außerdem führt die Überexprimierung der Id Proteine zu erhöhter SMC Proliferation. In dieser Arbeit präsentieren wir Peptid-basierte Moleküle, die mit der synthetischen Id HLH Dimerisierungsdomäne wechselwirken und dadurch unterschiedliche Ereignisse im oben beschriebenen menschlichen SMC Phänotyp auslösen: in der Tat vermindern sie die Proliferation und Migration, während sie die Differenzierung stimulieren, wie durch die Zunahme an α -Actin gezeigt wurde. Die biologische Wirkung dieser Moleküle ist auf die induzierte Herunterregulierung der Id Proteine zurückzuführen.

Vascular diseases are characterized by a highly proliferative and migrating phenotype of smooth muscle cells (SMCs). Moreover, expression of α -actin, a marker of SMC differentiation, is downregulated. The mechanisms underlying the development of such phenotype involve altered DNA transcriptional activation by the helix-loop-helix (HLH) protein family. In particular, the Id HLH proteins inhibit the E HLH proteins that positively modulate α -actin. In addition, Id protein overexpression leads to significant increase in SMC proliferation. Therefore, targeting the Id proteins represents a strategy for controlling SMC proliferation and differentiation and for restoring a healthy contractile phenotype after vascular disorders. In this work we present peptide-based compounds that interact with the synthetic Id HLH dimerization domain and modulate multiple events in the human SMC phenotype described above: indeed, they decrease proliferation and migration, while stimulating differentiation, as indicated by an increase in α -actin levels. All these cell responses upon treatment with low-micromolar concentrations of the compounds are proposed to be correlated with a consistent downregulation of the Id proteins.

Wolfram Sander

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

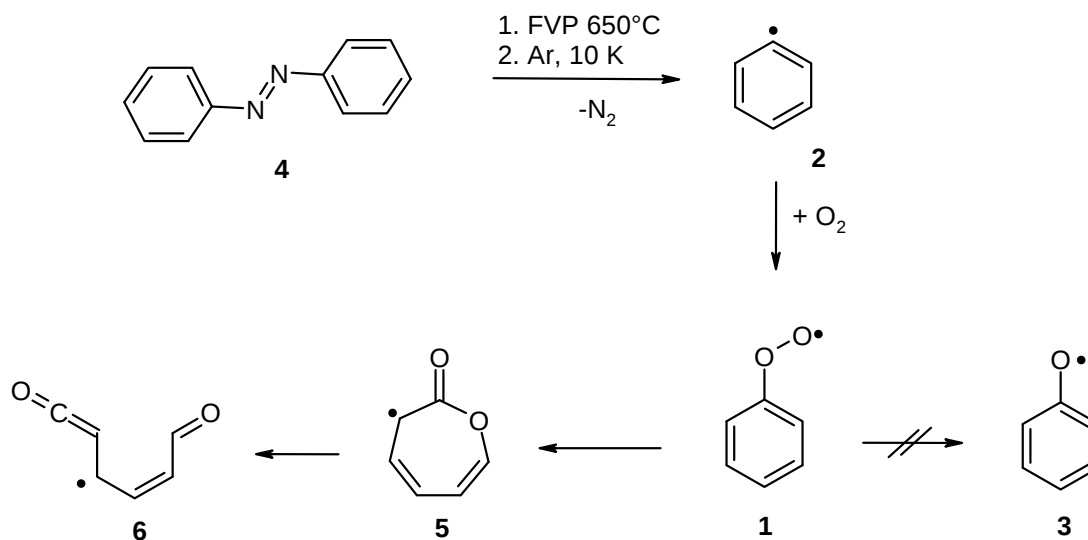
Tel: +49 234 3224593, FAX +49 234 3214353

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

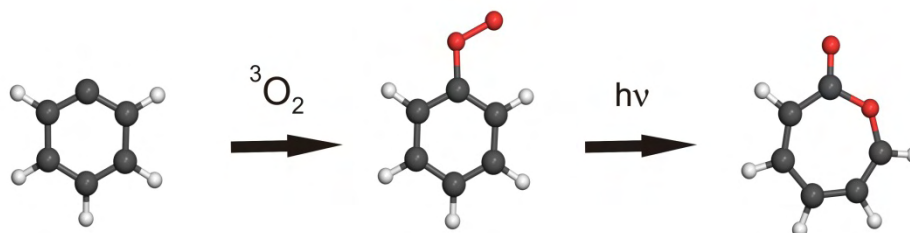
http://www.ruhr-uni-bochum.de/oc2

A. Mardyukov, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **15** (2009), 1462 - 1467. Matrix isolation and spectroscopic characterization of the phenylperoxy radical and its rearranged products

Phenylperoxy radical **1** is the primary product of the reaction of the phenyl radical **2** with molecular oxygen. This reaction is considered to be of key importance in the combustion of aromatic hydrocarbons and in the degradation of benzene in the troposphere. The phenylperoxy radical **1** has been synthesized by the reaction of the phenyl radical **2** with oxygen ($^3\text{O}_2$). Radical **1** could be either generated in the gas phase and subsequently trapped in solid argon at 10 K or directly synthesized in argon matrices.



By reacting **2** as well as its perdeuterated isotopomer $\text{d}_5\text{-2}$ with $^{16}\text{O}_2$ and with $^{18}\text{O}_2$, respectively, the four isotopomers $\text{h}_5\text{-}^{16}\text{O}_2\text{-1}$, $\text{d}_5\text{-}^{16}\text{O}_2\text{-1}$, $\text{h}_5\text{-}^{18}\text{O}_2\text{-1}$, and $\text{d}_5\text{-}^{18}\text{O}_2\text{-1}$ were matrix-isolated and characterized by IR spectroscopy. The experimental IR spectra are in excellent agreement with results from DFT calculations. Irradiation of **1** with visible light produces the 2-oxepinoxy radical **5** in a clean reaction. Subsequent irradiation results in ring-opening and formation of several conformers of ketoketene **6**. The radicals **1**, **5**, and **6** play an important role in the combustion of aromatic hydrocarbons and could now be isolated and spectroscopically characterized for the first time.



Gerald Dyker

Organische Chemie - Organische Synthese und Katalyse; Ruhr-Universität Bochum;

D-44780 Bochum

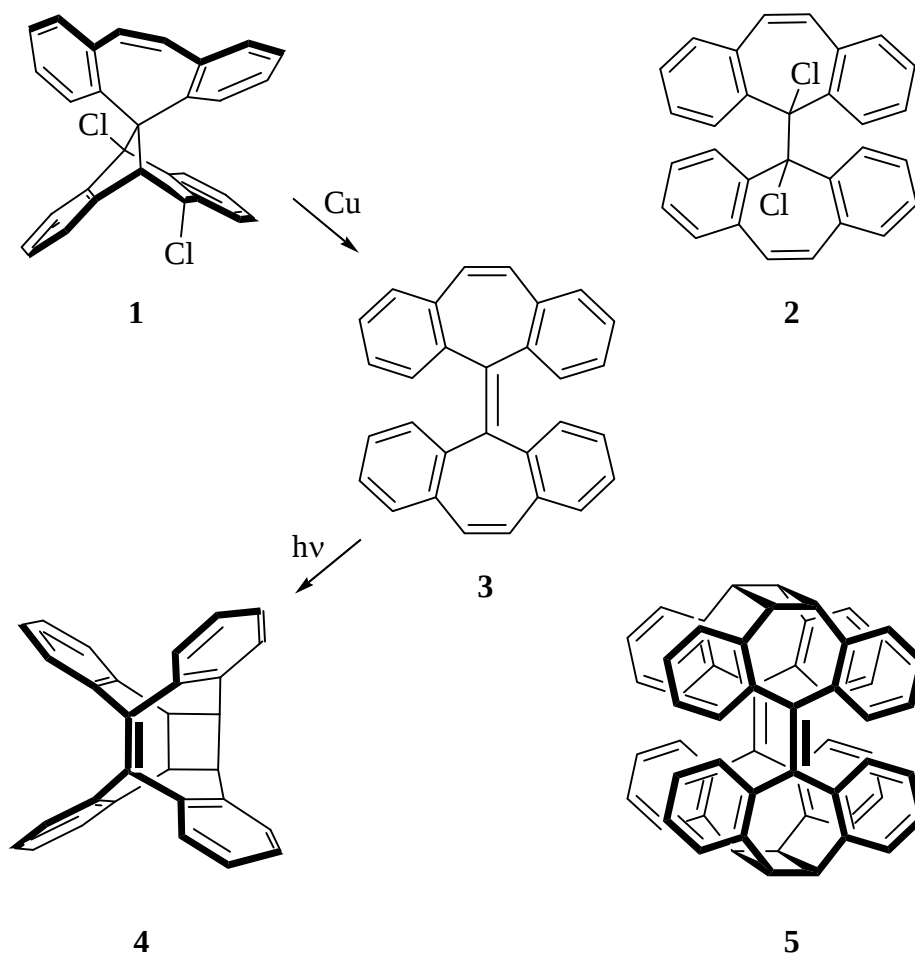
Tel.: ++49-(0)234-3224551; FAX: ++49-(0)234-3214353

email: Gerald.Dyker@rub.de

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

M. Pillekamp, W. Alachraf, I. M. Oppel, G. Dyker, *J. Org. Chem.* **74** (2009), 8355-8358.
Cage Hydrocarbons Derived from Dibenzosuberone.

Unsere Überprüfung von Synthese und Photochemie des Kohlenwasserstoffs **3** konnte nachweisen, dass die vor 40 Jahren publizierten Strukturen eines Photodimeren **5** und des vermeintlichen Intermediats **2** inkorrekt sind. Unsere Kristallstrukturanalysen ergaben stattdessen eindeutig das spirocyclische Dichlorid **1** and monomere pyramidalisierte Alken **4**.



Our reinvestigation of synthesis and photochemistry of hydrocarbon **3** revealed an incorrect structure of photodimer **5**, as well as of the putatively isolated intermediate **2**, reported in literature forty years ago. These products have to be reassigned as spirocyclic dichloride **1** and monomeric pyramidalized alkene **4**, respectively.

Christian Herrmann

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

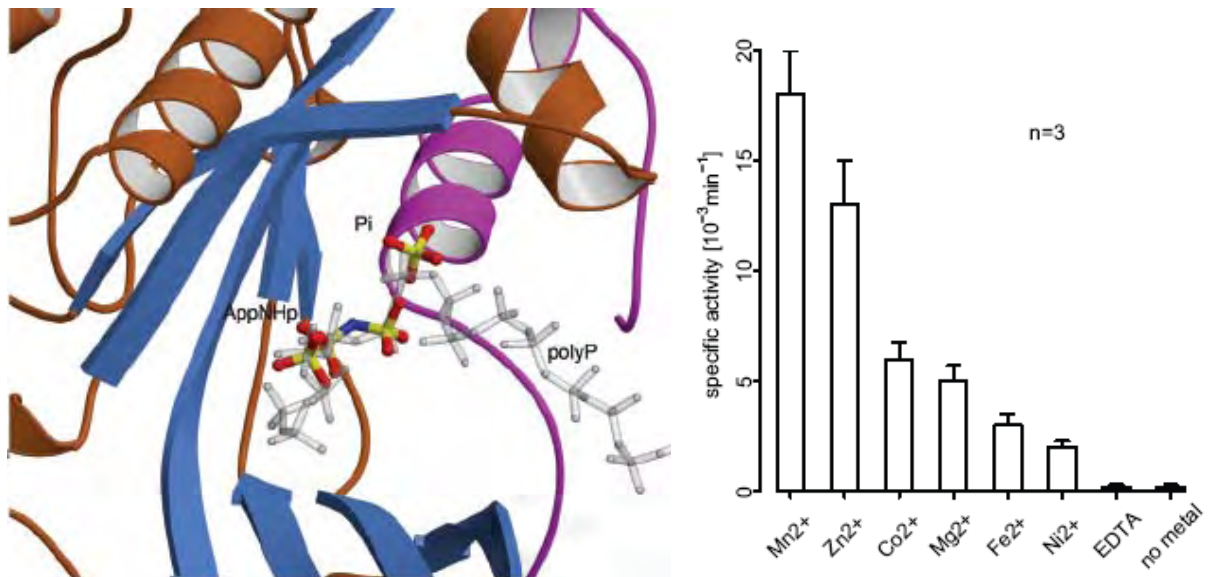
Tel.: ++49-(0)234-3224173; FAX: ++49-(0)234-3214785

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

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

M. Hothorn, H. Neumann, E. D. Lenherr, M. Wehner, V. Rybin, P. O. Hassa, A. Uttenweiler, M. Reinhardt, A. Schmidt, J. Seiler, A. G. Ladurner, C. Herrmann, K. Scheffzek, and A. Mayer, *Science* **324** (2009) 513-516. Catalytic core of a membrane-associated eukaryotic polyphosphate polymerase.

Polyphosphatketten spielen in vielen Lebewesen eine wichtige physiologische Rolle, z. B. um auch unter Mangelbedingungen Zellwachstum zu gewährleisten; allerdings ist über ihre Entstehung und Funktionsweise bisher wenig bekannt. Zusammen mit Forschern vom EMBL in Heidelberg und der Universität Lausanne ist es gelungen, grundlegende Erkenntnisse über den Herstellungsmechanismus von Polyphosphatketten zu gewinnen. Es wurde die erste Röntgenstruktur des für den Bau verantwortlichen Enzyms aus höher entwickelten Lebewesen (Eukaryonten) bestimmt und wesentliche biochemische Abläufe charakterisiert. Aufgrund der Ergebnisse können die katalytischen Prozesse auf molekularer Ebene genau beschrieben werden. Damit ist die Grundlage für weitere, gezielte Forschungsaktivitäten zur Rolle von Polyphosphaten geschaffen. Die Abbildungen zeigen ein Detail aus dem katalytischen Zentrum und den Einfluss von Metallionen auf die enzymatische Aktivität.



Pro- and eukaryotic organisms store phosphate in linear polymers (polyP). We used X-ray crystallography to characterize a eukaryotic polyphosphate polymerase within the membrane-integral vacuolar transporter chaperone complex (VTC). Crystals of the catalytic domain grown in the presence of ATP reveal a phosphate polymer winding through a tunnel-shaped pocket. The polymerase utilizes the metal assisted cleavage of the ATP γ -phosphate, which is in-line transferred to an acceptor phosphate giving rise to linear polyP chains. Mutational analysis of the transmembrane domain indicates that VTC may integrate cytoplasmic polymer synthesis with polyP membrane translocation. Thus, VTC converts cytosolic ATP into polyP that may be sequestered into organelles for storage or secreted e.g. as a transport nutrient in mycorrhizal symbioses between fungi and plants.

Martina Havenith-Newen

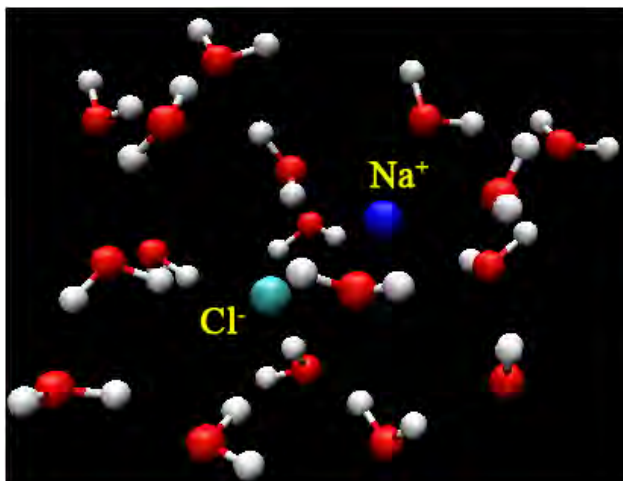
PC II, Laserspektroskopie und Biophotonik; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: martina.havenith@rub.de

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

D.A. Schmidt, Ö. Birer, S. Funkner, B.P. Born, R. Gnanasekaran, G.W. Schwaab, D. Leitner, M. Havenith, *JACS* **131** (2009) 18512-18517. Rattling in the cage: ions as probes of sub-ps water network dynamics



Wasser ist aufgrund seiner überragenden Wichtigkeit für eine Vielzahl fundamentaler Prozesse Gegenstand vielfältiger experimenteller und theoretischer Studien. Eine offene Frage ist die Fähigkeit eines gelösten Stoffes, die Eigenschaften von Wasser jenseits seiner ersten Solvathülle zu beeinflussen. Kosmotrope Substanzen verstärken die Wasserstruktur, chaotrope schwächen sie. Ein wichtiges Maß für die Fähigkeit eines gelösten Stoffes, die Wasserstruktur zu beeinflussen, ist die mittlere Zahl von Wasserstoffbrückenbindungen pro Wassermolekül. Experimentell sollte dies als

Absorptionsänderung im Terahertzbereich (THz, 10^{12} Hz) sichtbar sein. In einer umfassenden Studie wurden die konzentrationsabhängigen Absorptionskoeffizienten der wässrigen Lösungen von 15 Alkalihalidsalzen bei 85 cm^{-1} (2.5 THz) präzise vermessen. Zudem wurden Fouriertransformspektren von sechs Alkalihaliden im Frequenzbereich $30 - 300\text{ cm}^{-1}$ aufgezeichnet. Für alle Lösungen kann die THz-Absorption unterhalb von 200 cm^{-1} als Linearkombination der Wasserabsorption und der Oszillation der Ionen im umgebenden Wasserkäfig beschrieben werden. Die Ionen können somit als einfache Punktdefekte im Wassernetzwerk betrachtet werden und besitzen daher weder chaotrope noch kosmotrope Eigenschaften. Unsere Resultate zeigen, dass THz-Spektroskopie eine empfindliche Nachweismethode darstellt, um den Einfluss der Anionen und Kationen auf die Wasserstruktur zu bestimmen.

An open question concerning water is the ability of a solute to change the water structure beyond its hydration shell. Kosmotropes enhance the water structure, while chaotropes reduce the solvent order. One important measure to describe the change in water structure is the average number of hydrogen bonds per water molecule. Experimentally, this should show up as a change in the spectral response in the terahertz (THz, 10^{12} Hz) regime. We have carried out precise measurements of the concentration dependent THz absorption coefficient of 15 solvated alkali halide salts around 85 cm^{-1} (2.5 THz). In addition, we recorded overview spectra between 30 and 300 cm^{-1} using a THz Fourier transform spectrometer for six alkali halides. Below 200 cm^{-1} , for all salt solutions the THz absorption can be described by a linear superposition of the water absorption and an additional absorption that is attributed to a rattling motion of the ions within the water network. These results suggest that the ions may be treated as simple defects in an H-bond network. They therefore cannot be characterized as either kosmotropes or chaotropes. Our results show that THz spectroscopy is a powerful experimental tool to establish a new view on the contributions of anions and cations to the structuring of water.

Hermann Weingärtner

Physikalische Chemie II - Physikalische Chemie der Flüssigkeiten;

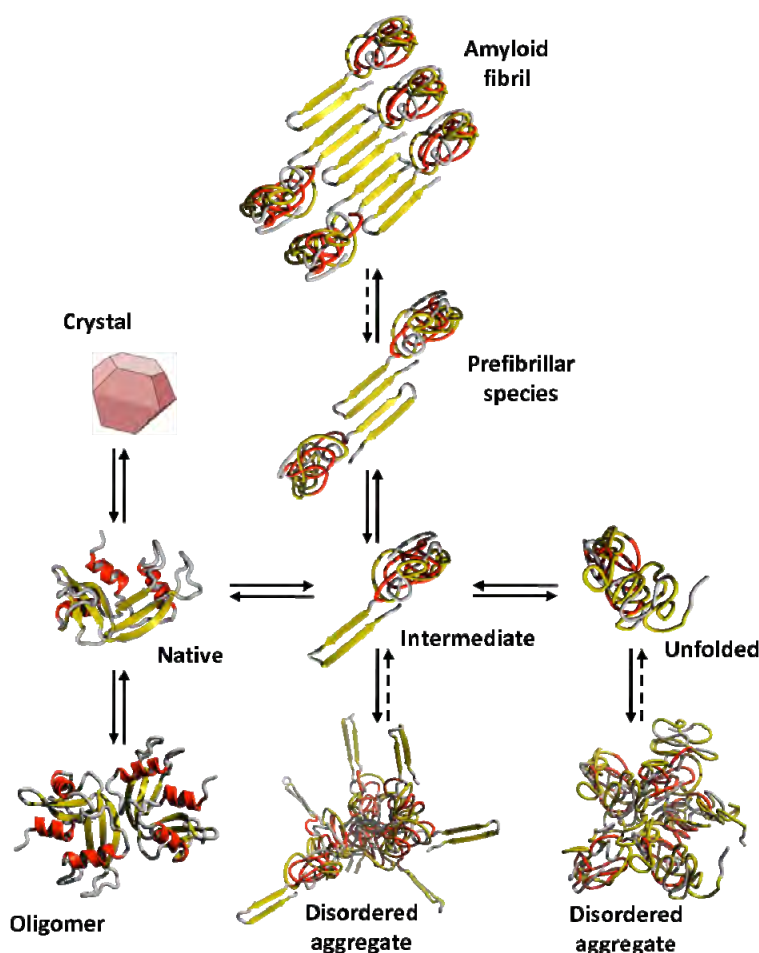
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: hermann.weingaertner@rub.de

Lehrstuhl für Physikalische Chemie II

D. Constantinescu, C. Hermann, H. Weingärtner, In: *Ionic Liquids. From Knowledge to Application*. Ed.: Rogers, R.D.; Plechkova, N.V.; Seddon, K.S. ACS Symposium Series, American Chemical Society (2009) 107-117. Protein Denaturation by Ionic Liquids and the Hofmeister Series



Ionische Flüssigkeiten – organische Salze, die in der Nähe der Raumtemperatur flüssig sind – besitzen ungewöhnliche Lösungseigenschaften, die seit einiger Zeit auch bei biochemischen Fragestellungen Anwendung finden. Durch Differential Scanning Calorimetry konnte von uns gezeigt werden, wie ionische Flüssigkeiten als Cosolventien die thermische Stabilität von Proteinen beeinflussen, Proteinaggregation unterdrücken und die Bildung von Faltungsintermediaten steuern. Je nach Wahl der Kationen und Anionen können protein-stabilisierende oder protein-denaturierende Effekte erzielt werden. Die Ioneneffekte lassen sich durch universelle (protein-unabhängige) Anionen- und Kationenreihen beschreiben, die der bekannten Hofmeisterreihe entsprechen.

Ionic liquids – organic salts which are liquid near room temperature – possess unusual solvent properties, which are increasingly exploited in biochemical processes. Using differential scanning calorimetry, we could show how addition of ionic liquids as cosolvents affects the thermal stability of proteins, suppresses protein aggregation and steers the formation of folding intermediates. Variation of cations and anions can result in stabilization or denaturation of proteins. The effects of the ions can be ranked in universal cation and anion series which do not depend on the protein and correspond to the well-known Hofmeister ion series.

William. S. Sheldrick

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

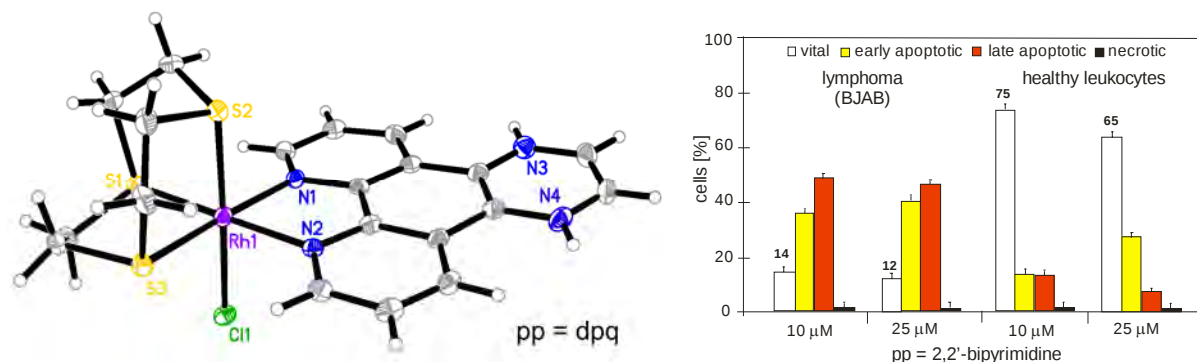
Tel: +49(0)234-3224192; Fax: +49-(0)234-3214420

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

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

R. Bieda, I. Ott, M. Dobroschke, A. Prokop, R. Gust, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 698 - 708. Structure-activity relationships and DNA binding properties of apoptosis-inducing cytotoxic rhodium(III) polypyridyl complexes containing the cyclic thioether [9]aneS₃.

Obwohl eine signifikante Aktivität für verschiedene Rhodiumkomplexe festgestellt worden ist, wurde ihre Verwendung als Antitumor-Mittel durch zu hohe toxische Nebenwirkungen verhindert. Wir konnten nun feststellen, dass neuartige Halbsandwich-Komplexe, die eine faciale Koordination des Rhodium(III)-Atoms durch das Kronenether 1,4,7-Trithiacyclononane ([9]aneS₃) aufweisen, eine vielversprechende Klasse von cytostatischen Substanzen darstellen. Sie induzieren Apoptose in Tumorzellen, bewirken aber kaum Nekrose. Die aktivsten Verbindungen enthalten die sehr unterschiedlichen Polypyridyl-Liganden 2,2'-Bipyrimidin und dppz und weisen eine hohe Selektivität für maligne Lymphoma-Zellen im Vergleich zu gesunden Leukocyten auf. DNA-Bindungsstudien und Struktur-Wirkungsbeziehungen deuten auf unterschiedliche Wirkmechanismen in Abhängigkeit von der Größe und Donoreigenschaften des Polypyridyl-Liganden (pp) hin.



Although different types of rhodium complexes have been shown to demonstrate significant anticancer activity, their further exploitation has been prevented by toxic side-effects. We have now established that novel half-sandwich rhodium(III) complexes with the metal atom capped by the facial crown thioether 1,4,7-trithiacyclononane ([9]aneS₃) represent a promising class of cell-selective apoptosis-inducing agents. Necrotic damage caused by the complexes is negligible. The most active compounds contain the contrasting polypyridyl ligands 2,2'-bipyrimidine and dppz, and exhibit a high degree of cell selectivity for malignant lymphoma cells in comparison to healthy leukocytes. DNA binding studies and structure-activity relationships suggest that differing mechanisms of action must be involved depending on the size and donor properties of the polypyridyl ligand.

Wolfgang Schuhmann

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

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

email: wolfgang.schuhmann@rub.de

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

S. Schwamborn, L. Stoica, S. Neugebauer, T. Reda, H.-L. Schmidt, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **10** (2009) 1066-1070. Local modulation of the redox state of *p*-nitrothiophenol self-assembled monolayers using the direct mode of scanning electrochemical microscopy



Die lokale Reduktion der terminierenden Nitrogruppen einer selbstassemblierenden Monoschicht (SAM) aus *p*-Nitrothiophenol wird mittels des Direktmodus des elektrochemischen Rastermikroskopes ausgelöst und führt zur Bildung von entweder Hydroxylamin- oder Aminogruppen. Durch Wahl eines geeigneten Potentials und einer geeigneten Pulssequenz erfolgt die Reduktion zu der erwünschten Oxidationsstufe der Endgruppen des SAMs, wobei der Ort der Reduktion lokal auf den Bereich unterhalb des positionierten SECM-Tips begrenzt ist. Nachfolgend zu diesem „Schreiben“ von Redoxmikrostrukturen im SAM kann die lokale Modifikation des Redoxzustandes mit Hilfe des Feedbackmodus des SECM visualisiert werden („Lesen“). Dabei ist der Strom an der Mikroelektrode von der Elektronentransfer rate für die Reoxidation eines Redoxmediators an der Probenoberfläche bestimmt. Um die erfolgreiche lokale Redoxmodifikation eindeutig zu bestätigen, wurde die mikrostrukturierte Oberfläche selektiv an den Orten der lokalen

Reduktion der Endgruppen mit Biotin modifiziert. Die komplementäre Bindung eines Avidin/Enzym Konjugates erlaubt die Visualisierung der Mikrostruktur mittels des Generator-Kollektor-Modus des SECM.

Local reduction of the terminating nitro groups of a *p*-nitrothiophenol self-assembled monolayer (SAM) under formation of either hydroxylamine or amino groups is invoked using the direct mode of scanning electrochemical microscopy (SECM). By choosing the appropriate potential and a potential pulse sequence, the reduction of the SAM end groups to the desired oxidation state can be achieved, locally restricted to the area of the sample surface directly underneath the positioned SECM tip. Following the “writing” of redox microstructures within the SAM end groups, the local modification of the redox states is visualized (“reading”) by using the feedback mode of SECM. To further unequivocally prove the successful local modification of the redox state of the SAM end groups during the writing process, the micropatterned surface is selectively modified with biotin at areas with reduced SAM end groups for further complementary binding of an avidin–enzyme conjugate. Selective post-functionalization with an avidin–alkaline phosphatase conjugate allows visualization of the microstructure using the generator–collector mode of SECM.

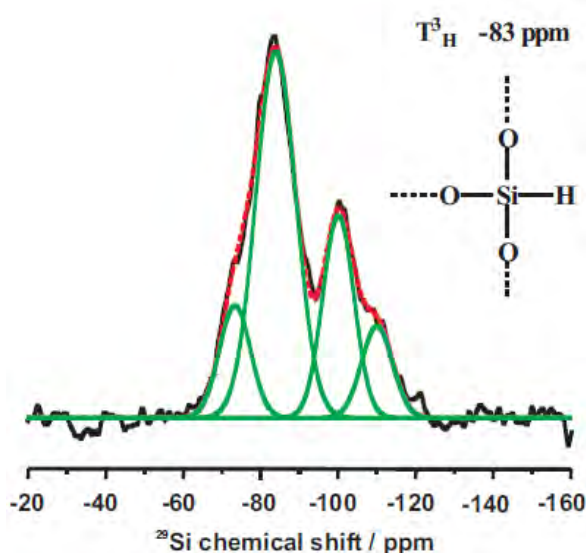
Nicolas Plumeré

Center for Electrochemical Sciences (CES); Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3225464

email: nicolas.plumere@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces/index.html>

N. Plumeré, B. Speiser, H. A. Mayer, D. Joosten and L. Wesemann, *Chemistry - A European Journal* **15** (2009) 936-946. High-temperature chlorination-reduction sequence for the preparation of silicon hydride modified silica surfaces.



An alternative to Si-OH: A general and straightforward synthetic route to a fully dehydroxylated and impurity-free silicon hydride (Si-H) modified silica surface is described. The silica surface is reduced in a two-step chlorination-reduction procedure within a simple gas-flow system at high temperatures. After initial dehydroxylation of the silica surface, silicon chloride groups are formed by the reaction with thionyl chloride. The chlorination activates otherwise inaccessible surface siloxane moieties. A high Si-H surface concentration results from the subsequent reduction of the chlorinated surface with hydrogen. The surface of the resulting materials is characterized by diffuse reflectance IR Fourier transform and

^{29}Si CP/MAS-NMR spectroscopy. The silicon-hydride groups are mostly of the T^3_{H} -type. The use of high temperatures results in the condensation of internal and surface silanol groups. Materials with both a fully condensed silica matrix as well as a surface only terminated with Si-H groups are obtained. Therefore, this reaction sequence represents an ideal strategy to provide the starting material for further molecular silica surface modification. The attachment of ferrocene derivatives on nanosized silica particles based on the Si-H groups is given as an example.

Eine Alternative zu Si-OH: Es wurde eine allgemeine und einfache Synthesestrategie für eine vollständig dehydroxylierte und verunreinigungsfreie Siliziumhydrid (Si-H)-modifizierte Quarzoberfläche beschrieben. Die Quarzoberfläche wird in einem zweistufigen Verfahren, einer Chlorierung und Reduktion, in einem einfachen Gasflusssystem bei hohen Temperaturen reduziert. Nach der initialen Dehydroxylierung der Quarzoberfläche, werden Siliziumchloridgruppen durch Reaktion mit Thionylchlorid gebildet. Die Chlorierung aktiviert sonst unzugängliche Siloxane an der Oberfläche. Eine hohe Konzentration von Si-H an der Oberfläche resultiert aus der nachfolgenden Reduktion der chloridierten Oberfläche mit Wasserstoff. Die Oberfläche des erhaltenen Materials wird durch diffuse Reflektions-FTIR und ^{29}Si CP/MAS-NMR Spektroskopie charakterisiert. Die Siliziumhydridgruppen sind meist vom T^3_{H} -Typ. Die Nutzung von hohen Temperaturen führt zur Kondensation von internen und Oberflächen-Silanolgruppen. Es wurden Materialien sowohl mit vollständig kondensierter Siliziummatrix als auch mit nur oberflächenterminierten Si-H-Gruppen erhalten. Daher stellt diese Reaktionssequenz eine ideale Strategie dar, um ein definiertes Ausgangsmaterial für nachfolgende molekulare Modifikationen von Siliziumoberflächen herzustellen. Als Beispiel wurde gezeigt, dass Ferrocenderivate auf Nanosiliziumpartikeln, die auf Si-H-Gruppen basieren, gebunden werden konnten.

Fabio La Mantia

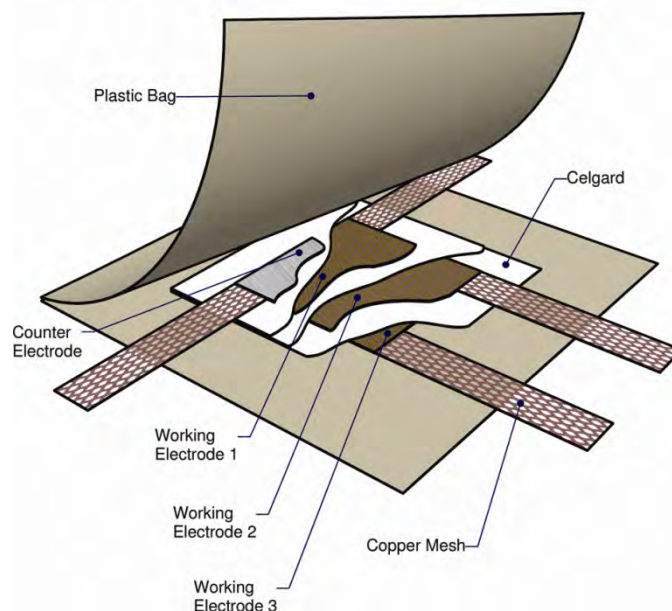
Center for Electrochemical Sciences (CES); Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224196;

email: fabio.lamantia@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/ces/index.html>

S.H. Ng, F. La Mantia, P. Novák, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009) 528-532. A multiple-working-electrode electrochemical cell: a novel tool for current density distribution study

The multiple-working-electrode (MWE) electrochemical cell (see image) is a unique and novel tool for the quantitative study of the perpendicular current density distribution (CDD) in porous electrode. The multiple-working-electrode cell was applied to the study of the CDD in graphite anodes for Li-ion batteries. The results have highlighted that inhomogeneities in the CDD rise in the region of intercalation of Li^+ in graphite even at low C-rates (C/37). The resulting charge density distribution (QDD) shows inhomogeneities up to 8%, thus lowering the total effectiveness of the graphite electrode. It was also observed that inhomogeneities between the different layers of the multiple-working-electrode cell are not recovered after an equilibration step of 10 h is imposed.



Die auf multiple Arbeitselektroden (multiple-working electrode, MWE) basierende elektrochemische Zelle (s. Abbildung) ist ein einzigartiges und neuartiges Werkzeug für die quantitative Untersuchung von zueinander senkrechten Stromdichteverteilungen (CDD) in porösen Elektroden. Die MWE-Zelle wurde für eine Studie der CDD bei Graphitanoden für Li-Ionenbatterien verwendet. Die Ergebnisse zeigten, dass Ungleichmäßigkeiten in der CDD in den Bereichen ansteigen, in denen Li^+ in die Graphitschichten interkaliert (sogar bei geringem C-Gehalt, C/37). Die resultierende Ladungsdichteverteilung (QDD) zeigt Ungleichmäßigkeiten von bis zu 8%. Dies bedeutet eine Verringerung des totalen Wirkungsgrades der Graphitelektrode. Es wurde außerdem beobachtet, dass die Ungleichmäßigkeiten zwischen den verschiedenen Lagen der MWE-Zelle nicht nach einem Äquilibrationsschritt von 10 h wiederhergestellt werden konnten.

Alexander Bondarenko

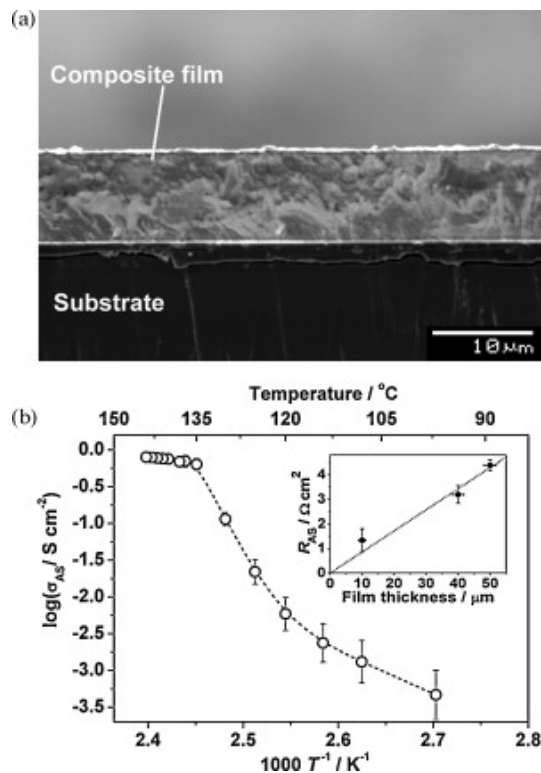
(Aliaksandr Bandarenka)

Center for Electrochemical Sciences (CES); Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224196

email: aliaksandr.bandarenka@rub.de; <http://www.rub.de/ces>

A.S. Bondarenko, W. Zhou, H.J.M. Bouwmeester, *J. Power Sources* **194** (2009) 843-846.
Superprotonic $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})\text{-SiO}_2$ composite electrolyte for intermediate temperature fuel cells



Novel thin film composite electrolyte membranes, prepared by dispersion of nano-sized SiO_2 particles in the solid acid compound $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$, can be operated under both oxidizing and reducing conditions. Long-term stable proton conductivity is observed at around 140 °C, i.e., slightly above the superprotonic phase transition temperature of $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$, under conditions of relatively low humidification ($p\text{H}_2\text{O} \approx 0.02 \text{ atm}$).

The superprotonic conductivity of $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$ resembles that of state-of-the-art solid acid electrolytes. Unlike sulphate and selenate solid acid electrolytes, $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$ can be operated in both O_2 - and H_2 -containing atmospheres. Slight humidification of the gases in liquid water at room temperature, with an equivalent $p\text{H}_2\text{O}$ of 0.02 atm, is sufficient to prevent impairment of the proton conductivity due to dehydration. Dispersion with nano-sized SiO_2 particles leads to improved mechanical properties. The dispersion-strengthened composite electrolyte can be easily made into a thin film in the μm range by dip-coating from a

suspension. Most important, the elevated temperature of operation and low humidification requirement of the thin film solid acid electrolyte membranes can potentially lead to significant system simplifications in comparison with polymer electrolyte fuel cells.

Neuartige Elektrolytmembranen aus Dünnschichtkompositen, die durch Dispersion von nano-dimensionierten SiO_2 -Partikeln im sauren Feststoff $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$ erhalten wurden, können sowohl unter oxidierenden als auch reduzierenden Bedingungen verwendet werden. Langzeitstabile Protonenleitfähigkeit wird bei etwa 140 °C unter Bedingungen von relativ geringer Feuchtigkeit ($p\text{H}_2\text{O} \approx 0,02 \text{ atm}$) beobachtet. Diese Temperatur liegt geringfügig über der superprotonischen Phasenübergangstemperatur von $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$.

Die superprotonische Leitfähigkeit von $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$ entspricht der von modernen sauren Festelektrolyten. Im Gegensatz zu sauren Sulfat- und Selenat-Festelektrolyten kann $\text{KH}(\text{PO}_3\text{H})$ sowohl in O_2 - als auch H_2 -haltiger Atmosphäre verwendet werden. Eine leichte Befeuchtung der Gase in flüssigem Wasser bei Raumtemperatur entsprechend einem $p\text{H}_2\text{O}$ von 0,02 atm reicht aus, um eine Beeinträchtigung der Protonenleitfähigkeit durch Dehydrierung zu verhindern. Die Dispersion mit Nano- SiO_2 Partikeln führt zu verbesserten mechanischen Eigenschaften. Der durch die Dispersion gestärkte Verbundelektrolyt kann einfach zu dünnen Filmen in μm-Bereich mittels Eintauchen in eine Suspension gefertigt werden. Herauszuheben ist, dass infolge der erhöhten Arbeitstemperatur und der Notwendigkeit zur nur geringen Befeuchtung der Festelektrolytmembranen im Vergleich zu Polymerelektrolytbrennstoffzellen signifikante Vereinfachungen am System erreicht werden können.

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>

J. Ribas-Arino, M. Shiga, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009) 4190-4193

Understanding Covalent Mechanochemistry

A general theoretical framework based on force-transformed potential energy surfaces rationalizes the intriguing results of recent experiments in the emerging field of covalent mechanochemistry.

Ist es der Sinn, der alles wirkt und schafft?
Es sollte stehn: Im Anfang war die Kraft!

Faust – Der Tragödie erster Teil
Johann Wolfgang von Goethe

Ein allgemeiner theoretischer Formalismus basierend auf kraft-transformierten Potentialflächen wird eingeführt und erklärt die erstaunlichen Resultate neuer Experimente in dem noch jungen Gebiet der kovalenten Mechanochemie.

Featured as an Angewandte Hot Paper “... chosen by the Editors for their importance in a rapidly evolving field of high current interest”.

Mediathek des Lehrstuhls mit weiteren Glanzlichtern:

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

Christof Hättig

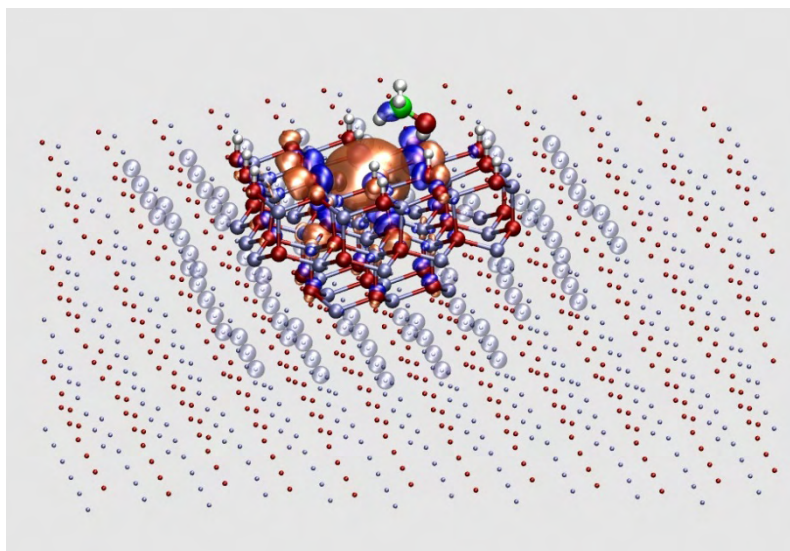
Theor. Chem. - Quantenchemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: christof.haettig@rub.de

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

G. Rossmüller, V. Kleinschmidt, J. Kossmann, C. Hättig, *J. Phys. Chem. C* **113** (2009) 1418-1425. A density functional study of the methanol synthesis at an oxygen vacancy at the polar ZnO(000-1) surface.



Die Elementarschritte der Methanolsynthesereaktion an einer Sauerstofffehlstelle auf der polaren ZnO(000-1)-Oberfläche wurden mit Dichtefunktionaltheorie untersucht. Wir berichten über Ergebnisse zu Reaktions- und Aktivierungsenergien für die wichtigsten Elementarschritte der Methanolsynthesereaktion. An den Sauerstofffehlstellen auf dieser Oberfläche sind die Barrieren für die heterolytische Spaltung von H₂ in Protonen (gebunden in OH-Gruppen auf der Oberfläche) und Hydrid (stabilisiert in der Fehlstelle) niedrig. Die stabilisierte Hydrid-Spezies ermöglicht die Reduktion von CO zu Formyl (ebenfalls stabilisiert in der Fehlstelle) mit einer geringen Barriere ≤ 100 kJ/mol. Nach einer schnellen Umlagerung zu Formaldehyd und Hydroxymethylen-Spezies führt ein zweiter Reduktionsschritt wahrscheinlich zu einem oberflächengebundenen Methoxid, das unter den reduzierenden Reaktionsbedingungen von der Oberfläche desorbiert, wobei die Sauerstofffehlstelle regeneriert wird. Neben Formate, das als Nebenprodukt erscheint, und Formyl-Spezies sind sauerstoffgebundene Hydroxymethylen-Spezies weitere möglicherweise beobachtbare Intermediate der Methanolsynthesereaktion an einer Sauerstofffehlstelle auf der ZnO(000-1)-Oberfläche.

The elementary steps of the methanol synthesis reaction at oxygen vacancies on the polar ZnO(000-1) surface have been studied with density functional theory. We report results for reaction and activation energies for the most important elementary steps of the methanol synthesis reaction on this surface. At these oxygen vacancies the barriers for heterolytic cleavage of H₂ into protons, bound in surface OH groups, and hydrides, trapped in the vacancies, is low. The stabilized hydride facilitates the reduction of CO to formyl (stabilized in the vacancy) with a low barrier ≤ 100 kJ/mol. After a fast rearrangement to formaldehyde and hydroxymethylene species a second reduction step leads probably to a surface bound methoxide which at reducing conditions desorbs from the surface under regeneration of an oxygen vacancy. Beside formate, which appears as a side product, and formyl species, oxygen bound hydroxymethylene might be another observable intermediate of the methanol synthesis reaction at oxygen vacancy sites on the ZnO(000-1) surface.

Volker Staemmler

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

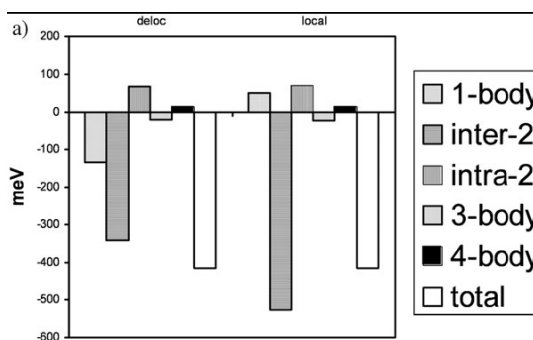
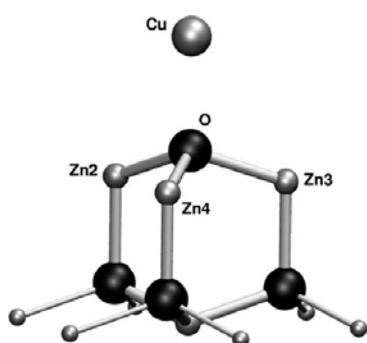
Tel.: ++49-(0)234-3226752; FAX: ++49-(0)234-3214045

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

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

I. Schmitt, K. Fink, V. Staemmler, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11** (2009) 11196. The Method of Local Increments for the Calculation of Adsorption Energies of Atoms and Small Molecules on Solid Surfaces. Part I. A single Cu Atom on the Polar Surfaces of ZnO.

Die Berechnung genauer Bindungsenergien und –geometrien für die Adsorption von Atomen und kleinen Molekülen an Festkörperoberflächen ist immer noch eine Herausforderung an die Theoretische Chemie. Das gilt vor allem, wenn unterschiedliche Bindungsmechanismen (chemische Bindung, Elektrostatik, van der Waals-Bindung) eine Rolle spielen. Eine vielversprechende numerische Methode ist die der „lokalen Inkremente“, bei der die gesamte Wechselwirkung in eine Summe von Ein-, Zwei- und Mehrteilchen-Beiträgen aufgeteilt wird. Mithilfe von Cluster-Rechnungen konnte am Beispiel der Adsorption von Cu-Atomen an verschiedenen ZnO-Oberflächen gezeigt werden, dass es ausreicht, Ein- und Zweiteilchen-Beiträge zu berechnen, sogar wenn das ungepaarte Elektron des Cu-Atoms stark delokalisiert ist. Damit hat man eine sehr effiziente Methode zur Berechnung zuverlässiger Adsorptionsenergien, die auch für größere Systeme verwendet werden kann.



The accurate calculation of binding energies and geometries for the adsorption of atoms and small molecules on solid surfaces is still a challenge for Theoretical Chemistry. This holds true in particular if different bonding mechanisms (chemical bonding, electrostatics, van der Waals interaction) are involved. A promising numerical method is the use of “local increments” where the total interaction is decomposed into a sum of one-body, two-body and higher increments. By means of cluster calculations it could be shown for the interaction of Cu atoms with different ZnO surfaces that it is sufficient to calculate only one- and two-body contributions, even when the odd electron of the Cu atom is strongly delocalized. This opens up a very efficient way to calculate reliable adsorption energies, even for much larger adsorption systems.

Martin Muhler

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

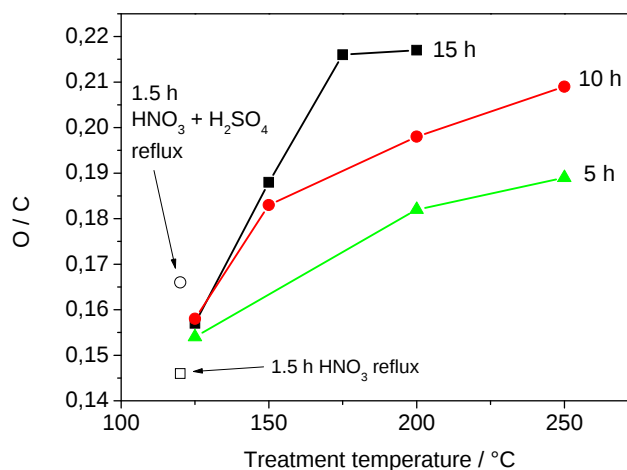
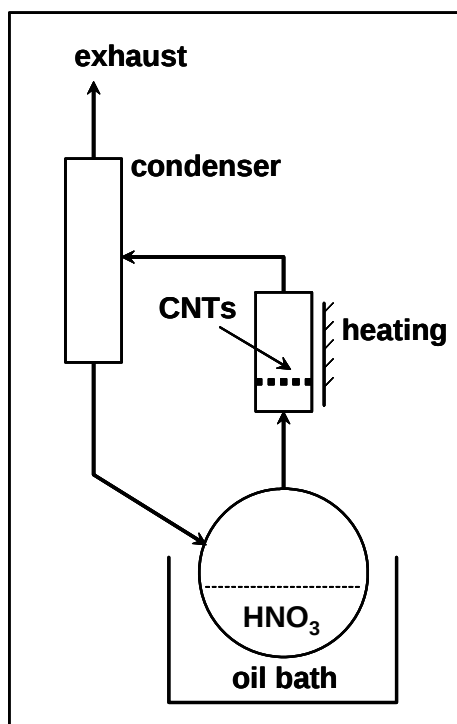
Tel.: ++49-(0)234-3228754; FAX: ++49-(0)234-3214115

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

W. Xia, C. Jin, S. Kundu, M. Muhler, *Carbon* **47** (2009) 919-92. A highly efficient gas-phase route for the oxygen functionalization of carbon nanotubes based on nitric acid vapor.

Es wurde eine hocheffiziente Methode entwickelt, um Kohlenstoffnanoröhren mit Salpetersäuredampf zu ätzen, sodass der Filtrationsschritt beim herkömmlichen Sauerstoff-Funktionalisieren in flüssiger siedender Salpetersäure entfällt. Dadurch gelingt es, eine im Vergleich zum Flüssigverfahren signifikant höhere Anzahl an sauerstoffhaltigen funktionellen Gruppen zu erzeugen, die mittels der Röntgenphotoelektronenspektroskopie nachgewiesen wurden. Das Gasphasenverfahren bietet weitere Vorteile, da die Morphologie der Nanoröhren nicht angegriffen wird und es nicht zu einer weiteren Agglomeration kommt.

WO2010000424 (A2), DE102008031579 (A1)



A simple, highly effective method for the functionalization of CNTs with HNO_3 vapor is developed, thus eliminating separation by filtration. A significantly higher amount of oxygen species compared to conventional wet HNO_3 treatment was detected by X-ray photoelectron spectroscopy, and the morphology and the degree of agglomeration did not deteriorate because of the treatment.

Wolfgang Grünert

Technische Chemie – Struktur/Aktivität heterogener Katalysatoren

Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

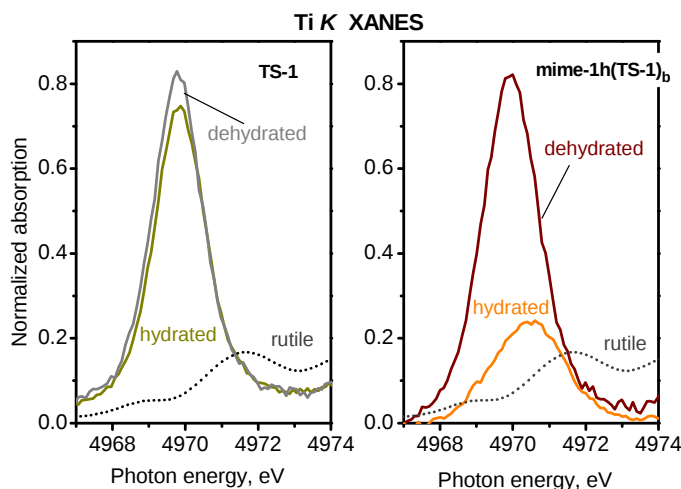
Tel.: +49-(0)234-3222088; FAX: +49-(0)234-3214115

email: Wolfgang.Gruenert@techem.rub.de

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

M. Reichinger, W. Schmidt, M. W. E. van den Berg, A. Aerts, J. A. Martens, C. E. A. Kirschhock, H. Gies, W. Grünert, *J. Catal.* **269** (2010) 367-375. Alkene Epoxidation with mesoporous materials assembled from TS-1 seeds – is there a hierarchical pore system?

Geordnete mesoporöse Alumo- oder Titanosilikate mit zeolithischer Struktur der Porenwände sind attraktive Materialien mit hierarchischem Porensystem, die ein großes Potenzial für Flüssigphasenkatalyse haben. Allerdings ist ihre Natur umstritten. In einer umfassenden Studie aus TS-1 – Keimen aufgebauter Materialien mit geordnetem hexagonalen Porensystem konnte gezeigt werden, dass die Porenwände aus ca. 1,5 nm dicken nanoslabs von TS-1 – Struktur bestehen. Dabei waren XANES-Messungen an der TiK-Kante entscheidend, mit denen die tetraedrische Koordination der Ti-Zentren, ihre nahezu vollständige Zugänglichkeit und ihr – im Gegensatz zum TS-1 – hydrophiler Charakter belegt wurden. Die aufsehen erregenden katalytischen Eigenschaften dieser Materialien erklären sich aus der guten Zugänglichkeit sowie dem hydrophilen Charakter dieser Nanoslabs. Bei Epoxidationen mit *tert*-Butylhydroperoxid waren sie mit dem Substrat Cyclohexen dem TS-1 um 1-2 Größenordnungen überlegen, versagten dagegen komplett mit dem Substrat n-Hexen.

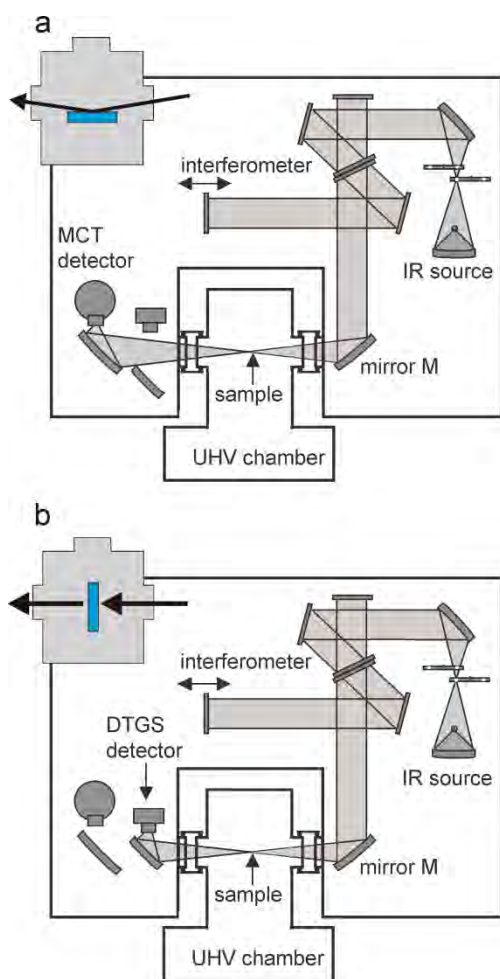


Ordered mesoporous alumo and titano silicates with pore walls of zeolite structure are attractive materials with hierarchical pore systems offering considerable promise for catalysis, in particular for reactions in liquid phase. Their nature is, however, under debate. In a project combining structural and catalytic studies on a material containing a hexagonally ordered mesopore system assembled from zeolite seeds of TS-1 structure, we could show that the pore walls indeed consist of TS-1 nanoslabs of ca. 1.5 nm thickness. This was most effectively supported by TiK XANES measurements showing the Ti to be in tetrahedral coordination, almost completely accessible, and hydrophilic, the latter by contrast to TS-1. The striking catalytic properties of this material follow from the improved access to the nanoslabs and their hydrophilicity. In epoxidations with *tert*-butyl hydroperoxide, they outperformed TS-1 by 1-2 orders of magnitude with the cyclohexene substrate while failing completely in the epoxidation of n-hexene.

Yuemin Wang

Tech. Chem. / Phys. Chem. - Oberflächenchemie;
Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum
Tel.: ++49-(0)234-3224217; FAX: ++49-(0)234-3214182
email: wang@pc.ruhr-uni-bochum.de
<http://www.ruhr-uni-bochum.de/ag-wang>

Y. Wang, A. Glenz, M. Muhler, Ch. Wöll, *Rev. Sci. Instrum.* **80** (2009) 113108. A new dual-purpose ultrahigh vacuum FTIRS apparatus optimized for grazing-incidence reflection as well as for transmission geometries.



Es wird eine neu aufgebaute Ultrahochvakuum (UHV)-Apparatur beschrieben, die zur spektroskopischen Charakterisierung von Oxiden (Einkristallen und Pulvern) eingesetzt werden kann. Dabei handelt es sich um eine Kombination aus einem dem modernsten Stand der Technik entsprechenden Vakuum-FTIR-Spektrometer und einem neuartigen UHV-System (PREVAC). Das innovative Design ermöglicht es, sowohl RAIRS-Experimente an gut definierten Oxid-Einkristalloberflächen unter streifendem Einfall in Reflexion als auch FTIR-Transmissionsmessungen an polykristallinen Pulverproben durchzuführen. Eine weitere Besonderheit dieser Apparatur ist, dass es entlang des Infrarotstrahlengangs überall evakuiert ist, um die Hintergrundsignale aus der Gasphase zu vermeiden. Es ist damit möglich, hochwertige IR-Daten mit hoher Empfindlichkeit und Stabilität aufzunehmen, eine wesentliche Voraussetzung für die Beobachtung von Adsorbaten auf Oxid-Einkristalloberflächen. Durch Fallstudien an zwei unterschiedlichen Materialien (TiO_2 und ZnO) wird die einzigartige Leistung dieser neuen Anlage im Hinblick auf die spektroskopische Charakterisierung von Adsorbaten auf Oxid-Einkristallen sowie auf Pulverpartikeln demonstriert.

A newly designed ultrahigh vacuum (UHV) apparatus dedicated to the spectroscopic characterization of oxides, single crystals as well as powders, is described. It combines a state-of-the-art vacuum IR spectrometer with a novel UHV system (PREVAC). The innovative design allows carrying out both reflection-absorption infrared spectroscopy (RAIRS) experiments at grazing incidence on well-defined oxide single crystal surfaces and FTIR transmission measurements for powder particles. A further unique feature of the apparatus is the entirely evacuated optical path to avoid background signals from gas phase, thus creating the possibility to record high-quality IR data with high sensitivity and stability, an essential prerequisite for monitoring molecular species adsorbed on oxide single-crystal surfaces. The unique performance of this new apparatus with regard to the spectroscopic characterization of adsorbates on oxide single crystals as well as on powder particles is demonstrated by case studies for two different materials, TiO_2 and ZnO .

Michael Hollmann

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

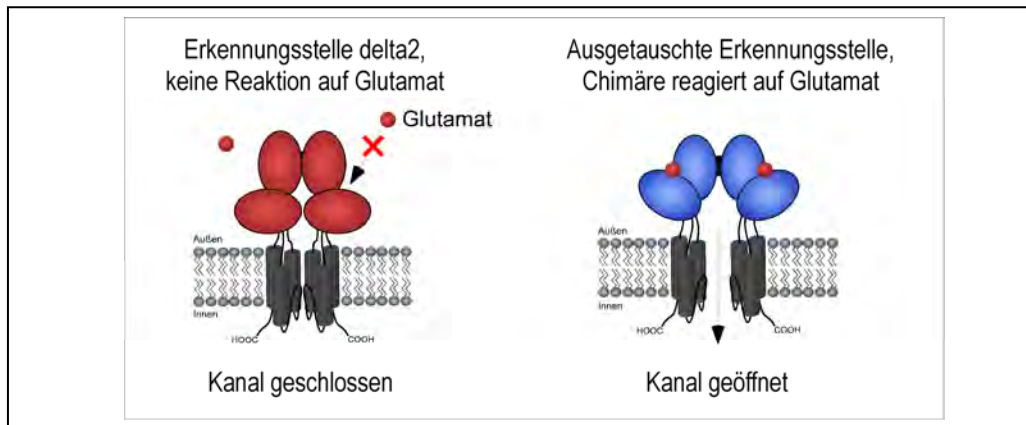
Tel.: ++49-(0)234-3224225; FAX: ++49-(0)234-3214244

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

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1/>

S. M. Schmid, S. Kott, C. Sager, T. Hülsken, M. Hollmann, *Proceedings of the National Academy of Sciences, USA* **106** (25) (2009) 10320-10325. The glutamate receptor subunit delta2 is capable of gating its intrinsic ion channel as revealed by ligand binding domain transplantation

Der delta2-Rezeptor ist ein spezieller Rezeptor aus der Familie der ionotropen Glutamaterezeptoren, der an ganz spezifischer Stelle im Kleinhirn vorkommt, wo er eine wichtige Rolle bei der richtigen Verschaltung der Nervenzellen während der Kleinhirnentwicklung und für die Feinkoordination der Motorik spielt. Unbekannt war bislang, wie der Rezeptor diese Funktionen erfüllt, da er keine bekannten glutamatergen Liganden bindet. Damit war unklar, ob er überhaupt wie ein normaler Glutamaterezeptor funktionieren kann, nämlich als neurotransmitteraktivierter Ionenkanal. Um diese Fragen zu beantworten, wurde ein chimärer Rezeptor hergestellt. Dazu erhielt ein delta2-Rezeptor die glutamatsensitive Ligandenbindungsstelle ("Erkennungsstelle") aus einem klassischen Glutamaterezeptor als Transplantat. Der chimäre Rezeptor stellte sich als einwandfrei funktionell heraus, wodurch erstmalig bewiesen werden konnte, dass delta2-Rezeptoren tatsächlich einen funktionsfähigen Ionenkanal besitzen, der lediglich korrekt angesteuert werden muss. Das "Problem" des delta-Rezeptors ist demnach seine aberrante Ligandenbindungsstelle, die entweder einen ganz speziellen Liganden oder die Interaktion mit einem modulatorischen Protein zum "Anschalten" des Rezeptors benötigt.



The delta2 receptor is a special member of the ionotropic glutamate receptor family. It is expressed at specific sites in the cerebellum where it plays an important role in correct synaptogenesis during embryonal development, and in the fine-tuning of motor control. Prior to our study it was unclear how delta2 served these functions, as it had been shown that delta2 did not bind any known glutamatergic agonist. That left the open question whether delta2 actually could function like a normal glutamate receptor, i.e., as a neurotransmitter-gated ion channel. To answer this question a chimeric receptor was constructed that consisted of delta2 with a grafted glutamate-binding domain borrowed from a functional glutamate receptor. This chimeric receptor turned out to be fully functional, an observation that conclusively proved for the first time that delta2 receptors possess a functional ion channel that only needs to be properly activated. Thus, the "problem" of the "non-functional" delta2 receptor appears to be its aberrant ligand binding site. That site may require either a very special agonist or an interaction with a modulatory protein that may act as an "on switch" for the receptor.

Guiscard F. A. Seeböhm

AG Kationenkanäle, Lehrstuhl für Biochemie I, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum,

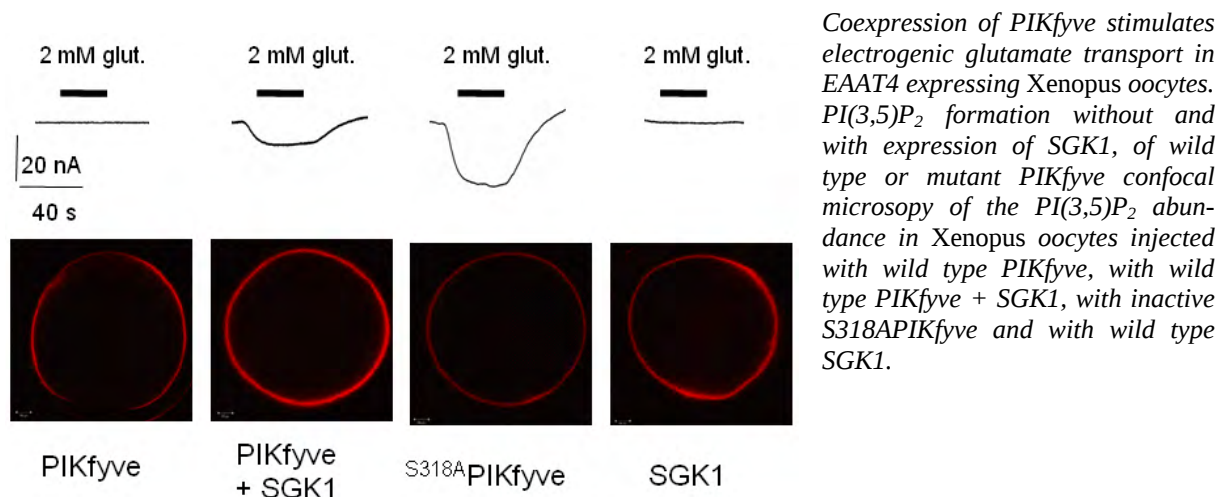
Tel: +49(0)234/3224233; Fax: +49(0)234/3214034

email: guiscard.seeböhm@rub.de

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/bc1/kation/index.html>

J. Laufer, F. Klaus, O. N. Ureche, A. Zürn, N. Strutz-Seeböhm, J. M. Tavaré, C. Boehmer, M. Palmada, U. E. Lang, G. Seeböhm, F. Lang. *Cell. Physiol. Biochem.* **25** (2010), 187-94. Regulation of the glutamate transporter EAAT4 by PIKfyve

Der Na⁺-Glutamatkotretransporter EAAT4 (SLC1A6) wird in Purkinjefasern expremiert und sorgt für die Wiederaufnahme von Glutamat nach synaptischer Freisetzung. EAAT4 wird durch die SGK1 Kinase stimuliert. In dieser Studie konnte gezeigt werden, dass die SGK1 Kinase die Plasmamembrandichte der EAAT4-Transporter erhöht. Der Signalweg von SGK1 beinhaltet die Kinase PIKfyve, welche phosphoryliert und stimuliert wird. Dadurch wird vermehrt PI(3,5)P₂ gebildet, welches die Vesikelexozytose von EAAT4-angereicherten Vesikeln stimuliert. Als Folge dieser intrazellulären Ereignisse nimmt die Dichte der Transporterproteine in der Plasmamembran und die zelluläre EAAT4-Funktion zu.



The Na⁺,glutamate cotransporter EAAT4 (SLC1A6) is expressed mainly in Purkinje cells and serves to clear glutamate from the synaptic cleft. EAAT4 activity is stimulated by the serum and glucocorticoid inducible kinase SGK1. The present experiments thus explored whether SGK1-dependent EAAT4-regulation similarly involves PIKfyve. In *Xenopus* oocytes expressing EAAT4, but not in water injected oocytes, glutamate induced a current which was significantly enhanced by coexpression of PIKfyve and SGK1. The glutamate induced current in *Xenopus* oocytes coexpressing EAAT4 and both, PIKfyve and SGK1, was significantly larger than the current in *Xenopus* oocytes expressing EAAT4 together with either kinase alone. Coexpression of the inactive SGK1 mutant ^{K127N}SGK1 did not significantly alter glutamate induced current in EAAT4-expressing *Xenopus* oocytes and abolished the stimulation of glutamate induced current by coexpression of PIKfyve. The stimulating effect of PIKfyve was abrogated by replacement of the serine with alanine in the SGK consensus sequence (^{S318A}PIKfyve). Furthermore, coexpression of ^{S318A}PIKfyve significantly blunted the stimulating effect of SGK1 on EAAT4 activity. The observations disclose that PIKfyve indeed participates in the regulation of EAAT4.

Rolf Heumann

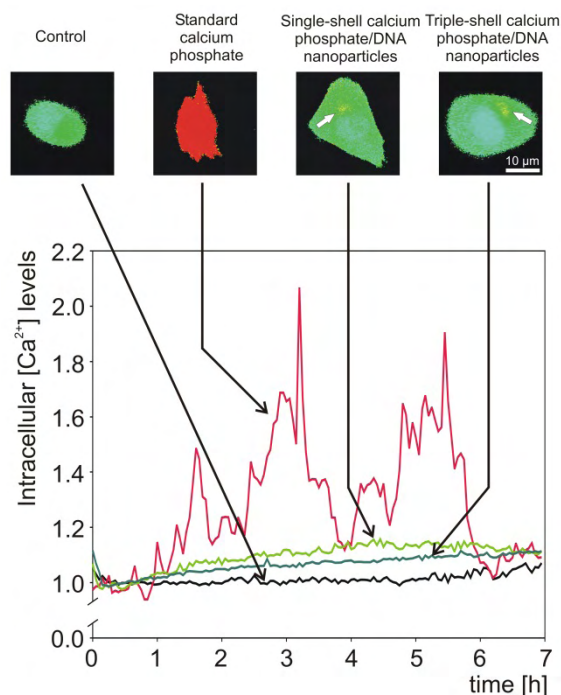
Biochemie II, Molekulare Neurobiochemie; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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>

S. Neumann, A. Kovtun, I. D. Dietzel, M. Eppler, R. Heumann *Biomaterials* **30** (2009), 6794-6802 The Use Of Size-Defined DNA-Functionalized Calcium Phosphate Nanoparticles to minimise intracellular calcium disturbance during transfection.



Aktuelle Methoden der Gentherapie erzielen eine zu niedrige Effizienz der Transfektion oder können bei Anwendung von effizienten viralen Vektoren gefährliche entzündliche Prozesse und krebsauslösende Insertionsmutation verursachen. Die herkömmliche Calciumphosphat Transfektionsmethode ist prinzipiell geeignet, da Calcium und Phosphat natürliche Bestandteile lebender Organismen darstellen. Jedoch zeigen die mit radioaktivem $^{45}\text{Ca}^{2+}$ durchgeführten Ergebnisse, dass ein hoher Anteil von Calcium in die Zelle aufgenommen wird. Unter Verwendung eines Fura-2 Indikators konnte die intrazelluläre Calcium-Konzentration zeitaufgelöst ermittelt werden. Die aufgenommenen Calciumphosphat-Kristalle lösten dramatische Schwankungen des freien intrazellulären Calciumgehalts aus, was zu einer erhöhten zellulären Degeneration führte. Zur Vermeidung solcher zellschädigender Effekte entwickelten wir (Zusammenarbeit mit

Prof. Eppler/Essen) mehrschalige Calciumphosphat Nanopartikel mit definierter Größenverteilung, die mit Nukleinsäuren funktionalisiert waren. Diese lösten bei hoher Transfektionseffizienz nahezu keine deutlichen intrazellulären Calciumschwankungen aus und hatten keinen zellschädigenden Effekt. Zusammengefasst könnten sich die biokompatiblen mit Nukleinsäuren funktionalisierten Nanopartikel als geeignetes Agens erweisen, in Zukunft somatische Gentherapie oder DNA-basierte Impfungen durchzuführen.

Gene therapy suffers from a low efficiency of gene transfection rates unless viral vectors are used which carry an inherent risk of causing inflammatory reactions or cellular transformation by insertion mutagenesis. In principle, the standard calcium phosphate transfection method might be suitable *in vivo* because of the low toxicity of Ca^{2+} or phosphate ions. However, by tracing added calcium using the radioactive isotope $^{45}\text{Ca}^{2+}$ in human bladder carcinoma cells, we show that the overall calcium uptake is strongly enhanced. Time resolved monitoring by using the indicator fura-2 shows dramatic transient surges of intracellular free Ca^{2+} -levels during the standard calcium phosphate transfection method. These deregulated intracellular Ca^{2+} levels are associated with an enhanced rate of cell death. In order to circumvent such adverse effects we have developed biocompatible multi-shell calcium phosphate nanoparticles functionalized with nucleic acids. These size-defined calcium phosphate nanoparticles did not evoke measurable disturbances in intracellular Ca^{2+} -levels and cell survival rates were within the limits of untreated control cultures. In summary, due to their biocompatibility DNA-functionalised calcium phosphate nanoparticles may serve as a superior transfection agent for gene therapy and DNA vaccination in future.

Irmgard Dietzel-Meyer

Lehrstuhl für Molekulare Neurobiochemie – AG Elektrobiophysik neuronaler Zellen

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

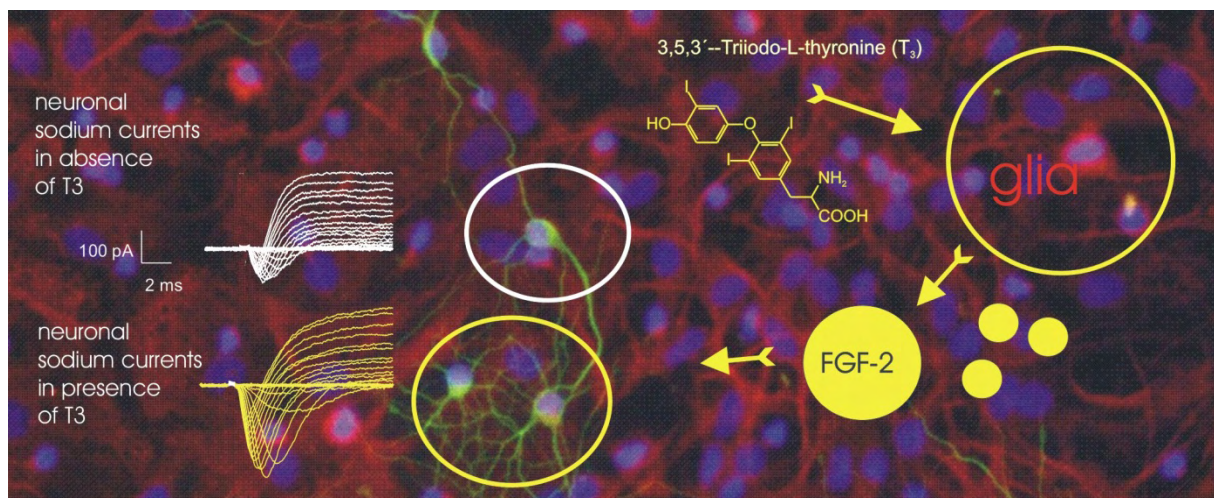
Tel.: ++49-(0)234-3224710; Fax: ++49-(0)234-3214105

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

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

V. Niederkinkhaus, R. Marx, G. Hoffmann, I. D. Dietzel, *Molecular Endocrinology* **23** (2009) 1494-1504. Thyroid hormone (T3)- induced up-regulation of voltage-activated sodium current in cultured postnatal hippocampal neurons requires secretion of soluble factors from glial cells

Die Exposition mit dem biologisch aktiven Schilddrüsenhormon Triiod-L-thyronin (T3) vergrößert die Na^+ -Stromdichte in Nervenzellen aus dem Hippocampus neugeborener Ratten. Die damit verbundene Zunahme der neuronalen Erregbarkeit könnte den bekannten Effekten des Schilddrüsenhormons auf die Geschwindigkeit der neuronalen Informationsverarbeitung zu Grunde liegen. Wir konnten nun zeigen, dass die Na^+ -Stromregulation nur in Gegenwart von Gliazellen auftritt, welche nach T3-Exposition einen temperaturempfindlichen Faktor sezernieren. Eine Behandlung von angereicherten Nervenzellkulturen mit *basic fibroblast growth factor* (FGF-2) führte zu einer vergleichbaren Regulation der Na^+ -Stromdichte wie die Behandlung mit Zellkulturüberständen von T3-exponierten Gliazellen. Die Neutralisierung von T3-behandelten Zellkulturüberständen mit Antikörpern gegen FGF-2 inhibierte die Hochregulation der Na^+ -Stromdichte durch T3. Dies zeigt, dass die Regulation von Na^+ -Strömen durch Schilddrüsenhormon über einen Zwischenschritt erfolgt, der die Freisetzung von löslichen Faktoren aus Satellitenzellen beinhaltet und dass Gliazellen über die Sekretion parakriner Faktoren die Funktion von Nervenzellen modulieren können.



We have previously shown that treatment with the biologically active thyroid hormone triiodo-L-thyronine (T3) increases the voltage-gated Na^+ current density in hippocampal neurons from postnatal rats. The resulting increase in neuronal excitability could explain the conspicuous increase in mental speed occurring in hyperthyroidism. We now showed that the Na^+ current regulation only occurs in the presence of glial cells which secrete a heat instable soluble factor in response to stimulation with T3. The effect of conditioned medium from T3-treated glial cells was mimicked by *basic fibroblast growth factor* (FGF-2). Neutralisation of astrocyte conditioned media with anti-bFGF antibodies inhibited the regulation of the Na^+ current density by T3, suggesting that the upregulation of the neuronal Na^+ current density by T3 is not a direct effect but involves FGF-2 release and satellite cells. Furthermore our results demonstrate, that glial cells not only influence synaptic transmission but can directly influence neuronal excitability by secretion of paracrinely acting soluble factors.

Raphael Stoll

Biochemie II, Biomolekulare NMR; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

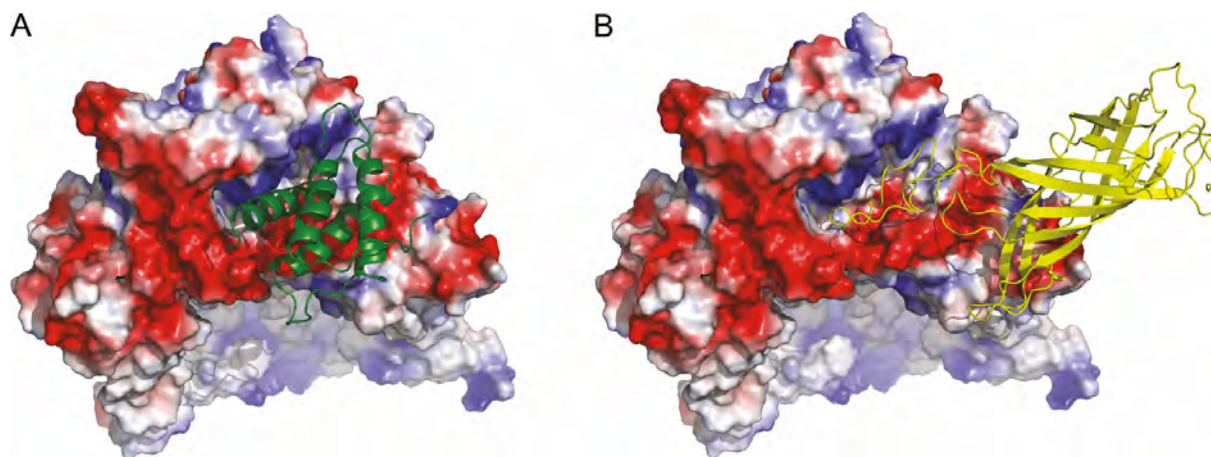
Tel.: ++49-(0)234-3225466; FAX: ++49-(0)234-3205466

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

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

K. U. Cormann, J.-A. Bangert, M. Ikeuchi, M. Rögner, R. Stoll, M. M. Nowaczyk, *Biochemistry* **48** (2009), 8768-8770. Structure of Psb27 in Solution: Implications for Transient Binding to Photosystem II during Biogenesis and Repair.

Psb27 ist ein Protein, welches eine Membran-extrinsische Untereinheit des Photosystem II (PSII)-Komplexes darstellt. Psb27 ist an der Biogenese und der Erhaltung dieses grossen Membrankomplexes beteiligt, der einer der Schlüsselreaktionen in der Biosphäre katalysiert – die lichtinduzierte Oxidation des Wassers. Wir konnten erstmals die Struktur des Psb27 in Lösung ermitteln. Diese war in den Kristallstrukturen des PSII zuvor nicht beobachtet worden, da Psb27 lediglich transient mit PSII interagiert. Die Struktur des Psb27 besteht dabei aus einem rechtsgängigen Vier-Helix-Bündel mit einer „up-down-up-down“-Topologie. Das elektrostatische Oberflächenpotential (A und B), welches durch amphipatische Helices gebildet wird, zeigt eine deutliche dipolare Verteilung. Diese ist komplementär zur Ladungsverteilung der Bindungsstelle des PSII für das PsbO-Protein. Auf der Basis der von uns ermittelten Psb27-Struktur und *in silico* Modellierungen postulieren wir eine wichtige Funktion des Psb27 (A): Es verhindert die gleichzeitige Bindung des PsbO an PSII und ermöglicht dadurch die Biogenese des Mn₄Ca-Clusters (B).



Psb27 is a membrane-extrinsic subunit of photosystem II (PSII) where it is involved in the assembly and maintenance of this large membrane protein complex that catalyzes one of the key reactions in the biosphere, the light-induced oxidation of water. Here, we report for the first time the structure of Psb27 that was not observed in the previous crystal structures of PSII due to its transient binding mode. The Psb27 structure shows that the core of the protein is a right-handed four-helix bundle with an up-down-up-down topology. The electrostatic potential of the surface generated by the amphipathic helices shows a dipolar distribution which fits perfectly to the major PsbO binding site on the PSII complex. Moreover, the presented docking model could explain the function of Psb27 (A), which prevents the binding of PsbO to facilitate the assembly of the Mn₄Ca cluster (B).

Bernhard Hovemann

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

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

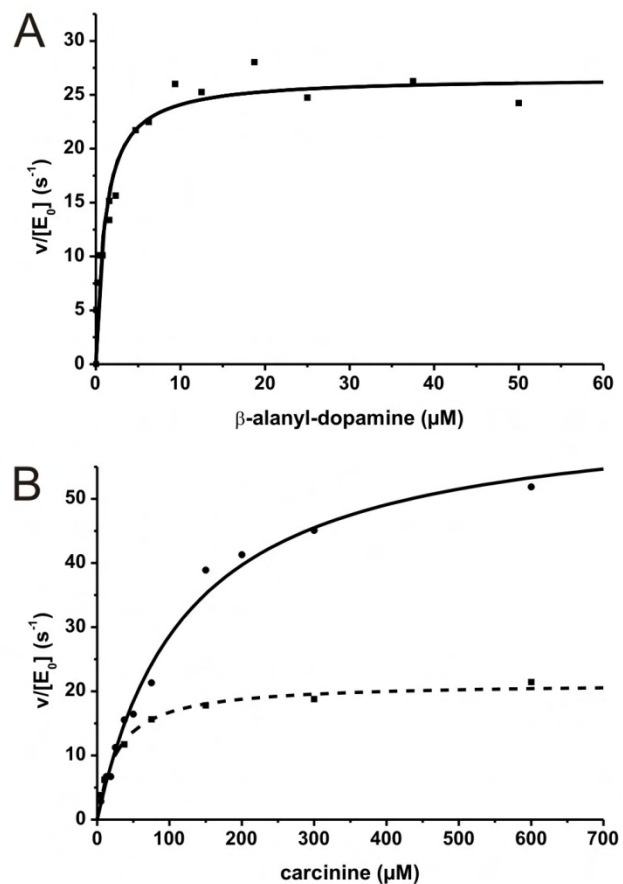
email: bernhard.hovemann@rub.de

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

S. Aust, F. Brüsselbach, S. Pütz, and B. T. Hovemann *J. Biol. Chem.* (2010) in press
Alternative tasks of *Drosophila* Tan in neurotransmitter recycling vs. cuticle sclerotization disclosed by kinetic properties

Das Tan Protein hat mit der Spaltung von Carcinine eine Schlüsselfunktion im Recycling Kreislauf des Neurotransmitters Histamin im *Drosophila* Auge. Es ist auch an dem Prozess der Kutikula Bildung beteiligt. Dort spaltet es β -Alanyl-Dopamin, eine Hauptkomponente des Sklerotisierungsprozesses. Um diese pleiotropischen Funktionen zu untersuchen, haben wir Tan als His₆-Fusionsprotein in *E. coli* exprimiert und zur Homogenität gereinigt. Die kinetischen Parameter der Carcinin (B) und β -Alanyl-Dopamin (A) Spaltung zeigen profunde Unterschiede. Der K_m Wert der beiden Substrate unterscheidet sich um etwa zwei Zehnerpotenzen. Darüber hinaus spiegelt die Konzentrationsabhängigkeit der Aktivität die Erfordernisse der jeweiligen zellulären "Pathways" wieder, an denen Tan beteiligt ist. Unsere Untersuchungen zeigen, wie das Enzym verschiedene Aufgaben in pleiotropen Funktionen durch Variation der Substrataffinität und Reaktionsgeschwindigkeit handhaben kann. Damit erweitern sie unser Verständnis von Kutikula Sklerotisierung und Histamin Neurotransmitter Recycling in *Drosophila*.

Tan provides a key function in the recycling pathway of the neurotransmitter histamine by cleavage of carcinine in the *Drosophila* eye. It is also involved in the process of cuticle formation. There, it cleaves β -alanyl-dopamine, a major component in cuticle sclerotization. To investigate its pleiotropic functions, we have expressed Tan as His₆-fusion protein in *E. coli* and have purified it to homogeneity. Kinetic parameters of carcinine (B) and β -alanyl-dopamine (A) cleavage exhibit profound differences. The K_m of both substrates differs by nearly two orders of magnitude. More importantly, concentration dependence of activity reflects the necessities required by the respective cellular pathway, in which Tan is participating. Our results show how the enzyme can manage different tasks in pleiotropic functions by simply varying substrate affinity and reaction speed and extend our understanding on cuticle sclerotization and histamine neurotransmitter recycling in *Drosophila*.



Kai Sven Erdmann

Biochemie II – Biochemie polarisierter Zellen; Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

email: kai.erdmann@rub.de;

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/mol-neurobio/Erdmann/KErdmann.html>

N. Stenzel, C. P. Fetzter, R. Heumann, K. S. Erdmann, *J. Cell Sci.* **122** (2009) 3374-3384.
PDZ-domain-directed basolateral targeting of the peripheral membrane protein FRMPD2 in epithelial cells

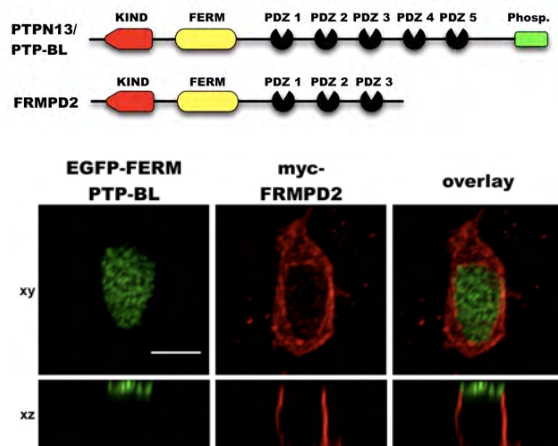


Figure 1: Komplementäre subzelluläre Lokalisation von PTP-BL und FRMPD2 in polarisierten Epithelzellen; grün PTP-BL, rot: FRMPD2

Multi-PDZ Domänen Proteine spielen eine entscheidende Rolle für die Etablierung und Aufrechterhaltung von Zellpolarisation. Das kürzlich von uns identifizierte Multi-PDZ Domänen Protein FRMPD2 verfügt über eine N-terminale KIND Domäne, eine FERM Domäne sowie über drei PDZ Domänen und fungiert somit als Organisationskomponente eines größeren Protein-komplexes. In polarisierten Epithelzellen liegt FRMPD2 basolateral lokalisiert vor. Herunterregulation von FRMPD2 in Caco-2 Zellen führt zu einem Defekt in der Assemblierung spezieller Zelladhäsionskontakte, den sogenannten *tight junctions*. Wir konnten zeigen, dass für die basolaterale Lokalisation sowohl die FERM Domäne als auch die PDZ2 Domäne von FRMPD2

notwendig bzw. ausreichend sind. Des Weiteren konnten wir nachweisen, dass die PDZ2 Domäne mit einer Unterfamilie der Catenine interagiert und dass die basolaterale Lokalisation der FRMPD2 vom Cadherin/Catenin Zelladhäsionssystem abhängig ist. Unsere Arbeiten geben einen neuen Einblick in baso-laterale Lokalisationsmechanismen sowie in die molekulare Funktion des multi-PDZ Domänen Proteins FRMPD2

Multi-PDZ domain proteins play a crucial role in the establishment and maintenance of cell polarization. The novel multi-PDZ domain protein FRMPD2 is a potential scaffolding protein consisting of an N-terminal KIND domain, a FERM domain and three PDZ domains. Here we show that FRMPD2 is localized in a polarized fashion in epithelial cells at the basolateral membrane and partially co-localizes with the tight junction marker protein ZO-1. Down regulation of FRMPD2 protein in Caco-2 cells is associated with an impairment of tight junction formation. We demonstrate the requirement of the FERM domain as well as the binding activity of the PDZ2 domain for basolateral restriction of FRMPD2. We find that the FERM domain of FRMPD2 binds phosphatidylinositols and is sufficient for membrane localization. Moreover, we demonstrate that recruitment of FRMPD2 to cell/cell junctions is strictly E-cadherin dependent being in line with our identification of catenin family proteins as binding partners for the PDZ2 domain. Our results provide novel insights into the molecular function of FRMPD2 and into targeting mechanism of peripheral membrane proteins in polarized epithelial cells

Katrin Sommer

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

Tel.: ++49-(0)234-3227522; FAX: ++49-(0)234-3214085

email: katrin.sommer@rub.de; <http://www.ruhr-uni-bochum.de/didachem>

K. Sommer, St. Andreß, A. Kakoschke, R. Wieczorek, S. Hanisch, J. Hanss, *Chemkon* 16 (2009) 1, S.19-30. Vanillezucker oder Vanillinzucker?

Jedes Jahr werden weltweit ca. 2.000 Tonnen Vanillefrucht und ca. 12.000 Tonnen Vanillin produziert, um den Bedarf an dieser Aromanote zu decken - sei es für Vanille-Eis, Vanillin-Zucker oder Cola. Der Beitrag bietet sowohl fachliche Hintergrundinformationen als auch ein didaktisches Konzept auf experimenteller Grundlage für die schulpraktische Umsetzung des Themas „Vanille vs. Vanillin“. Es beinhaltet die Synthese von Vanillin aus Ligninsulfonsäure und Möglichkeiten der nasschemischen Erschließung der Struktur von Vanillin. Anhand der Produkte „Vanillezucker“ und „Vanillinzucker“ erfolgt sowohl ein qualitativer Nachweis von Vanillin mittels dünnschichtchromatographischer Untersuchung als auch die quantitative Bestimmung von Vanillin im Vanillinzucker mittels Säure-Base-Titration.



Abb. 1: *Vanilla planifolia*



Abb. 2: Die unreife „Vanille-Schote“

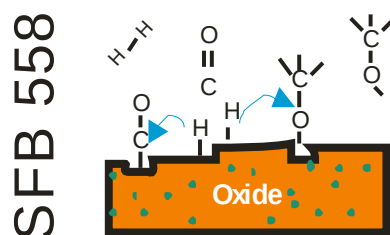
Every year two thousand tons of vanilla fruit and twelve thousand tons of vanillin are produced worldwide. Natural vanillin is isolated from vanilla beans, nature identical vanillin is a product of chemical synthesis. Vanillin is used in a wide range of applications, for example vanilla ice cream, vanillin sugar or cola. As you can see, vanillin is a component of a lot of different foods. Therefore pupils probably know the flavour of vanillin from their everyday-life.

This contribution shows scientific background information as well as an experimental-based concept in order to implement this subject at schools and universities. The starting point is the synthesis of vanillin using lignosulphonic acid. The second part of our concept deals with the chemical structure of vanillin. How to find out the constitution of the vanillin molecule by pupils and students? To elucidate the structure of the vanillin molecule at high-school-level you may use different typical test-tube reactions. In the third step, pupils and students ought to discover what vanilla sugar and vanillin sugar have in common and what is different - by means of thinlayer-chromatography and acid-base-titration.

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

Sprecher: Prof. Dr. M. Muhler (Technische Chemie),
Stellvertreter: Prof. Dr. R.A. Fischer (Anorganische Chemie II)
<http://www.sfb558.de>

Thema des im Bereich der heterogenen Katalyse angesiedelten SFB ist die Untersuchung der Metall-Träger-Wechselwirkung. Nachdem die industriell wichtige Synthese von Methanol aus Synthesegas (CO , CO_2 , H_2) 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 , TiO_2)-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 (Einkristalloberflächen) erfolgen. Im letzteren Fall wird ein gründlicher Vergleich der spektroskopischen Ergebnisse (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 Einkristalloberflächen und von Pulverpartikeln sein. Erfreuliches Highlight des Jahres 2009 war die erfolgreiche Begutachtung und Bewilligung einer 4. Förderperiode mit einem Gesamtbudget von 7,5 Mio. € für 15 Teilprojekte bis zum 30.6.2012.



The main topic of the collaborative research center is the investigation of metal-support interactions in heterogeneous catalysis. Because the industrial synthesis of methanol from synthesis gas has been extensively and successfully investigated, the new focus is to study the selective oxidation of short chain alcohols. Besides exploring conventional metal (Au , Cu) / support (ZnO , TiO_2) 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 spectroscopic results (IR, HREELS, Raman, UV/Vis) with results from theoretical calculations will be performed for the latter case. In addition to 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. Special highlight of the year 2009 was the successful evaluation and the granting of a 4th research term with a total budget of 7.5 mil. € for 15 sub-projects until June 2012.

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

Sprecher des SFB 558: Prof. Dr. M. Muhler (Technische Chemie),

Stellvertreter: Prof. Dr. R.A. Fischer (Anorganische Chemie II)

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, ebenso wie ungeklärte Fragestellungen bei Realsystemen neue Modellstudien stimulieren. Das Graduiertenkolleg wurde im Januar 2008 eingerichtet und im Zuge der Bewilligung einer 4. Förderperiode des SFB558 bis ins Jahr 2012 verlängert. Bereits 35 Kollegiaten nehmen 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 teil. 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 mechanism 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 well as open questions concerning realistic systems stimulate new model studies. The graduate school was founded in January 2008 and became extend until 2012 when the 4th research term of the SFB558 was granted. Already 35 members 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.

Forschergruppe 630 "Biologische Funktion von Organometallverbindungen"

Sprecher: Nils Metzler-Nolte

Lehrstuhl für Anorganische Chemie I - Bioanorganische Chemie;

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

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

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

<http://www.ruhr-uni-bochum.de/for630/>

Die *Bioorganometallchemie* ist ein aktuelles, interdisziplinäres Arbeitsgebiet. Diese Forschergruppe hat das Ziel, die Organometallchemie in der medizinischen Chemie zu etablieren. Der wissenschaftliche Schwerpunkt der Forschergruppe zielt auf das umfassende Verständnis der Wechselwirkung ausgewählter Klassen von Organometallverbindungen mit ihren zellulären Zielstrukturen wie Rezeptoren, Proteinen und DNA. Dabei sollen metallspezifische Wirkmechanismen aufgeklärt werden. Diese Erkenntnisse fließen in das Design neuer Leitstrukturen ein und tragen zum Verständnis von Signalwegen und Proteinexpressionsmustern in Tumorzellen bei. Die sieben teilnehmenden Gruppen in dieser von der DFG seit 2006 geförderten ortsverteilten Forschergruppe haben im Jahr 2009 über fünfzehn 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. Im Jahr 2009 wurde die Förderung der FOR 630 durch die DFG für die zweite Förderperiode bewilligt.



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 2009, more than fifteen 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. In 2009, funding was secured for a second period until 2012.

Research Department Interfacial Systems Chemistry (RD-IFSC)

Sprecher: Nils Metzler-Nolte

Science Manager: Andres Schützendübel

Ruhr-Universität Bochum; D-44780 Bochum

Tel.: ++49-(0)234-3224374; FAX: ++49-(0)234-3214378

email: Andres.Schuetzenduebel@rub.de; <http://www.rd.ruhr-uni-bochum.de/ifsc/index.html>

Das Research Department IFSC (RD IFSC) wurde im Januar 2009 durch den Rektor der Ruhr-Universität Bochum als Teil der Zukunftskonzept-Strategie "Research Campus" gegründet, um exzellente Forschung in einem einzigartigen interdisziplinären Ansatz zu fördern. Es wird finanziell durch Mittel des MIWFT-NRW gefördert und ist eine der thematischen Prioritäten der RUB in den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Es ist eine gemeinsame Initiative der chemischen und chemieverwandten Disziplinen, um ein grundlegendes und systematisches Verständnis der strukturellen und dynamischen Komplexität von hierarchisch strukturierten molekularen Verbänden an Grenzflächen zu erreichen. 2009 wurden durch das RD IFSC finanzielle Mittel in Höhe von ca. 450 000 Euro für elf Projekte im Rahmen eines kompetitiven Verfahrens vergeben. Zusätzlich wurde ein Clusterprojekt „Solvation“ in Angriff genommen, in dem Vorarbeiten für das im Rahmen der Exzellenzinitiative zu beantragende Cluster of Excellence (CoE) finanziert wurden. Zur Förderung der Selbständigkeit des wissenschaftlichen Nachwuchses wurde ein Postdoktorandenprogramm international ausgeschrieben, in dem sich Postdoktoranden mit ihrem eigenen Forschungsprojekt bewerben konnten. Die drei geförderten Wissenschaftler bekommen eine Stelle sowie Reisemittel und Sachmittel, um ein Jahr Ihre eigenes Forschungsprojekt zu bearbeiten und damit die Grundlagen für weitere Drittmittelförderung zu legen. Für den Ausbau der forschungsorientierten Lehre wurde erstmalig ein Praktikum *Interfacial Systems Chemistry* als Pflichtpraktikum für den Masterbereich im Chemiestudium durch das RD IFSC durchgeführt. Durch das Office des RD IFSC wurden neben der administrativen Begleitung des Vorantrages des CoE auch ein Projekt im Bio.NRW Wettbewerb und ein Vorantrag für einen Forschungsbau maßgeblich unterstützt. Darüber hinaus wurden durch das RD IFSC 2009 drei Mini-Symposien zu einem Thema durchgeführt, um neue Forschungsfelder und mögliche Projektideen zu identifizieren und zu entwickeln.



The Research Department IFSC (RD IFSC) was launched in January 2009 by the rector of the Ruhr-Universität Bochum as part of the future concept strategy "Research Campus" to promote excellent research in a unique interdisciplinary approach enabling independence of scientist with flat hierarchies. It is financially supported by a grant from the MIWFT-NRW and is an integrated part of the institutional Research Campus strategy of the Ruhr-University Bochum. The Research Department IFSC is one of the thematic priorities in Natural Sciences and Engineering. It is a joint and interdisciplinary approach of chemical and neighbouring disciplines to get a basic and systemic understanding of the structural and dynamic complexity of hierarchical assemblies at interfaces. In 2009, nearly 450 000 Euro have been approved for 11 research projects in a competitive process. Additionally, the planned Cluster of Excellence (CoE) „Solvation“ was supported as a core activity of the RD IFSC. For supporting young scientists, a postdoctoral program was international announced where young researchers could apply with their own research idea. Three scientists are funded for one year including travel grants and bench fees to develop their own research project.

For the extension of research-orientated teaching, a practical course *Interfacial Systems Chemistry* was established as an obligate part of the master course in chemistry in the winter term 2010. Beneath the administrative support of the application procedure for the CoE with its administrative infrastructure, the RD IFSC also supported the successful application for a project in the frame of the Bio.NRW competition and the application for a research building for the Centre for Solvation. To identify new research fields and ideas for innovative and interdisciplinary collaborative research projects three Mini-Symposia were organised where scientists could meet for one day to discuss in-depth their research topic.

Zentrum für Elektrochemie (CES)

Sprecher: W. Schuhmann (Lehrstuhl für Analytische Chemie)
M. Stratmann (Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf)
Wiss. Koordination: Sabine Seisel (Lehrstuhl für Analytische Chemie)
<http://rub.de/ces>

Das Zentrum für Elektrochemie der Ruhr-Universität Bochum (Center for Electrochemical Sciences - CES) wurde im Oktober 2009 von der Ruhr-Universität Bochum und dem Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf mit Unterstützung von ThyssenKrupp Steel gegründet. Als ein Projekt des HighTech.NRW-Wettbewerbs hat es die Aufgabe, ein regionalen Kompetenzzentrums für Elektrochemie einzurichten. Damit soll aufbauend auf der bestehenden Expertise der Mitglieder (Lehrstuhl für Analytische Chemie - Elektroanalytik & Sensorik der RUB und der Abteilung Grenzflächenchemie und Oberflächentechnik des Max-Planck-Instituts für Eisenforschung in Düsseldorf) eine international konkurrenzfähige Forschungsinfrastruktur im Bereich der Elektrochemie ausgebaut werden sowie eine nachhaltige Ausbildung von Nachwuchskräften erfolgen.

Im Zentrum werden Projekte zwischen den Mitgliedern und assoziierten Mitgliedern sowie mit Partnern sowohl innerhalb als auch außerhalb der Ruhr-Universität koordiniert. Weiterhin wird ein modernes elektrochemisches Labor eingerichtet, das sowohl für Forschungstätigkeiten der Mitglieder als auch für Kooperationspartner aus Forschung und Industrie zur offen ist. Um die elektrochemische Forschung nachhaltig in Deutschland und besonders in NRW wieder zu etablieren, ist eine umfangreiche Nachwuchsförderung ein weiterer Schwerpunkt des Zentrums. Hierzu werden zunächst 4 Nachwuchsgruppen im Zentrum eingerichtet, die auf unterschiedlichen aktuellen Gebieten forschen, sodass ein möglichst breites Spektrum an elektrochemischer Forschung im Zentrum vertreten ist.



The Center for Electrochemical Sciences (CES) of the Ruhr-Universität Bochum, Germany has been founded by Ruhr-Universität Bochum and Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf with an additional support by ThyssenKrupp Steel. CES is regarded as a Center of Excellence with the task to ensure international competitive research in all aspects of modern and future electrochemistry at a high standard. CES has been launched in October 2009.

Within CES research projects among the members as well as with external partners are coordinated. A modern electrochemistry laboratory will be built up, which is open to the members and associate members as well as external partners. In addition, 3 junior research groups have been established working on different topics in order to ensure sustainable and broad research in electrochemistry.



EUROPÄISCHE UNION
Investition in unsere Zukunft
Europäischer Fonds
für regionale Entwicklung

Ziel2.NRW
Regionale Wettbewerbsfähigkeit und Beschäftigung

Marie Curie Initial Training Network (MC-ITN)

FP7-PEOPLE-ITN-2008, ENHANCE-238409

Coordinator: Jun. Prof. Dr. Anjana Devi

Lehrstuhl für Anorganische Chemie II

email: anjana.devi@rub.de, enhance@rub.de

www.enhance-itn.eu

ENHANCE: European Research Training Network of New Materials: Innovative Concepts for their Fabrication, Integration and Characterization

Konzepte zur Herstellung und Integration funktioneller Dünnschichtmaterialien für Anwendungen in Mikro- und Nanoelektronik, Datenspeicherung und Photovoltaik stehen im Mittelpunkt des neuen Marie Curie-Programms ENHANCE, das Juniorprofessorin Dr. Anjana Devi an der Ruhr-Universität koordiniert. Die EU fördert das Programm zur Doktorandenausbildung mit 3,7 Mio. Euro im Rahmenprogramm FP-7-PEOPLE-ITN (Okt. 2009 - Sept. 2013). In die Promotionsprojekte sind mehrmonatige Aufenthalte an den kooperierenden Standorten integriert, die sich von Helsinki bis Padua über ganz Europa erstrecken. In Deutschland beteiligen sich das Forschungszentrum Jülich, die AIXTRON AG (Aachen), die Carl-Zeiss NTS GmbH (Jena) und das NamLab (Dresden). Das Netzwerk bietet ein strukturiertes und fokussiertes Ausbildungsprogramm für Doktoranden in diesem Bereich der Nanotechnologie und schließt eine Lücke der traditionellen Studienprogramme in Chemie, Physik und Ingenieurwissenschaften. Das Konsortium bilden acht akademische Gruppen und sieben Industriepartner aus Deutschland, Dänemark, Finnland, Italien, den Niederlanden und Österreich. Die Ausbildung der ENHANCE Stipendiaten beinhaltet auch „generic skills“ Workshops und Vor-Ort-Recherchen Ausbildung in modernsten Laboren, in Einrichtungen unter Reinraumbedingungen und Ausbildung in industriellen Laboren. Thematisch ist das Projekt zwischen den Research Departments „Interfacial Systems Chemistry“, „Integrity of Small Scale Systems/High Temperature Materials“ und „Plasmas with Complex Interactions“ angesiedelt.



Innovative concepts for the production and integration of functional thin films for applications in micro- and nano-electronics, data storage and photovoltaics are the main focus of a new Marie Curie Initial Training Network Program for education and training of PhD students, which is co-ordinated by Junior Professor Dr. Anjana Devi at the Ruhr-University Bochum. The EU is funding this doctoral education program with the amount of 3.7 Mio Euro within the Framework Programme FP-7-People-ITN (Oct. 2009 – Sept. 2013). Embedded within the doctoral exchange projects, are research stays of over several months in the cooperating locations across Europe, from Helsinki to Padua. In Germany, the Research Center Jülich, the AIXTRON AG (Aachen), the Carl-Zeiss NTS GmbH (Jena) and NamLab (Dresden) are part of this network. This training network offers a structured and focused education program for PhD students in the field of nano-technology and closes a gap between the traditional study courses in chemistry, physics and engineering. The ENHANCE consortium is made up of eight academic groups and seven industrial partners from Germany, Denmark, Finland, Italy, the Netherlands and Austria. The training of ENHANCE fellows also includes generic skills workshops and on-site research training in state of the art laboratories, facilities under clean room conditions and training in industrial laboratories. Thematically this project is integrated between the Research Departments „Interfacial Systems Chemistry“, „Integrity of Small Scale Systems/High Temperature Materials“ and of “Plasmas with Complex Interactions”.

Anorganische Chemie 1

- A. Pinto, U. Hoffmanns, M. Ott, G. Fricker, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **10** (2009) 1852-1860. Modification with organometallic compounds improves crossing of the blood-brain barrier of [Leu⁵]-enkephalin derivatives in an in vitro model system
- M. Patra, G. Gasser, A. Pinto, K. Merz, I. Ott, J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *ChemMedChem* **4** (2009) 1930–1938. Synthesis and Biological Evaluation of Chromium Bioorganometallics Based on the Antibiotic Platensimycin Lead Structure
- A. M. Sosniak, G. Gasser, N. Metzler-Nolte, *Org. Biomol. Chem.* **7** (2009) 4992-5000. Thermal Melting Studies of Alkyne and Ferrocene-containing PNA Bioconjugates
- J. Zagermann, M. C. Kuchta, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 5407-5412. Para-bromophenyl-tris(pyrazolyl)borate complexes of Group 1 metals, Thallium and Magnesium: Synthesis and characterization of transfer agents for “third-generation” Tp ligands
- R. Chelmowski, D. Käfer, S. D. Köster, T. Klasen, T. Winkler, A. Terfort, N. Metzler-Nolte, C. Wöll, *Langmuir* **25** (2009) 11480-11485. Post-formation modification of SAMs: Using "Click"-chemistry to functionalize organic surfaces
- J. Zagermann, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *Organometallics* **28** (2009) 5090–5095. Labelling of peptides with halocarbonyltungsten complexes containing functional η^2 -alkynyl ligands
- N. Hüsken, G. Gasser, S. D. Köster, N. Metzler-Nolte, *Bioconjugate Chem.* **20** (2009) 1578-1586. Four-potential" Ferrocene Labeling of PNA oligomers via Click Chemistry
- J. Lemke, A. Pinto, P. Niehoff, V. Vasylyeva, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* (2009) 7063-7070. Synthesis, structural characterisation and anti-proliferative activity of NHC gold amino acid and peptide conjugates
- G. Gasser, M. A. Neukamm, A. Ewers, O. Brosch, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, *Inorg. Chem.* **48** (2009) 3157-3166. Synthesis and Characterization of Dicobalthexacarbonyl-Alkyne Derivatives of Amino Acids, Peptides and PNA Monomers
- C. Rohe, J. Lemke, M. Lieb, N. Metzler-Nolte, *Synthesis* **12** (2009) 2015-2018. Synthesis of Perfluoroalkylthio-substituted Ferrocenes
- A. Hille, I. Ott, A. Kitanovic, I. Kitanovic, H. Alborzina, E. Lederer, S. Wölfl, N. Metzler-Nolte, S. Schäfer, W. Sheldrick, C. Bischof, U. Schatzschneider, R. Gust, *J. Biol. Inorg. Chem.* **14** (2009) 711-725. [N, N'-Bis(salicylidene)-1,2-phenylenediamine]metal Complexes with Cell Death Promoting Properties
- G. Gasser, O. Brosch, A. Ewert, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, *Dalton Trans.* (2009) 4310-4317. Synthesis and Characterisation of Hetero-Bimetallic Organometallic Phenylalanine and PNA Monomer Derivatives Rated as "Hot Article" by the Dalton Editorial Team based on the reviewers' comments
- J. Zagermann, M. C. Kuchta, K. Merz, N. Metzler-Nolte, *J. Organomet. Chem.* **694** (2009) 862-867. Ruthenium-based bioconjugates: Synthesis and X-ray structure of the mixed ligand sandwich compound RuCp₂Pr(p-(CO₂H)C₆H₄Tp) and labelling of amino acids and the neuropeptide enkephalin
- A. Groß, N. Metzler-Nolte, *Organomet. Chem.* **694** (2009) 1185-1188. Synthesis and Characterisation of a Ruthenocenoyl Bioconjugate with the Cyclic Octapeptide Octreotate Contribution to the Special Issue on the occasion of the 70th birthday of Prof. C. Elschenbroich

- F. Noor, R. Kinscherf, G. A. Bonaterra, S. Walczak, S. Wölfl, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **10** (2009) 493-502. Enhanced Cellular Uptake and Cytotoxicity Studies of Organometallic Bioconjugates of the NLS Peptide in Hep G2 Cells
- S. I. Kirin, U. Schatzschneider, S. D. Köster, D. Siebler, T. Weyhermüller, N. Metzler-Nolte, *Inorg. Chim. Acta* **362** (2009) 894-906. A systematic evaluation of different hydrogen bonding patterns in unsymmetrical 1,n'-disubstituted ferrocenoyl peptides
- J. E. Bandow, N. Metzler-Nolte, *ChemBioChem* **10** (2009) 2847-2850. New ways of killing the beast: Opportunities for Inorganic-Organic hybrid materials as antibiotic drugs
- N. Metzler-Nolte, U. Schatzschneider, *Bioinorganic Chemistry: A Practical Course*, de Gruyter, Berlin, **2009**, ISBN 978-3-11-020954-9.
- H. Pfeiffer, A. Rojas, J. Niesel, U. Schatzschneider, *Dalton Trans.* (2009) 4292-4298, als "Hot Article" ausgewählt. Sonogashira and "Click" reactions in the N-terminal and side chain functionalization of peptides with $[\text{Mn}(\text{CO})_3(\text{tpm})]^+$ -based CO releasing molecules (tpm = tris(pyrazolyl)-methane)
- P.C. Kunz, W. Huber, A. Rojas, U. Schatzschneider, B. Spingler, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 5358-5366. Manganese and rhenium tricarbonyl complexes of imidazol-based phosphane ligands: influence of the substitution pattern on the CO release properties
- S. Seeberg née Kraft, C. Bischof, A. Loos, S. Braun, N. Jafarova, U. Schatzschneider, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 1126-1134. A [4+2] mixed ligand approach to ruthenium DNA metallo-intercalators using a tris(2-pyridylmethyl)amine (tpa) capping ligand
- H.W. Peindy N'Dongo, I. Ott, R. Gust, U. Schatzschneider, *J. Organomet. Chem.* **694** (2009) 823-827. Microwave-assisted solid-phase synthesis, cellular uptake, and cytotoxicity studies of cymantrene-peptide bioconjugates
- M. Jung, A. Sharma, D. Hinderberger, S. Braun, U. Schatzschneider, E. Rentschler, *Inorg. Chem.* **48** (2009) 7244-7250. Long-distance magnetic interaction of exchange-coupled copper dimers with nitronyl nitroxide and tert-butyl nitroxide radicals
- M. Jung, A. Sharma, D. Hinderberger, S. Braun, U. Schatzschneider, E. Rentschler, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 1495-1502. Nitronyl Nitroxide Radicals Linked to Exchange-Coupled Metal Dimers - Studies Using X-ray Crystallography, Magnetic Susceptibility Measurements, EPR Spectroscopy, and DFT Calculations
- M. Seitz, K. Do, A. J. Ingram, E. G. Moore, G. Muller, K. N. Raymond, *Inorg. Chem.* **48** (2009), 8469-8479. Circularly Polarized Luminescence in Enantiopure Europium and Terbium Complexes with Modular, All-Oxygen Donor Ligands.
- C. A. Schall, M. Seitz, A. Kaiser, O. Reiser, in "Activating Unreactive Substrates: The Role of Secondary Interactions" (C. Bolm, F. E. Hahn, Eds.), 2009, ISBN: 978-3-527-31823-0. Pentacoordinating bis(oxazoline) ligands with secondary binding sites.
- M. Rohe, K. Merz, M. Muhler, *Ger. Offen.* (**2009**), DE 102008011337 A1 20090917, Single-component precursors for precious metal/titanium dioxide materials
- P. Nockemann, K. Binnemans, B. Thijs, T. Parac-Vogt, K. Merz, A.-V. Mudring, *Journal of Physical Chemistry. B* **113(5)** (**2009**), , 1429-37. Menon Preethy Chirukandath; Rajesh Ravindran Nair Temperature-driven mixing-demixing behavior of binary mixtures of the ionic liquid choline bis(trifluoromethylsulfonyl)imide and water
- K. Richter, T. Bäcker, A.-V. Mudring, *Chem. Commun.* (2009) 301. Facile, environmentally friendly fabrication of porous silver monoliths using the ionic liquid N-(2-hydroxyethyl)ammonium formate.
- T. Alammar, A.-V. Mudring, *Mat. Lett.* **63** (2009) 732. Facile ultrasound-assisted synthesis of ZnO nanorods in an ionic liquid.

- T. Alammar, A.-V. Mudring, *J. Mat. Sci.* **44** (2009) 3218. Facile preparation of Ag/ZnO nanoparticles via photoreduction.
- S. Tang, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* **9** (2009) 1145. Two cyano functionalized cadmium-containing ionic liquids.
- T. Timofte, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **635** (2009) 840. A Systematic Study on the Crystal Structures of TlMX_4 ($\text{M} = \text{Al, Ga}$; $\text{X} = \text{Cl, Br, I}$).
- A. Getsis, A.-V. Mudring, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **635** (2009), 2214. Structural and Thermal Behaviour of the Pyrrolidinium Based Ionic Liquid Crystals $[\text{C}_{10}\text{mpyr}]\text{Br}$ and $[\text{C}_{12}\text{mpyr}]\text{Br}$.
- T. Alammar, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* **19** (2009), 2765. Ultrasound assisted synthesis of CuO nanorods in a neat room temperature ionic liquid.
- S. Tang, A.-V. Mudring, *Cryst. Growth & Des.* **9** (2009) 2549. The Missing Link Crystallized from the Ionic Liquid 1-Ethyl-3-methylammonium tosylate: Bis-aqua-(p-toluenesulfonato-O)-europium(III)-bis-p-toluenesulfonate dihydrate,
- S. Tang, A.-V. Mudring, *Eur. J. Inorg. Chem.* **19** (2009), 2769. Terbium- β -diketonate based highly luminescent soft materials.
- T. Timofte, S. Bremm, A.-V. Mudring, G. Meyer, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **635** (2009) 1890. $(\text{NH}_4)[\text{GaCl}_4]$ and $(\text{NH}_4)[\text{InCl}_4]$ Revisited.
- T. Alammar, A.-V. Mudring, *J. Mat. Sci.* **44** (2009) 3218 . Facile Preparation of Ag/ZnO Nanoparticles via Photoreduction.
- A. Ispas, M. Buschbeck, S. Pitula, A.-V. Mudring, M. Uhlemann, A. Bund, F. Endres, *ECS Transactions* **16** (2009), 16, 119. Electrodeposition of Co, Sm and Co-Sm Thin Layers.
- A. Getsis, B. Balcke, C. Felser, A.-V. Mudring, *Crystal Growth & Design* **9** (2009), 4429. Luminescent, magnetic and liquid crystalline behavior of $[\text{C}_{12}\text{mim}]_3[\text{DyBr}_6]$ and structural characterisation of $[\text{C}_{12}\text{mim}]_3[\text{DyBr}_6] \cdot 2\text{CH}_3\text{CN}$.
- S.F. Tang, J. Cybinska, A.-V. Mudring, *Helv. Chim. Acta* **92** (2009) 2375. Luminescent soft material: two new europium-based ionic liquids.
- X. Wang, F. W. Heinemann, M. Yang, B. Melcher, M. Fekete, A.-V. Mudring, P. Wasserscheid, K. Meyer, *Chem. Commun.* (2009), 7405. Double alkyl-substituted, liquid crystalline imidazolium ionic liquids – new structural features, viscosity effects and thermal properties.
- Ch. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring: Rhombic YbF_3 and $\text{GdF}_3\text{:Yb}^{3+}$ nanoparticles synthesized in ionic liquids, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009) P04-08-122 (ISBN 978-3-941372-02-3).
- N.v. Prondzinski, A.-V. Mudring: Luminescent lanthanide nanoparticles via metal vapour synthesis in ionic liquids, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009) P04-09-120 (ISBN 978-3-941372-02-3).
- M. Kappels, A.-V. Mudring: Lanthanide-containing Ionic Liquid Crystals, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009) P04-10-119 (ISBN 978-3-941372-02-3).
- S. Tang, A.-V. Mudring: A sweet luminescent ionic liquid, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, **2009**, P04-10-120 (ISBN 978-3-941372-02-3).

- Ch. Lorbeer, J. Cybinska, A.-V. Mudring: Spectroscopic properties of $\text{GdF}_3\text{:Eu}^{3+}$ nanocrystals synthesized via microwave synthesis in ionic liquids, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009) P04-08-194 (ISBN 978-3-941372-02-3).
- J. Cybinska, A.-V. Mudring, G. Meyer: IR and Vis emission of K_2LnCl_5 ($\text{Ln}=\text{Gd}, \text{La}$) crystals doped by Tb^{3+} and Yb^{3+} ions, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009) P04-08-194 (ISBN 978-3-941372-02-3).
- B. Mallick, J. Cybinska, A.-V. Mudring: Luminescent and structural behaviour of copper(I)-doped rare earth containing ionic liquids, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009), P04-10-311 (ISBN 978-3-941372-02-3).
- N. Herzmann, A.-V. Mudring, G. Meyer, Programme and Abstracts of the 7th International Conference on f Elements (7 ICfE), incorporating XXII. Tage der Seltenen Erden - Terrae Rarae 2009, (2009) P07-22-304 (ISBN 978-3-941372-00-9). Seven-Coordinate Ruthenium in the New Praseodymium Cluster Chloride $\{\text{RuPr}_3\}\text{Cl}_3$.

Anorganische Chemie 2

- A. P. Milanov, T. B. Thiede, A. Devi, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 17062-17063. Homoleptic Gadolinium Guanidinate: A Single Source Precursor for Metal-organic Chemical Vapor Deposition of Gadolinium Nitride Thin Films
- A. P. Milanov, T. Toader, H. Parala, D. Barreca, A. Gasparotto, C. Bock, H. W. Becker, D. K. Ngwashi, R. Cross, S. Paul, U. Kunze, R. A. Fischer, A. Devi, *Chem. Mat.* **21** (2009) 5443-5455. Lanthanide Oxide Thin Films by Metalorganic Chemical Vapor Deposition Employing Volatile Guanidinate Precursors
- T. Cadenbach, T. Bollermann, C. Gemel, M. Tombul, I. Fernandez, M. von Hopffgarten, G. Frenking, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 16063-16077. Molecular Alloys, Linking Organometallics with Intermetallic Hume-Rothery Phases: The Highly Coordinated Transition Metal Compounds $[\text{M}(\text{ZnR})_n]$ ($n \geq 8$) Containing Organo-Zinc Ligands
- D. Bekermann, D. Barreca, A. Gasparotto, H. W. Becker, R. A. Fischer, A. Devi, *Surf. Coat. Technol.* **204** (2009) 404-409. Investigation of niobium nitride and oxy-nitride films grown by MOCVD
- A. Rittermeier, S. J. Miao, M. K. Schroter, X. N. Zhang, M. W. E. van den Berg, S. Kundu, Y. M. Wang, S. Schimpf, E. Löffler, R. A. Fischer, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11** (2009) 8358-8366. The formation of colloidal copper nanoparticles stabilized by zinc stearate: one-pot single-step synthesis and characterization of the core-shell particles
- R. A. Fischer, C. Woll, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **48** (2009) 6205-6208. Layer-by-Layer Liquid-Phase Epitaxy of Crystalline Coordination Polymers at Surfaces
- F. Schroder, S. Henke, X. N. Zhang, R. A. Fischer, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 3131-3140. Simultaneous Gas-Phase Loading of MOF-5 with Two Metal Precursors: towards Bimetallics@MOF
- M. Meilikhov, K. Yusenko, R. A. Fischer, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 9644-9645. Turning MIL-53(Al) Redox-Active by Functionalization of the Bridging OH-Group with 1, 1'-Ferrocenediyl-Dimethylsilane

- G. Prabusankar, C. Gemel, P. Parameswaran, C. Flener, G. Frenking, R. A. Fischer, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **48** (2009) 5526-5529. A Short Bi = Bi Bond Supported by a Metalloid Group 13 Ligand
- G. Bandoli, D. Barreca, A. Gasparotto, R. Seraglia, E. Tondello, A. Devi, R. A. Fischer, M. Winter, E. Fois, A. Gambae, G. Tabacchi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11** (2009) 5998-6007. An integrated experimental and theoretical investigation on Cu(hfa)₂·TMEDA: structure, bonding and reactivity
- O. Shekhah, H. Wang, D. Zacher, R. A. Fischer, C. Woll, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **48** (2009) 5038-5041. Growth Mechanism of Metal-Organic Frameworks: Insights into the Nucleation by Employing a Step-by-Step Route
- B. H. Lee, J. K. Hwang, J. W. Nam, S. U. Lee, J. T. Kim, S. M. Koo, A. Baunemann, R. A. Fischer, M. M. Sung, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **48** (2009) 4536-4539. Low-Temperature Atomic Layer Deposition of Copper Metal Thin Films: Self-Limiting Surface Reaction of Copper Dimethylamino-2-propoxide with Diethylzinc
- C. H. Liang, W. Xia, M. van den Berg, Y. M. Wang, H. Soltani-Ahmadi, O. Schluter, R. A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Mat.* **21** (2009) 2360-2366. Synthesis and Catalytic Performance of Pd Nanoparticle/Functionalized CNF Composites by a Two-Step Chemical Vapor Deposition of Pd(allyl)(Cp) Precursor
- T. Cadenbach, C. Gemel, T. Bollermann, R. A. Fischer, *Inorg. Chem.* **48** (2009) 5021-5026. Syntheses and Crystal Structures of Ruthenium and Rhodium Olefin Complexes Containing GaCp
- D. Zacher, O. Shekhah, C. Woll, R. A. Fischer, *Chem. Soc. Rev.* **38** (2009) 1418-1429. Thin films of metal-organic frameworks
- T. Cadenbach, C. Gemel, R. Schmid, M. Halbherr, K. Yussenko, M. Cokoja, R. A. Fischer, *Angew. Chem.-Int. Edit.* **48** (2009) 3872-3876. Substituent-Free Gallium by Hydrogenolysis of Coordinated GaCp*: Synthesis and Structure of Highly Fluxional [Ru₂(μ-Ga)(GaCp*)₇(H)₃]
- O. Shekhah, H. Wang, M. Paradinas, C. Ocal, B. Schupbach, A. Terfort, D. Zacher, R. A. Fischer, C. Woll, *Nat. Mater.* **8** (2009) 481-484. Controlling interpenetration in metal-organic frameworks by liquid-phase epitaxy
- M. Hellwig, K. Xu, D. Barreca, A. Gasparotto, M. Winter, E. Tondello, R. A. Fischer, A. Devi, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 1110-1117. Novel Gallium Complexes with Malonic Diester Anions as Molecular Precursors for the MOCVD of Ga₂O₃ Thin Films
- D. Esken, X. Zhang, O. I. Lebedev, F. Schroder, R. A. Fischer, *J. Mater. Chem.* **19** (2009) 1314-1319. Pd@MOF-5: limitations of gas-phase infiltration and solution impregnation of [Zn₄O(bdc)₃]_x (MOF-5) with metal-organic palladium precursors for loading with Pd nanoparticles
- D. Zacher, J. N. Liu, K. Huber, R. A. Fischer, *Chem. Commun.* (2009) 1031-1033. Nanocrystals of [Cu₃(btc)₂] (HKUST-1): a combined time-resolved light scattering and scanning electron microscopy study
- T. Bollermann, A. Puls, C. Gemel, T. Cadenbach, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2009) 1372-1377. Reactions of cationic transition metal acetonitrile complexes [M(CH₃CN)_n]^(m+) with GaCp*: novel gallium complexes of iron, cobalt, copper and silver
- M. Meilikhov, K. Yussenko, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2009) 600-602. The adsorbate structure of ferrocene inside [Al(OH)(bdc)]_x (MIL-53): a powder X-ray diffraction study
- R. Pothiraja, A. Milanov, H. Parala, M. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *Dalton Trans.* (2009) 654-663. Monomeric malonate precursors for the MOCVD of HfO₂ and ZrO₂ thin films

- G. Bandoli, D. Barreca, A. Gasparotto, C. Maccato, R. Seraglia, E. Tondello, A. Devi, R. A. Fischer, M. Winter, *Inorg. Chem.* **48** (2009) 82-89. A Cobalt(II) Hexafluoroacetylacetonate Ethylenediamine Complex As a CVD Molecular Source of Cobalt Oxide Nanostructures
- T. Cadenbach, T. Bollermann, C. Gemel, R. A. Fischer, *Dalton Trans.* (2009) 322-329. Synthesis and structure of electron rich ruthenium polyhydride complexes and clusters containing AlCp* and GaCp*
- R. Pothiraja, A. Milanov, D. Barreca, A. Gasparotto, H. W. Becker, M. Winter, R. A. Fischer, A. Devi, *Chem. Commun.* **15** (2009) 1978-80. Hafnium carbamates and ureates: new class of precursors for low-temperature growth of HfO₂ thin films
- T. A. Mih, S. Paul, A. P. Milanov, R. Bhakta, A. Devi, *ECS Transactions* **25** (2009) 901-907. Capacitance-Voltage Analysis of ZrO₂ Thin films deposited by MOCVD techniques
- A. Gasparotto, D. Barreca, A. Devi, R. A. Fischer, E. Fois, A. Gamba, C. Maccato, R. Seraglia, G. Tabacchi, E. Tondello, *ECS Transactions* **25** (2009) 549-556. Innovative M(hfa)₂TMEDA (M=Cu, Co) Precursors for the CVD of Copper-Cobalt Oxides: An integrated theoretical and experimental approach
- K. Xu, A. P. Milanov, A. Devi, *ECS Transactions* **25** (2009) 625-631. Tuning the thermal properties of hafnium precursors by tailoring the ligand
- M. Hellwig, K. Xu, D. Barreca, A. Gasparotto, B. Niermann, J. Winter, H. W. Becker, D. Rogalla, R. A. Fischer, A. Devi, *ECS Transactions* **25** (2009) 617-624. MOCVD of gallium oxide thin films using homoleptic gallium complexes: Precursor evaluation and thin film characterization
- P. Milanov, T. Thiede, M. Hellwig, H. Parala, C. Bock, H.-W. Becker, D. K. Ngwashi, R. B. M. Cross, S. Paul, U. Kunze, R. A. Fischer, A. Devi, *ECS Transactions* **25** (2009)
- S. Amirjalayer, R. Schmid, *Micropor. Mesopor. Mater.* **125** (2009) 90-96. Mechanism of benzene diffusion in MOF-5: A molecular dynamics investigation
- M. Tafipolsky, S. Amirjalayer, R. Schmid, *Micropor. Mesopor. Mater.* **129** (2010) 304-318, Published online July 2009 DOI://10.1016/j.micromeso.2009.07.006. Atomistic Theoretical Models for Nanoporous Hybrid Materials
- M. Tafipolsky, R. Schmid, *J. Chem. Theory Comput.* **5** (2009), 2822–2834. A consistent force field for the carboxylate group.

Organische Chemie 1

- R.M. Fuchsli, T. Maeke, J.S. McCaskill, *Eur. Phys. J.E.* **29** (2009) 413-448. Spatially resolved simulation of membrane reactions and dynamics: Multipolar reaction DPD DOI 10.1140/epje/i2009-10482-x
- M.A. Bedau, E.C. Parke, U. Tange, B. Hantsche-Tange, *Syst. Synth. Biol.* **3** (2009) 65-75 Social and ethical checkpoints for bottom-up synthetic biology, or protocells DOI 10.1007/s11693-009-9039-2
- A. A. Grauer, C. Cabrele, M. Zabel, B. König, *J. Org. Chem.* **74** (2009) 3718-3726. Stable right- and left-handed peptide helices containing C α -tetrasubstituted α -amino acids
- S. Pellegrino, N. Ferri, N. Colombo, E. Cremona, A. Corsini, R. Fanelli, M. L. Gelmi, C. Cabrele, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **19** (2009) 6298-6302. 30. Synthetic peptides containing a conserved sequence motif of the Id protein family modulate vascular smooth muscle cell phenotype

Organische Chemie 2

- M. Pillekamp, A. Aniol, J. Heppekausen, S. Neukirchen, S. Seel, I. M. Oppel, G. Dyker, *Synlett* 2009, 133-137. Palladium-catalyzed four-membered ring annelation reactions at dibenzobarrelene.
- M. Pillekamp, W. Alachraf, I. M. Oppel, G. Dyker, *J. Org. Chem.* **74** (2009), 8355-8358. Cage Hydrocarbons Derived from Dibenzosuberone.
- M. Mastalerz, I. M. Oppel, K. Merz, G. Dyker, *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry* **64** (2009), 157-161. Tetrapyrrodoxycalix[4]arene and its copper(II) complex: An ionic crystal engineering tecton for self-inclusion polymers.
- X. Zeng, H. Beckers, H. Willner, P. Neuhaus, D. Grote, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **15** (2009) 13466 – 13473. Difluorophosphoryl Nitrene F₂P(O)N: Matrix Isolation and Unexpected Rearrangement to F₂PNO.
- T. Wagner, J. Lange, D. Grote, W. Sander, E. Schaumann, G. Adiwidjaja, A. Adam, J. Kopf, *Eur. J. Org. Chem.* **30** (2009) 5198 - 5207. Organyltio(silyl)carbenes.
- D. Grote, W. Sander, *J. Org. Chem.* **74** (2009), 7370 - 7382. Photochemistry of Fluorinated 4-Iodophenylnitrenes: Matrix Isolation and Spectroscopic Characterization of Phenylnitrene-4-yls.
- S. V. Chapyshev, E. Y. Misochko, A. V. Akimov, V. G. Dorokhov, P. Neuhaus, D. Grote, W. Sander, *J. Org. Chem.* **74** (2009), 7238-7244. Molecular Structure and Magnetic Parameters of Septet 2,4,6-Trinitrotoluene.
- A. Mardyukov, E. Sanchez-Garcia, R. Crespo-Otero, W. Sander. *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009), 4804-4807. Interaction and Reaction of the Phenyl Radical with Water: A Source of OH Radicals.
- A. Mardyukov, W. Sander, *Chem. Eur. J.* **15** (2009), 1462 - 1467. Matrix isolation and spectroscopic characterization of the phenylperoxy radical and its rearranged products
- A. Mardyukov, E. Sanchez-Garcia, W. Sander, *J. Phys. Chem. A*, **113** (2009), 1086-1095. Matrix Isolation and Ab Initio Study of the Noncovalent Complexes between Formamide and Acetylene.

Physikalische Chemie 1

- M. Egerer, T. Giesemann, C. Herrmann, K. Aktories, *J. Biol. Chem.* **284** (2009) 3389-3395. Auto-catalytic processing of clostridium difficile toxin B - binding of inositol hexakisphosphate
- M. Hothorn, H. Neumann, E. D. Lenherr, M. Wehner, V. Rybin, P. O. Hassa, A. Uttenweiler, M. Reinhardt, A. Schmidt, J. Seiler, A. G. Ladurner, C. Herrmann, K. Scheffzek, A. Mayer, *Science* **324** (2009) 513-516. Catalytic core of a membrane-associated eukaryotic polyphosphate polymerase
- T. Vöpel, S. Kunzelmann, C. Herrmann, *FEBS Letters* **583** (2009) 1923-1927. Nucleotide dependent cysteine reactivity of hGBP1 uncovers a domain movement during GTP hydrolysis
- N. Albet-Torres, M. J. Bloemink, T. Barman, R. Candau, K. Frölander, M. A. Geeves, K. Golker, C. Herrmann, C. Lionne, C. Piperio, S. Schmitz, C. Veigel, A. Månsson, *J. Biol. Chem.* **284** (2009) 22926-22937. Drug effect unveils inter-head cooperativity and strain-dependent ADP release in fast skeletal actomyosin
- S. Köster, M. Wehner, C. Herrmann, W. Kühlbrandt, O. Yildiz, *J. Mol. Biol.* **392** (2009) 405-419. Structure and Function of the FeoB G-Domain from *Methanococcus jannaschii*

- A. Brockmeier, M. Skopnik, B. Koch, C. Herrmann, W. Hengstenberg, S. Welti, K. Scheffzek, *Biochem. Biophys. Res. Comm.* **388** (2009) 630-636. Activity of the *Enterococcus faecalis* EIIA(gnt) PTS component and its strong interaction with EIIB(gnt)
- C. Kiel, D. Filchtinski, M. Spoerner, G. Schreiber, H. R. Kalbitzer, C. Herrmann, *J. Biol. Chem.* **284** (2009) 31893-31902. Improved binding of Raf to Ras-GDP is correlated with biological activity
- B. A. Ford, S. Boykevisch, C. Zhao, S. Kunzelmann, D. Bar-Sagi, C. Herrmann, N. Nassar, *Biochemistry* **48** (2009) 11449-11457. Characterization of a Ras mutant with identical GDP- and GTP-bound structures

Physikalische Chemie 2

- B. Born, S.J. Kim, S. Ebbinghaus, M. Gruebele, M. Havenith, *Faraday Discussion* **141** (2009) 161-173. The Terahertz dance of water with the proteins: The effect of protein flexibility on the dynamical hydration shell of ubiquitin. Also selected for RSC's Chemical Biology Research Articles virtual journal one of the Top 10 most downloaded articles in July 2009
- E. Bründermann, B. Born, S. Funkner, M. Krüger, M. Havenith, *Proc. SPIE* **7215** (2009) 72150E-72158E. Terahertz spectroscopic techniques for the study of proteins in aqueous solutions.
- E. Bründermann, I. Kopf, M. Havenith, *Proc. SPIE* **7188** (2009) 71880I-71888I. Chemical nanoscopy of cell-like membranes
- B. Born, H. Weingärtner, E. Bründermann, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (10) (2009) 3752-3755. Solvation dynamics of model peptides probed by Terahertz spectroscopy-observation of the onset of collective network motions.
- Ö. Birer, M. Havenith, *Annual Rev. Physical Chemistry* **60** (2009) 263-275. High resolution infrared spectroscopy of formic acid dimer.
- J.-S. Samson, R. Meißner, E. Bründermann, M. Böke, J. Winter, M. Havenith, *J. of Applied Physics* **105** (6) (2009) 064908/1-064908/7. Characterization of single diamond-like and polymer-like nanoparticles by mid-infrared nanospectroscopy.
- A. Gutberlet, G. Schwaab, Ö. Birer, M. Masia, A. Kaczmarek, H. Forbert, M. Havenith, D. Marx, *Science* **324** (2009) 1545-1548. Aggregation induced dissociation of HCl (H₂O)₄ below 1 K: The smallest droplet of acid See also: Chemistry world news: Smallest acid droplet formed, 23.06.09 Chemistry: The tiniest acid drop, *Nature* **459** (2009) 1036. Perspective: Timothy S. Zwier, Squeezing the Water Out of HCl(aq), *Science* **324** (2009) 1522.
- B. Born, M. Havenith, *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves* **30** (12) (2009) 1245-1254. Terahertz dance of proteins and sugars with water.
- D.A. Schmidt, Ö. Birer, S. Funkner, B. Born, R. Gnanasekaran, G. Schwaab, D. M. Leitner, M. Havenith, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (51) (2009) 18512-18517. Rattling in the cage: ions as probes of sub-ps water network dynamics.
- B. Born, H. Weingärtner, E. Bründermann, et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **131**(10) (2009) 3752-3755. Solvation Dynamics of Model Peptides Probed by Terahertz Spectroscopy. Observation of the Onset of Collective Network Motions
- T. Vasiltsova, A. Heintz, H. Nadolny, et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**(14) (2009) 2408-2419. Application of a new statistical mechanical model for calculating Kirkwood factors in self associating liquid systems to alkanol + CCl₄ mixtures
- H. Weingärtner, *J. Chem. Eng. Data* **54**(5) (2009) 1625-1627. Electrical Conductance of Hydrogen Chloride in Oxygen-18 Water at 298.15 K

- Y. Ajaj, M. Wehner, H. Weingärtner, *Z. Phys. Chem.* **223**(9) (2009) 1105-1118. Myoglobin and Apomyoglobin in their Native, Molten Globule and Acid-Denaturated States. A Dielectric Relaxation Study
- D. Constantinescu, C. Herrmann, H. Weingärtner, In: *Ionic Liquids. From Knowledge to Application*. Ed.: R.D. Rogers; N.V. Plechkova; K.S. Seddon, *ACS Symposium Series*, American Chemical Society (2009) 107-117. Protein Denaturation by Ionic Liquids and the Hofmeister Series

Analytische Chemie

- M. Dobroschke, Y. Geldmacher, I. Ott, M. Harlos, L. Kater, L. Wagner, R. Gust, W. S. Sheldrick, A. Prokop, *ChemMedChem* **4** (2009) 177 - 187. Cytotoxic Rhodium(III) and Iridium(III) Polypyridyl Complexes: Structure-Activity Relationships, Antileukemic Activity and Apoptosis Induction.
- O. Hohage, S. Manka, W. S. Sheldrick, *Inorg. Chim. Acta* **362** (2009) 953 - 966. Downstream reaction of cisplatin with methionine-containing peptides: pH dependent competition between hydrolytic cleavage and macrochelation.
- A. Kromm, W. S. Sheldrick, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **635** (2009) 205 - 207. Manganese(II) complexes with bridging selenidoarsenate(III) anions $[\text{AsSe}_2(\text{Se}_2)]^{3-}$ and $[(\text{AsSe}_2)_2(\mu\text{-Se}_2)]^{4-}$.
- I. Ott, B. Kircher, C. Bagowski, D. H. W. Vlecken, E. Ott, J. Will, W. S. Sheldrick, R. Gust, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009) 1160 - 1163. Modulation of the biological properties of aspirin by formation of a bioorganometallic derivative.
- I. Ott, X. Qian, Y. Xu, D. Kubutat, J. Will, W. S. Sheldrick, P. Jesse, A. Prokop, C. Bagowski, *J. Med. Chem.* **52** (2009) 763 - 770. A gold(I) phosphine complex containing a naphthalimide ligand functions as a TrxR inhibiting antiproliferative agent and angiogenesis inhibitor.
- T. M. Kolev, B. B. Koleva, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Amino Acids* **36** (2009) 185 - 193. Synthesis, spectroscopic and structural elucidation of sympathomimetic amine, tyraminium dihydrogenphosphate.
- T. M. Kolev, B. B. Koleva, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, H. Mayer-Figge, *Amino Acids* **36** (2009) 195 - 201. Synthesis, spectroscopic and structural elucidation of tyrosinamide hydrogensquarate monohydrate.
- R. Bieda, I. Ott, M. Dobroschke, A. Prokop, R. Gust, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 698 - 708. Structure-activity relationships and DNA binding properties of apoptosis inducing cytotoxic rhodium(III) polypyridyl complexes containing the cyclic thioether [9]aneS3.
- A. Hille, I. Ott, A. Kitanovic, I. Kitanovic, H. Alborzinia, E. Lederer, S. Wölfl, S. Schäfer, W. S. Sheldrick, C. Bischof, U. Schatzschneider, R. Gust, *J. Biol. Inorg. Chem.* **14** (2009) 711 - 725. [N,N'-Bis(salicylidene)-1,2-phenylenediamine]metal complexes with cell death promoting properties.
- B. B. Koleva, T. Kolev, R. W. Seidel, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *J. Phys. Chem. A* **113** (2009) 3088 - 3095. Self-assembly of hydrogensquarates - crystal structures and properties.
- A. Kumar, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, N. Singh, *Eur. J. Inorg. Chem.* **18** (2009) 2720 - 2725. Synthesis, structure, conductivity and calculated non-linear optical properties of two novel bis(trisphenylphosphane)copper(I) dithiocarbamates.

- R. Bieda, I. Ott, R. Gust, W. S. Sheldrick, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 3821 - 3831. Cytotoxic rhodium(III)polypyridyl complexes containing the tris(pyrazolyl)methane coligand: synthesis, DNA binding properties and structure-activity relationships.
- T. Kolev, T. Tsanev, S. Kotov, H. Mayer-Figge, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, B. B. Koleva, *Dyes and Pigments* **82** (2009) 95 - 101. Analyses of 4-benzoyl pyridine - crystal structure and spectroscopic properties.
- Mhd. A. Nazif, J.-A. Bangert, I. Ott, R. Gust, R. Stoll, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 1405 - 1414. Dinuclear organoiridium(III) mono- and bis-intercalators with rigid bridging ligands: synthesis, cytotoxicity and DNA binding.
- I. N. Pantcheva, R. Zhorova, M. I. Mitewa, W. S. Sheldrick, *Insights into Coordination, Bioinorganic and Applied Inorganic Chemistry* (Eds. M. Melnik, P. Segl'a, M. Tatarko), *Volume 9*, Press of the Slovak University of Technology, Bratislava (2009) 257 - 268. Divalent metal complexes of the monovalent polyether ionophorous antibiotic monensin.
- T. Kolev, R. Bakalska, R. W. Seidel, H. Mayer-Figge, I. M. Oppel, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, B. B. Koleva, *Tetrahedron Asymmetry* **20** (2009) 327 - 334. Novel codeinone derivatives via Michael addition of barbituric acids.
- T. Kolev, B. B. Koleva, R. Seidel, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, *Cryst. Growth & Design* **9** (2009) 3348 - 3352. New aspects on the origin of the colour in the solid-state. Coherently shifting of the protons in violurate crystals.
- I. N. Pantcheva, P. Dorkov, M. Mitewa, V. Atanasov, B. L. Shivachev, R. P. Nikolova, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 1419 - 1424. Crystal structure and properties of the copper(II) complex of sodium monesin A.
- B. B. Koleva, R. Nikolova, S. Zareva, T. Kolev, R. W. Seidel, H. Mayer-Figge, W. S. Sheldrick, *J. Phys. Org. Chem.* **22** (2009) 726 - 734. Novel pyridyl-substituted coumarin and its perchlorate salt - crystal structure and spectroscopic properties.
- A. Ray, I. Bhowmick, W. S. Sheldrick, A. D. Jana, M. Ali, *J. Solid State Chem.* **182** (2009) 2608 - 2612. 2D water layer enclathrated between Mn(II)-Ni(CN)₄ coordination frameworks.
- B. B. Koleva, R. Nikolova, T. Kolev, H. Mayer-Figge, M. Spiteller, W. S. Sheldrick, *Spectrochimica Acta A Mol. Biol. Spectrosc.* **73** (2009) 72 - 78. Hydrogensquarates of 3-nicotinoyl and 3-isonicotinoyl coumarin - crystal structures and spectroscopic elucidation.
- B. B. Koleva, R. W. Seidel, T. Kolev, S. Zareva, H. Mayer-Figge, I. M. Oppel, W. S. Sheldrick, *J. Mol. Struct.* **921** (2009) 163 - 171. Hydrogenoxalate and squarate salts of (E)-4-(hydroxyiminomethyl)-pyridine - crystal structure, spectroscopic and theoretical elucidation.
- Y. Chen, W. Schuhmann, A. W. Hassel, *Electrochem. Commun.* **11** (2009) 2036-2039. Electrocatalysis on gold nanostructures: Is the {110} facet more active than the {111} facet?
- D. A. Guschin, H. Shkil, W. Schuhmann, *Anal. Bioanal. Chem.* **395** (2009) 1693-1706. Electrodeposition polymers as immobilization matrices in amperometric biosensors. Improved polymer synthesis and biosensor fabrication
- T. C. Nagaiah, A. Maljusch, X. Chen, M. Bron, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **10** (2009) 2711-2718. Visualization of the local catalytic activity of electrodeposited Pt-Ag catalysts for oxygen reduction by means of SECM
- C. Jin, W. Xia, T. C. Nagaiah, J. Guo, X. Chen, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Electrochim. Acta* **54** (2009) 7186-7193. On the role of the thermal treatment of sulfided Rh/CNT catalysts applied in the oxygen reduction reaction

- X. Chen, K. Eckhard, M. Zhou, M. Bron, W. Schuhmann *Anal. Chem.* **81** (2009) 7597-7603. Electrocatalytic activity of spots of electrodeposited noble-metal catalysts on carbon nanotubes modified glassy carbon
- H. Shkil, L. Stoica, K. Dmytruk, O. Smutok, M. Gonchar, A. Sibirny, W. Schuhmann, *Bioelectrochem.* **76** (2009) 175-179. Bioelectrochemical detection of L-lactate respiration using genetically modified *Hansenula polymorpha* yeast cells overexpressing flavocytochrome b2
- R. Lei, L. Stratmann, D. Schäfer, T. Erichsen, S. Neugebauer, N. Li, W. Schuhmann, *Anal. Chem.* **81** (2009) 5070–5074. Imaging biocatalytic activity of enzyme-polymer spots by means of combined scanning electrochemical microscopy (SECM)/ electrogenerated chemiluminescence (ECL)
- S. Kundu, T. C. Nagaiah, W. Xia, Y. Wang, S. Dommele, J. Bitter, M. Santa, G. Grundmeier, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *J. Phys. Chem. C* **113** (2009) 14302-14310. Electrocatalytic activity and stability of nitrogen-containing carbon nanotubes in the oxygen reduction reaction
- A. Okunola, T. Chikka Nagaiah, X. Chen, K. Eckhard, W. Schuhmann, M. Bron, *Electrochim. Acta* **54** (2009) 4971–4978. Visualization of local electrocatalytic activity of metalloporphyrins towards oxygen reduction by means of redox competition scanning electrochemical microscopy (RC-SECM)
- B. Ngounou, D. A. Guschin, J. Castillo, W. Schuhmann, *ECS Trans.* **19** (2009) 119-128. Combinatorial polymer synthesis as a tool in biosensor and biofuel cell development and optimization
- S. Schwamborn, L. Stoica, S. Neugebauer, T. Reda, H.-L. Schmidt, W. Schuhmann, *ChemPhysChem* **10** (2009) 1066 – 1070. Local modulation of the redox state of p-nitrothiophenol self-assembled monolayers using the direct mode of scanning electrochemical microscopy
- D. Brunert, S. Kurtenbach, S. Isik, H. Benecke, G. Gisselmann, W. Schuhmann, H. Hatt, C. H. Wetzel, *PLoS ONE* **4** (2009) e5499. Odorant-dependent generation of nitric oxide in mammalian olfactory sensory neurons [08-PONE-RA-06132R2]
- S. Neugebauer, A. Zimdars, P. Liepold, M. Gębala, W. Schuhmann, G. Hartwich, *ChemBioChem* **10** (2009) 1193-1199. An electrochemical DNA assay for salmonella spp. optimization, scanning electrochemical microscopy studies and amplification.
- M. Bron, W. Xia, X. Chen, C. Jin, S. Kundu, T. C. Nagaiah, R. Chetty, T. Schilling, N. Li, W. Schuhmann, M. Muhler *Chemie Ingenieur Technik* **81** (2009) 581-589. Elektrokatalyse in Brennstoffzellen und Elektrolyseuren: Kohlenstoff-Nanoröhren-basierte Katalysatoren und neuartige Untersuchungsmethoden.
- R. Chetty, S. Kundu, W. Xia, M. Bron, W. Schuhmann, V. Chirila, W. Brandl, T. Reinecke, M. Muhler, *Electrochim. Acta* **54** (2009) 4208–4215. PtRu nanoparticles supported on nitrogen-doped multiwalled carbon nanotubes as catalyst for methanol electrooxidation.
- R. Chetty, W. Xia, S. Kundu, M. Bron, T. Reinecke, W. Schuhmann, M. Muhler, *Langmuir* **25** (2009) 3853-3860 Effect of reduction temperature on the preparation and characterization of Pt-Ru nanoparticles on multiwalled carbon nanotubes.
- S. Borgmann, W. Schuhmann, in “Combinatorial Methods for Chemical and Biological Sensors” (R. A. Potyrailo, V. M. Mirsky, Eds.), 2009, XX, ISBN 978-0-387-73712-6. Robotic systems for combinatorial electrochemistry. pp 331-370.
- L. Guadagnini, A. Maljusch, X. Chen, S. Neugebauer, D. Tonelli, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **54** (2009) 3753–3758. Visualization of electrocatalytic activity of

microstructured metal hexacyanoferrates by means of redox competition mode of scanning electrochemical microscopy (RC-SECM)

- M. Gebala, L. Stoica, S. Neugebauer, W. Schuhmann, *Electroanalysis* **21** (2009) 325-331. Label-free detection of DNA hybridization in presence of intercalators using electrochemical impedance spectroscopy
- K. Eckhard, W. Schuhmann, M. Maciejewska, *Electrochim. Acta* **54** (2009) 2125-2130. Determination of optimum imaging conditions in AC-SECM using the mathematical distance between approach curves displayed in the impedance domain
- A. Okunola, B. Kowalewska, M. Bron, P. J. Kulesza, W. Schuhmann, *Electrochim. Acta* **54** (2009) 1954-1960. Electrocatalytic reduction of oxygen at electropolymerized films of metalloporphyrins deposited onto multi-walled carbon nanotubes
- L. Stoica, N. Dimcheva, Y. Ackermann, K. Karnicka, D. A. Guschin, P. J. Kulesza, J. Rogalski, D. Haltrich, R. Ludwig, L. Gorton, W. Schuhmann, *Fuel Cells* **9** (2009) 53-62. Membrane-less biofuel cell based on cellobiose dehydrogenase (anode)/laccase (cathode) wired via specific Os-redox polymers
- N. Plumeré, B. Speiser, B. Dietrich, K. Albert, J. J. Pesek and M. T. Matyska, *Langmuir* **25** (2009) 13481-13487. Thermally induced radical hydrosilylation for synthesis of C18 HPLC phases from highly condensed SiH terminated silica surfaces.
- N. Plumeré, B. Speiser, H. A. Mayer, D. Joosten and L. Wesemann, *Chemistry - A European Journal* **15** (2009) 936-946. High-temperature chlorination-reduction sequence for the preparation of silicon hydride modified silica surfaces.
- J. R. McDonough, J. W. Choi, Y. Yang, F. La Mantia, Y. Zhang, Y. Cui, *Applied Physics Letters* **95** (2009) 243109/1- 243109/3. Carbon nanofiber supercapacitors with large areal capacitances.
- L. B. Hu, J. W. Choi, Y. Yang, S. Jeong, F. La Mantia, L.F. Cui, Y. Cui, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **106** (2009) 21490-21494. Highly conductive paper for energy storage devices.
- F. La Mantia, F. Rosciano, N. Tran, P. Novák, *Journal of the Electrochemical Society* **156** (2009) A823-A827 Quantification of oxygen loss from $\text{Li}_{1.1}(\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3})_{0.9}\text{O}_2$ at high potentials by differential electrochemical mass spectrometry.
- F. La Mantia, M. Santamaria, H. Habazaki, F. Di Quarto, *ECS Transactions* **19** (2009) 411-422. The influence of thermal treatment on the electronic properties of $\alpha\text{-Nb}_2\text{O}_5$.
- F. Rosciano, J.F. Colin, F. La Mantia, N. Tran, P. Novák, *Electrochemical and Solid-State Letters* **12** (2009) A140-A144. Electrochemical stress at high potential to investigate phase transitions in $\text{Li}_{1.1}(\text{Ni}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{Co}_{1/3})_{0.9}\text{O}_2$.
- S.H. Ng, F. La Mantia, P. Novák, *Angewandte Chemie - International Edition* **48** (2009) 528-532. A multiple-working-electrode electrochemical cell: a novel tool for current density distribution study.
- T. J. Patey, A. Hintennach, F. La Mantia, P. Novák, *Journal of Power Sources* **189** (2009) 590-593. Electrode engineering of nanoparticles for lithium-ion batteries – Role of dispersion technique.
- F. Di Quarto, F. La Mantia, M. Santamaria, *Modern Aspects of Electrochemistry* Springer, (Sep 2009) 217-302. Physicochemical characterization of passive films and corrosion layers by differential admittance and photocurrent spectroscopy, Vol. 46, S. I. Pyun and J. W. Lee (Editors).

- J. Greeley, I. E. L. Stephens, A.S. Bondarenko, T. P. Johansson, H. A. Hansen, T. F. Jaramillo, J. Rossmeisl, I. Chorkendorff, J. K. Nørskov, *Nature Chem.* **1** (2009) 552-556. Alloys of platinum and early transition metals as oxygen reduction electrocatalysts.
- A.S. Bondarenko, W. Zhou, H.J.M. Bouwmeester, *J. Power Sources* **194** (2009) 843-846. Superprotonic KH(PO₃H)–SiO₂ composite electrolyte for intermediate temperature fuel cells.

Theoretische Chemie

- J. Ribas-Arino, M. Shiga, D. Marx, *Chem. Eur. J. (Communication)* **15** (2009) 13331-13335. Unravelling the Mechanism of Force-Induced Ring-Opening of Benzocyclobutenes
- E. Schreiner, N. N. Nair, D. Marx, *J. Am. Chem. Soc.* **131** (2009) 13668-13675. Peptide Synthesis in Aqueous Environments: The Role of Extreme Conditions on Peptide Bond Formation and Peptide Hydrolysis
- A. Gutberlet, G. Schwaab, Ö. Birer, M. Masia, A. Kaczmarek, H. Forbert, M. Havenith, D. Marx, *Science* **324** (2009) 1545-1548. Aggregation-Induced Dissociation of HCl(H₂O)₄ Below 1~K: The Smallest Droplet of Acid
- A. Witt, S. D. Ivanov, M. Shiga, H. Forbert, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 194510-1-194510-15. On the applicability of centroid and ring polymer path integral molecular dynamics for vibrational spectroscopy,
- M. Konopka, R. Turansky, M. Dubecky, D. Marx, I. Stich, *J. Phys. Chem. C* **113** (2009) 8878-8887. Molecular Mechanochemistry Understood at the Nanoscale: Thiolate Interfaces and Junctions with Copper Surfaces and Clusters
- J. Ribas-Arino, M. Shiga, D. Marx, *Angew. Chem. Int. Ed.* **48** (2009) 4190-4193. Understanding Covalent Mechanochemistry
- J. Kiss, A. Witt, B. Meyer, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 184706-1-184706-14. Methanol synthesis on ZnO(000-1). I. Hydrogen coverage, charge state of oxygen vacancies, and chemical reactivity
- E. C. Beret, R. R. Pappalardo, D. Marx, E. Sanchez Marcos, *ChemPhysChem* **10** (2009) 1044-1052. Characterizing Pt-Derived Anticancer Drugs from First Principles: The Case of Oxaliplatin in Aqueous Solution
- M. Kunat, F. Traeger, D. Silber, H. Qiu, Y. Wang, A. C. van Veen, Ch. Wöll, P. M. Kowalski, B. Meyer, C. Hättig, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 144703-1-144703-11. Formation of weakly bound, ordered adlayers of CO on rutile TiO₂(110): A combined experimental and theoretical study
- A. Kaczmarek, M. Shiga, D. Marx, *J. Phys. Chem. A* **113** (2009) 1985-1994. Quantum Effects on Vibrational and Electronic Spectra of Hydrazine Studied by “On-the-Fly” ab Initio Ring Polymer Molecular Dynamics
- P. M. Kowalski, B. Meyer, D. Marx, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 115410-1-115410-16. Composition, structure, and stability of the rutile TiO₂(110) surface: Oxygen depletion, hydroxylation, hydrogen migration and water adsorption
- L. A. Barrios, D. Aguila, O. Roubeau, P. Gamez, J. Ribas-Arino, S. J. Teat G. Aromi, *Chem. Eur. J.* **15** (2009) 11235-11243. Designed Topology and Site-Selective Metal Composition in Tetranuclear [MM'...M'M] Linear Complexes
- P. Rodziewicz N. L. Doltsinis, *J. Phys. Chem. A* **113** (2009) 6266-6274. Formic Acid Dimerization: Evidence for Species Diversity from First Principles Simulations

- M. Kilic, P. M. Kowalski, T. von Hippel, *Astron. J.* **138** (2009) 102. A Near-Infrared Spectroscopic Survey of Cool White Dwarfs in the SDSS: A Paradigm Shift
- M. Kilic, P. M. Kowalski, W. T. Reach, T. von Hippel, *Astrophys. J.* **696** (2009) 2094. Spitzer Observations of the Oldest White Dwarfs in the solar Neighborhood
- Y. S. Yao, D. D. Klug, J. Sun, R. Martonak, *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 055503-1-055503-4. Structural Prediction and Phase Transformation Mechanisms in Calcium at High Pressure
- J. Sun, D. D. Klug, and R. Martonak, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 194512-1-194512-7. Structural transformations in carbon under extreme pressure: Beyond diamond
- Y. Yao, J. S. Tse, J. Sun, D. D. Klug, R. Martonak, T. Iitaka, *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 229601-1-229601-1. Comment on “New Metallic Carbon Crystal”
- X. F. Zhou, J. Sun, Q. R. Qian, X. J. Guo, Z. Y. Liu, Y. J. Tian, H. T. Wang, *J. Appl. Phys.* **105** (2009) 093521-1-093521-4. A tetragonal phase of superhard BC₂N
- J. S. Smith, S. Desgreniers, J. S. Tse, J. Sun, D. D. Klug, Y. Ohishi, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 134104-1-134104-10. High-pressure structures and vibrational spectra of barium fluoride: Results obtained under nearly hydrostatic conditions
- J. Sun, D. D. Klug, R. Martonak, J. A. Montoya, M.-S. Lee, S. Scandolo, E. Tosatti, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106** (2009) 6077-6081. High-pressure polymeric phases of carbon dioxide
- M. Konopka, R. Turansky, N. L. Doltsinis, D. Marx, I. Stich, *Adv. Solid State Phys.* **48** (2009) 219-235. Organometallic Nanojunctions Probed by Different Chemistries: Thermo-, Photo-, and Mechano-Chemistry
- D. Marx and J. Hutter, *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods* (Cambridge University Press, Cambridge 2009); <http://www.cambridge.org/9780521898638> ISBN: 978-0-521-89863-8, hardback, 578 pages, 1669 references.
- J. Grotendorst, N. Attig, S. Blügel, and D. Marx, (Herausgeber), *Multiscale Simulation Methods in Molecular Sciences* (Institute for Advanced Simulation and Jülich Supercomputing Centre, Forschungszentrum Jülich 2009); ISBN: 978-3-9810843-8-2, hardback, 569 pages.
- M. B. Hansen, O. Christiansen, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **131** (2009) 154101. Automated calculation of anharmonic vibrational contributions to first hyperpolarizabilities: Quadratic response functions from vibrational configuration interaction wave functions.
- S. Shemesh, C. Hättig, W. Domcke, *Chem. Phys. Lett.* **482** (2009) 38-43. Photophysics of the Trp-Gly dipeptide: Role of electron and proton transfer processes for efficient excited-state deactivation.
- W. Klopper, R. A. Bachorz, D. P. Tew, J. Aquilera-Iparraguirre, Y. Carissan, C. Hättig, *J. Phys. Chem. A* **113** (2009) 11679-11684. Accurate Coupled Cluster Calculations of the Reaction Barrier Heights of Two CH₃· + CH₄ Reactions.
- J. Yang, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **131** (2009) 074102. Highly accurate CCSD(R12) and CCSD(F12) optical response properties using standard triple-zeta basis sets.
- T. S. Balaban, P. Braun, C. Hättig, A. Hellweg, J. Kern, W. Saenger, A. Zouni, *Biochem. Biophys. Acta-Bioenerg.* **1787** (2009) 1254-1265. Preferential pathways for light-trapping involving β -ligated chlorophylls.
- M. Kunat, F. Traeger, D. Silber, H. Qiu, Y. Wang, A. C. van Veen, C. Wöll, P. M. Kowalski, B. Meyer, C. Hättig, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 144703. Formation of

weakly bound, ordered adlayers of CO on rutile TiO₂(110): A combined experimental and theoretical study.

- J. Yang, C. Hättig, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 124101. Structures and harmonic vibrational frequencies of excited states of diatomic molecules with CCSD(R12) and CCSD(F12) models.
- G. Rossmüller, V. Kleinschmidt, J. Kossmann, C. Hättig, *J. Phys. Chem. C* **113** (2009) 1418-1425. A Density Functional Study of the Methanol Synthesis at an Oxygen Vacancy on the Polar ZnO(000-1) Surface.
- P. Mach, J. Urban, V. Staemmler, *Chem. Phys.*, **356** (2009) 164. Dissociative Electron Attachment to Methyl Chloride: A Quasi-Diatomic Potential Curve for the Fragmentation of the Metastable CH₃Cl⁻ Anion.
- W. Xu, J. Ma, D. Peng, W. Zou, W. Liu, V. Staemmler, *Chem. Phys.*, **356** (2009) 219. Excited States of ReO₄⁻: A Comprehensive Time-Dependent Relativistic Density Functional Study.
- I. Schmitt, K. Fink, V. Staemmler, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11** (2009) 11196. The Method of Local Increments for the Calculation of Adsorption Energies of Atoms and Small Molecules on Solid Surfaces. Part I. A single Cu Atom on the Polar Surfaces of ZnO
- W. Kutzelnigg, W.J. Liu, *J. Chem. Phys.* **131** (2009) 044129. Relativistic Theory of Nuclear Magnetic Resonance Parameters in a Gaussian Basis Representation.
- W. Kutzelnigg, *Int. J. Quant. Chem.* **109** (2009) 3858-3884. How Many-Body Perturbation Theory (MBPT) has changed Quantum Chemistry.

Technische Chemie

- W. Xia, J. H. Bitter, D. Su, J. Qian, M. Muhler, *Diamond & Related Materials* **18** (2009) 13-19. Iron impregnation on the amorphous shell of vapor grown carbon fibers and the catalytic growth of secondary nanofibers.
- W. Xia, C. Jin, S. Kundu, M. Muhler, *Carbon* **47** (2009) 919-922. A highly efficient gas-phase route for the oxygen functionalization of carbon nanotubes based on nitric acid vapour.
- B. M. Reddy, P. Bharali, S.-E. Park, M. Muhler, W. Grünert, *J. Phys. Chem.* **113** (2009) 2452-2462. Physicochemical Characteristics and Catalytic Activity of Alumina-Supported Nanosized Ceria-Terbium Solid Solutions.
- M. W. E. van den Berg, S. Polarz, O. P. Tkachenko, K. Kähler, M. Muhler, W. Grünert, *Catal. Lett.* **128** (2009) 49-56. Dynamical Changes in the Cu-ZnO_x Interaction Observed in a Model Methanol Synthesis Catalyst.
- R. Chetty, W. Xia, S. Kundu, M. Bron, Th. Reinecke, W. Schuhmann, M. Muhler, *Langmuir* **25** (2009) 3853-3860. Effect of Reduction Temperature on the Preparation and Characterization of Pt-Ru Nanoparticles on Multiwalled Carbon Nanotubes.
- S. Miao, R. Naumann d'Alnoncourt, Th. Reinecke, I. Kasatkin, M. Behrens, R. Schlögl, M. Muhler, *Eur. J. Inorg. Chem.* (2009) 910-921. A Study of the Influence of Composition on the Microstructural Properties of ZnO/Al₂O₃ Mixed Oxides.
- S. Kaluza, M. Muhler, *Catal. Lett.* **129** (2009) 287-292. On the Role of Aging, Washing, and Drying in the Synthesis of Polycrystalline Zinc Oxide by Precipitation: Combining Fast Continuous Mixing, Spray Drying and Freeze Drying to Unravel the Solid-State Transformations of the Precipitate.

- I. Aruna, F. E. Kruis, S. Kundu, M. Muhler, R. Theissmann, M. Spasova, *J. Appl. Phys.* **105** (2009) 064312-1 - 064312-8. CO ppb sensors based on monodispersed SnO_x : Pd mixed nanoparticle layers: Insight into dual conductance response.
- J. Strunk, K. Kähler, X. Xia, M. Comotti, F. Schüth, Th. Reinecke, M. Muhler, *Appl. Catal. A*: **359** (2009) 121-128. Au/ZnO as catalyst for methanol synthesis: The role of oxygen vacancies.
- R. Chetty, S. Kundu, W. Xia, M. Bron, W. Schuhmann, C. Chirila, W. Brandl, R. Reinecke, M. Muhler, *Electrochimica Acta* **54** (2009) 4208-4215. PtRu nanoparticles supported on nitrogen-doped multiwalled carbon nanotubes as catalyst for methanol electrooxidation.
- X. Xia, J. Strunk, W. Busser, M. Comotti, F. Schüth, M. Muhler, *J. Phys. Chem.* **113** (2009) 9328-9335. Thermodynamics and Kinetics of the Adsorption of Carbon Monoxide on Supported Gold Catalysts Probed by Static Adsorption Microcalorimetry: The Role of the Support.
- J. Strunk, K. Kähler, X. Xia, M. Muhler, *Surf. Sci.* **603** (2009) 1776-1783. The surface chemistry of ZnO nanoparticles applied as heterogeneous catalysts in methanol synthesis.
- M. Bron, W. Xia, X. Chen, C. Jin, S. Kundu, T. Nagaiah, R. Chetty, T. Schilling, N. Li, W. Schuhmann, M. Muhler, *Chemie Ingenieur Technik* **81** (2009) 581-589. Elektrokatalyse in Brennstoffzellen und Elektrolyseuren: Kohlenstoff-Nanoröhren-basierte Katalysatoren und neuartige Untersuchungsmethoden.
- S. Kaluza, M. Muhler, *J. Mater. Chem.* **19** (2009) 3914-3922. On the precipitation mechanism and the role of the post-precipitation steps during the synthesis of binary ZnO-Al₂O₃ composites with high specific surface area.
- S. Kundu, T.C. Nagaiah, W. Xia, Y. Wang, S. van Dommele, J.H. Bitter, M. Santa, G. Grundmeier, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *J. Phys. Chem.* **113** (2009) 14302-14310. Electrocatalytic Activity and Stability of Nitrogen-Containing Carbon Nanotubes in the Oxygen Reduction Reaction.
- A. Rittermeier, S. Miao, M. K. Schröter, X. Zhang, M. W. E. van den Berg, S. Kundu, Y. Wang, S. Schimpf, E. Löffler, R. A. Fischer, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11** (2009) 8358-8366. The formation of colloidal copper nanoparticles stabilized by zinc stearate: on-pot single-step synthesis and characterization of the core-shell particles.
- C. Liang, W. Xia, M. v.d. Berg, Y. Wang, H. Soltani-Ahmadi, O. Schlüter, R. A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Mater.* **21** (2009) 2360-2366. Synthesis and Catalytic Performance of Pd Nanoparticle/Functionalized CNF Composites by a Two-Step Chemical Vapor Deposition of Pd(allyl)Cp Precursor.
- C. Jin, W. Xia, T. C. Nagaiah, J. Guo, X. Chen, M. Bron, W. Schuhmann, M. Muhler, *Electrochimica Acta* **54** (2009) 7186-7193. On the role of the thermal treatment of sulfided Rd/CNT catalysts applied in the oxygen reduction reaction.
- A. Binder, M. Seipenbusch, M. Muhler, G. Kasper, *J. Catal.* **268** (2009) 150-155. Kinetics and particle size effects in ethene hydrogenation over supported palladium catalysts at atmospheric pressure.
- Y. Wang, A. Glenz, M. Muhler, Ch. Wöll, *Rev. Sci. Instrum.* **80** (2009) 113108. A new dual-purpose ultrahigh vacuum infrared spectroscopy apparatus optimized for grazing-incidence reflection as well as for transmission geometries.
- C. Jin, M. Holz, W. Xia, B. Mei, S. Kundu, M. Muhler, *ECS Transactions* **25** (2009) 763-770. Vapor Phase Synthesis of Pt Nanoparticles on Carbon Nanotube-Active Carbon Hierarchical Composites.

- S. Schimpf, M. Muhler, "Methanol Catalysts" in "Synthesis of Solid Catalysts" (Ed. K. P. de Jong), Wiley-VCH, Weinheim (2009), pp. 329 – 351.
- V. S. Narkhede, A. De Toni, V. V. Narkhede, M. Guraya, J. W. (Hans) Niemantsverdriet, M. W. E. van den Berg, W. Grünert, H. Gies, *Microporous Mesopor. Mater.* **118** (2009) 52-60. Au/TiO₂ catalysts encapsulated in the mesopores of siliceous MCM-48 – Reproducible synthesis, structural characterization and activity for CO-oxidation.
- A. Yu. Stakheev, I. S. Mashkovsky, O. P. Tkachenko, K. V. Klementiev, W. Grünert, G. N. Baeva, L. M. Kustov, *Izv. AN, Ser. Khim.* **58** (2009) 280-283 (*Russian Chemical Bulletin, International Edition* **58** (2009), 280-283). Obrazovanie nanochastic gidrida Pd v katalizatore Pd/C po dannym in-situ XAS (Formation of palladium hydride nanoparticles in Pd/C catalyst as evidenced by *in situ* XAS data).
- V. V. Narkhede, A. De Toni, V. S. Narkhede, M. Reichinger, A. Birkner, J.W. (Hans) Niemantsverdriet, W. Grünert, H. Gies, *J. Mater. Sci.* **44** (2009) 6701-6709. Pt nanoparticles inside the mesopores of TiO₂-MCM-48: Synthesis, characterization and catalytic activity for CO oxidation.
- G.C. Mondragón Rodríguez, B. Saruhan, O. Petrova, W. Grünert, *Top. Catal.* **52** (2009) 1723-1727. Pd-integrated perovskites as effective catalysts for the selective catalytic reduction of NO_x with propene.
- S. Polarz, A. Orlov, A. Hoffmann, M. R. Wagner, C. Rauch, R. Kirste, W. Gelhoff, Y. Aksu, M. Driess, M. W. E. van den Berg, M. Lehmann, *Chem. Mater.* **21** (2009) 3889-3897. A Systematic Study on Zinc Oxide Materials Containing Group I Metals (Li, Na, K)-Synthesis from Organometallic Precursors, Characterization, and Properties.
- Y. Wang, Ch. Wöll, *Surf. Sci.* **603** (2009) 1589-1599. Chemical reactions on metal oxide surfaces investigated by vibrational spectroscopy
- K. Jacobi, Y. Wang, *Surf. Sci.* **603** (2009) 1600-1604. Interaction of NO with the O-rich RuO₂ (110) Surface at 300 K
- M. Kunat, F. Traeger, H. Qiu, Y. Wang, A. C. Van Veen, Ch. Wöll, P. Kowacik, B. Meyer, C. Hättig, D. Marx, *J. Chem. Phys.* **130** (2009) 144703. Formation of weakly bound, ordered adlayers of CO on rutile TiO₂(110): A combined experimental and theoretical study
- M. Müller, X. Zhang, Y. Wang, R. Fischer, *Chem. Commun.* **2009** (2009) 119–121. Nanometer-sized Titania hosted inside MOF-5
- C. Liang, S. Schwamborn, W. Xia, M. van den Berg, Y. Wang, H. Soltani-Ahmadi, O. Schlüter, R. A. Fischer, M. Muhler, *Chem. Mater.* **21** (2009) 2360–2366. Synthesis and Catalytic Performance of Pd Nanoparticle/Functionalized CNF Composites by a Two-Step Chemical Vapor Deposition of Pd(allyl)(Cp) Precursor
- A. Rittermeier, S. Miao, M. K. Schröter, X. Zhang, M. W. E. van den Berg, S. Kundu, Y. Wang, S. Schimpf, R. A. Fischer, M. Muhler, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11** (2009) 8358-8366. The Formation of Colloidal Copper Nanoparticles Stabilized by Zinc Stearate: One-Pot Single-Step Synthesis and Characterization of the Core-Shell Particles

Biochemie 1

- C. Villmann, J. Oertel, Z.-L. Ma-Högemeier, M. Hollmann, R. Sprengel, K. Becker, H.-G. Breiting, C.-M. Becker, *Journal of Neuroscience* **29**(8) (2009) 2440-2452. Functional complementation of Glra1^{spd-ot}, a glycine receptor subunit mutant, by independently expressed C-terminal domains.

- N. A. Cavara, A. Orth, M. Hollmann, *BMC Neuroscience* **10** (2009) 32. Effects of NR1 splicing on NR1/NR3B-type excitatory glycine receptors. Was "Featured article" on the BMC Neuroscience journal homepage.
- C. Schmidt, C. Klein, M. Hollmann, *Journal of Molecular Biology* **390**(2) (2009) 182-195. *Xenopus laevis* oocytes endogenously express all subunits of the ionotropic glutamate receptor family.
- C. Schmidt, M. Hollmann, *Molecular and Cellular Neuroscience* **42**(2) (2009) 116-127. Molecular and functional characterization of *Xenopus laevis* N-methyl-D-aspartate receptors.
- S.M. Schmid, S. Kott, C. Sager, T. Hülsken, M. Hollmann, *Proceedings of the National Academy of Sciences, USA* **106**(25) (2009) 10320-10325. The glutamate receptor subunit delta2 is capable of gating its intrinsic ion channel as revealed by ligand binding domain transplantation. Pressemitteilung: <http://www.pm.rub.de/pm2009/msg00174.htm>
- C. Sager, J. Terhag, S. Kott, M. Hollmann, *Journal of Biological Chemistry* **284**(47) (2009) 32413-32424. The C-terminal domains of transmembrane AMPA receptor regulatory proteins (TARPs) not only facilitate trafficking but are major modulators of α -amino-3-hydroxy-5-methyl-4-isoxazole propionate (AMPA) receptor function.
- E. Muth-Köhne, J. Terhag, S. Pahl, M. Werner, I. Joshi, M. Hollmann, *Molecular and Cellular Neuroscience* **43**(2) (2010) 209-221. Excitatory GABA_A receptors are the first functional ionotropic neurotransmitter receptors in *in vitro*-generated NSCs and precede glutamate receptors. [Epub ahead of print, 01.12.2009].
- Z.-L. Ma-Högemeier, C. Körber, M. Werner, D. Racine, E. Muth-Köhne, D. Tapken, M. Hollmann, *Journal of Neurochemistry*, in press. Oligomerization in the endoplasmic reticulum and intracellular trafficking of kainate receptors are subunit- but not editing-dependent. Cover photo! [Epub ahead of print, 26.9.2009].
- E. M. Gehring, A. Zurn, F. Klaus, J. Laufer, M. Sopjani, R. Lindner, N. Strutz-Seeböhm, J. M. Tavaré, C. Boehmer, M. Palmada, U.E. Lang, G. Seeböhm, F. Lang *Cell Physiol Biochem*. **24**(5-6):361-8. (2009) Regulation of the glutamate transporter EAAT2 by PIKfyve.
- E. M. Gehring, R.S. Lam, G. Siraskar, E. Koutsouki, G. Seeböhm, O.N. Ureche, L. Ureche, R. Baltaev, J. M. Tavaré, F. Lang *Biochem Biophys Res Commun*. **390**(3):952-7 (2009) PIKfyve upregulates CFTR activity.
- O. Fedorenko, C. Tang, M. Sopjani, M. Föller, E.M.Gehring, N. Strutz-Seeböhm, O.N. Ureche, S. Ivanova, A. Semke, F. Lang, G. Seeböhm, U.E.Lang *Psychopharmacology (Berl)*. **206**(3):429-35. (2009) PIP5K2A-dependent regulation of excitatory amino acid transporter EAAT3.
- U. Henrion, N. Strutz-Seeböhm, M. Duszenko, F. Lang, G. Seeböhm *Cell Physiol Biochem*. **24**(1-2):11-6 (2009) Long QT syndrome-associated mutations in the voltage sensor of I(Ks) channels..
- G. Seeböhm *Heart Rhythm*. **6**(8):1154-5 (2009) Kv7.1 in atrial fibrillation..
- F. Klaus, E. M.Gehring, A. Zürn, J. Laufer, R. Lindner, N. Strutz-Seeböhm, J. M. Tavaré, J. D. Rothstein, C. Boehmer, M. Palmada, I. Gruner, U.E. Lang, G. Seeböhm, F. Lang (2009) Regulation of the Na⁽⁺⁾-coupled glutamate transporter EAAT3 by PIKfyve. *Neurochem Int*. **54**(5-6):372-7.
- N. Strutz-Seeböhm, U. Henrion, K. Steinke, D. Tapken, F. Lang, G. Seeböhm *Channels (Austin)* **3**(2):88-90 (2009) Serum-and glucocorticoid-inducible kinases (SGK) regulate KCNQ1/KCNE potassium channels..

- O. N. Ureche, L. Ureche, U. Henrion, N. Strutz-Seeböhm, F. Bundis, K. Steinmeyer, F. Lang, G. Seeböhm *Biochem Biophys Res Commun.* **384**(1):28-31 (2009) Differential modulation of cardiac potassium channels by Grb adaptor proteins..
- F. Klaus, J. Laufer, K. Czarkowski, N. Strutz-Seeböhm, G. Seeböhm, F. Lang *Biochem Biophys Res Commun.* **381**(3):407-11 (2009) PIKfyve-dependent regulation of the Cl-channel ClC-2.

Biochemie 2

- S. Patz S, C. Colovic, S. Wawro, P. Lafenetre, O. Leske, R. Heumann, S. Schönfelder, J. Tomaschewski, A. Räk, P. Wahle, *Exp Brain Res.* **199** (2009) 265-278. Interneuronal growth and expression of interneuronal markers in visual cortex of mice with transgenic activation of Ras.
- M. Makwana, T. Serchov, M. Hristova, M. Bohatschek, A. Gschwendtner, R. Kalla, Z. Liu, R. Heumann, G. Raivich, *J. Neurochem.* **108** (2009) 1453 - 63. Regulation and function of neuronal GTP-Ras in facial motor nerve regeneration.
- A. Kovtun, R. Heumann, M. Eppler, *Biomed. Mater. Eng.* **19** (2009) 241-7. Calcium phosphate nanoparticles for the transfection of cells.
- Y. Adiguzel, S. Hippe, H. J. Hauswald, R. Stoll, R. Heumann, *FEBS JOURNAL* **276** (2009), H. Suppl. 1, 230. Phosphorus NMR of model membrane interaction with nitric oxide.
- N. Stenzel, C. P. Fetzter, R. Heumann, K. S. Erdmann, *J Cell Sci.* **122** (2009) 3374-84. PDZ-domain-directed basolateral targeting of the peripheral membrane protein FRMPD2 in epithelial cells.
- S. Neumann, A. Kovtun, I. D. Dietzel, M. Eppler, R. Heumann, *Biomaterials* **30** (35) (2009) 6794-6802. The Use of Size-Defined DNA-Functionalized Calcium Phosphate Nanoparticles To Minimise Intracellular Calcium Disturbance During Transfection.
- V. Niederkinkhaus, R. Marx, G. Hoffmann, I. D. Dietzel, *Molecular Endocrinology* **23** (2009) 1494-1504. Thyroid hormone (T3)- induced up-regulation of voltage-activated sodium current in cultured postnatal hippocampal neurons requires secretion of soluble factors from glial cells
- S. Neumann, A. Kovtun, I.D. Dietzel, M. Eppler, R. Heumann, *Biomaterials* **30** (2009) 6794-6802. The use of size-defined DNA-functionalized calcium phosphate nanoparticles to minimise intracellular calcium disturbance during transfection
- P. Happel, I.D. Dietzel, *J. Nanobiotechnology* **7** (2009) 7. Backstep scanning ion conductance microscopy as a tool for long-term investigation of single living cells
- M. Luebben, R. Portmann, G. Kock, R. Stoll, M.M. Young, M. Solioz, *Biomaterials* **22** (2009) 363-375. Structural model of the CopA copper ATPase of *Enterococcus hirae* based on chemical cross-linking.
- M.A. Nazif, J.-A. Bangert, I. Ott, R. Gust, R. Stoll, W.S. Sheldrick, *Journal of Inorganic Biochemistry* **103** (2009) 1405-11414. Dinuclear organoiridium (III) mono- and bis-intercalators with rigid bridging ligands: synthesis, cytotoxicity and DNA binding.
- K.U. Cormann, M. Ikeuchi, M. Rögner, M.M. Nowaczyk, R. Stoll, *Biomolecular NMR Assignments* **3** (2009) 247-249. Sequence-specific ¹H, ¹³C, and ¹⁵N backbone assignment of Psb27 from *Synechocystis* PCC 6803.
- K.U. Cormann, J.-A. Bangert, M. Ikeuchi, M. Rögner, R. Stoll, M.M. Nowaczyk, *Biochemistry* **48** (2009) 8768-8770. Structure of Psb27 in solution: implications for transient binding to photosystem II during biogenesis and repair.

- A. Ziegler and B.T. Hovemann (2009) Distribution of aspartate decarboxylase Black in the visual system of *Drosophila*. In: V. Budnik and P Taghert (eds) *Neurobiology of Drosophila*, Cold Spring Harbor Press, Cold Spring Harbor, New York, p312
- S. Aust and B.T. Hovemann (2009) Cysteine peptidase Tan in *Drosophila* photoreceptor cells is capable of sustaining a continuous flow of histamine neurotransmitter. In: V. Budnik and P Taghert (eds) *Neurobiology of Drosophila*, Cold Spring Harbor Press, Cold Spring Harbor, New York, p23
- W. Jacob, S Pütz, B.T. Hovemann and R. Heumann (2009) *Drosophila* model for LRRK2-induced neurodegeneration. In: M. Hardwick, S. Nagata, and J. Yuan (eds), *Cell Death*, Cold Spring Harbor Press, Cold Spring Harbor, New York
- N. Stenzel, C.P. Fetzter, R. Heumann, K.S Erdmann, *J. Cell Sci.* **122** (2009) 3374-3384. PDZ-domain-directed basolateral targeting of the peripheral membrane protein FRMPD2 in epithelial cells
- Y. Mao, D.M. Balkin, R. Zoncu, K.S. Erdmann, L. Tomasini, F. Hu, M.M. Jin, M.E. Hodson, P. De Camilli *EMBO J.*, **28** (2009), 1831-1842. A PH domain within OCRL bridges clathrin-mediated membrane trafficking to phosphoinositide metabolism

Didaktik der Chemie

- K. Sommer, G. Aufdemkamp, *Chemie in unserer Zeit* **43** (2009) 6, S.408-416. Rund ums Aluminium – Schülerlabor und Tandemfortbildung.
- V. Janouschek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 113, S.24-29. Fettkennzahlen am Beispiel von Palmöl.
- K. Thimm, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 113, S.18-23. Lecithin - mehr als ein Emulgator.
- J. Lorke, S. Frerich, S. Kareth, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 113, S.14-17. Chemie trifft Maschinenbau – Ein fachübergreifendes Unterrichtsprojekt an der Ruhr-Universität Bochum.
- S. Kareth, J. Lorke, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 113, S.10-13. Von der Ölpresse zur Hochdruckextraktion.
- V. Tettenborn, K. Sommer, *Praxis der Naturwissenschaften - Chemie in der Schule* **58** (2009) 4, S.10-12. „Rotweinflecken entfernt man mit Salz“ - Ein Haushaltstrick mithilfe von Fachmethoden auf dem Prüfstand.
- S. Venke, A. Russek, W. Proske, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 110, S.36-41. Vom Rohstoff zum Metall – Zinkblende als Untersuchungsmaterial.
- M. Grube, A. Russek, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 110, S.31-35. Spurenelement Zink – Nachweis von Zink in Nahrungsergänzungsmitteln und Kosmetika.
- R. Demuth, K. Sommer, *MNU Primar* **1** (2009) 1, S. 20-25. Forscher Ferien - ein Ansatz zur Unterstützung von Grundschulkindern aus sozial benachteiligten Umgebungen.
- V. Tettenborn, K. Sommer, *Unterricht Chemie* **20** (2009) 109, S.34-37 + 49-50. Säuren vernichten Papier - Papierkonservierung früher und heute.
- K. Sommer, St. Andreß, A. Kakoschke, R. Wiczorek, S. Hanisch, J. Hanss, *Chemkon* **16** (2009) 1, S.19-30. Vanillezucker oder Vanillinzucker?

Promotionen der Fakultät für Chemie und Biochemie 01.01.2009-31.12.2009

Ilona Kopf

Near-field infrared nanoscopy applied to laterally structured self-assembled monolayers

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

12.01.2009

Markus Rohe

Mehrkernige peroxoreiche TiO-Komplexe: Ein molekularer Zugang zu Elementarschritten der Alkoholorxidation auf TiO₂-Oberflächen und Au/TiO₂-Kompositen

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

20.03.2009

Ayodele Olumayowa Okunola

Electropolymerized Metalloporphyrins: Electrochemical Characterization and Applications in Electrocatalysis

Prof. Dr. W. Schuhmann

27.03.2009

Stefanie Bunse

Molecular and functional analyses of the pannexins in the central nervous system

Prof. Dr. med. R. Dermietzel

01.04.2009

Carsten Milschmann

Spectroscopic and Density Functional Theoretical Investigation of the Electronic Structure of Octahedral Dithiolene Complexes (Cr, Fe, Co and Ru)

Prof. Dr. K. Wieghardt

17.04.2009

Christine Bee

Regulation von Apoptose, Wachstumsstopp und Mitose durch Modulation der RASSF5-Interaktionen

Prof. Dr. Ch. Herrmann

24.04.2009

Adam Michalik

Conductive Polymers for Corrosion Protection: A Critical Investigation

Prof. Dr. M. Stratmann

24.04.2009

Stefan Kaluza

Preparation and Characterization of Ternary Cu Catalysts for Methanol Synthesis

Prof. Dr. M. Muhler

29.05.2009

Jan-Amadé Bangert

NMR-spektroskopische Charakterisierung des Zinkfingers 2 des Nucleoporins 153 (Nup153ZnF2) und zweier Komplexe der Zinkfingerdomäne des Wilms' Tumor Proteins (WT1) mit zwei DNA-Zielsequenzen

Prof. Dr. Raphael Stoll

09.06.2009

Spyros Thomas Cadenbach

Zwischen Koordinationsverbindungen und Clustern - Prinzipien und Konzepte zur Synthese hochkoordinierter, metallreicher Moleküle

Prof. Dr. R. A. Fischer

15.06.2009

Antje Schaefer

Biochemische Charakterisierung neuartiger GTPase aktivierender Proteine der Rho-Familie aus Pflanzen

Prof. Dr. A. Wittinghofer

16.06.2009

Olga Reinhold

Anwendung der FTIR-Spektroskopie für die quantitative Cristobalitanalyse im Arbeitsschutzbereich

Prof. Dr. W. S. Sheldrick

03.07.2009

Shankhamala Kundu

Surface Modifications of Carbon Nanotubes and their Application in Electro-Catalysis

Prof. Dr. M. Muhler

03.07.2009

Todor Toshkov Hikov

Photo-Assisted Preparation of Nanocomposites

Preparation and Copper Decoration of Semiconducting Supports

Prof. Dr. R. A. Fischer

03.07.2009

Jessica Lemke

Synthese asymmetrischer N-heterozyklischer Carbenkomplexe und deren Biokonjugate

Prof. Dr. N. Metzler-Nolte

03.07.2009

Katja Gotthardt

Strukturelle und biochemische Charakterisierung von Guaninnukleotid-bindenden Proteinen der Roco-Familie

Prof. Dr. A. Wittinghofer

06.07.2009

Anna Katharina Gutberlet

Untersuchung der molekularen Aggregate (TCNB)₂, HDO-H₂O und ¹H,²HCl(H₂O)₄ in Heliumnanotröpfchen

Prof. Dr. M. Havenith-Newen

17.07.2009

Sven Mönninghoff

Dendritische Polythioetherliganden zur Synthese von Goldnanopartikel-Oligonucleotid-Monokonjugaten

Prof. Dr. G. von Kiedrowski

17.07.2009

Melanie Oleszak

Design und biologische Eigenschaften von zytotoxisch wirkenden Rhodium^{III} Verbindungen

Prof. Dr. W. S. Sheldrick

24.07.2009

Andrey Olschewski

Organokatalyse durch freie und festphasengebundene Di-, Tri- und Tetrapeptide aus Prolin und nicht natürlichen Tyrosinderivaten

Prof. Dr. M. Feigel

28.08.2009

Lertnarong Sripanom

Studies on the Synthesis of Extended π -Systems: Willgerodt-Kindler Domino Annulation and S_NAr-Reactions

Prof. Dr. G. Dyker

21.09.2009

Steffen Wolf

Simulationen zur Struktur und Funktion heptahelikaler Transmembranproteine

Prof. Dr. Klaus Gerwert

25.09.2009

Daniel Dieter Olschewski

Organokatalyse von Diels-Alder-Reaktionen durch Peptide bestehend aus nicht natürlichen Lysineinheiten

Prof. Dr. M. Feigel

30.09.2009

Elke Muth-Köhne

Investigations on the expression and influence of ionotropic neurotransmitter receptors during stem cell development and differentiation

Prof. Dr. M. Hollmann

27.10.2009

Michael Paul

Rattle-Type Structured Catalysts by the Encapsulation of Au and Pt Nanoparticles in Metal Oxide Hollow Spheres

Prof. Dr. F. Schüth

28.10.2009

Bernd Bastian Schaack

The Solid State Formation of Zeolitic Materials Studied by Mass Spectrometry

Prof. Dr. F. Schüth

28.10.2009

Jörg-Joachim Nitz

Synthesis and Functionalization of Ordered Mesoporous Carbons for Catalytic Applications

Prof. Dr. F. Schüth

28.10.2009

Sascha Hubert Vukojevic

Copper Colloids and Nanoparticulate Cu/ZrO₂-based Catalysts for Methanol Synthesis

Prof. Dr. F. Schüth

28.10.2009

Romy Marx

Führt ein Ca²⁺-Einstrom zu einer erhöhten Verletzbarkeit von Oligodendrozyten gegenüber Cytokinen

Priv.-Doz. Dr. I. Dietzel-Meyer

06.11.2009

Janos Kiss

A Theoretical Investigation of Methanol Synthesis on ZnO Catalysts

Prof. Dr. D. Marx

20.11.2009

Hengshan Qiu

Interaction of adsorbates with clean and metal-covered oxide surfaces: Vibrational spectroscopic studies

Prof. Dr. Ch. Wöll

27.11.2009

Nora Cavara

The role of the NR3 subunits in NMDA receptors

Prof. Dr. M. Hollmann

01.12.2009